

Jean-Louis Basdevant, Jean Dalibard

Philippe Grangier

Mécanique quantique

Textes des problèmes
et corrigés des années
précédentes

Département de Physique

Promotion 2004
Année 1
Tronc commun
PHY311

Mécanique quantique

Textes des problèmes et corrigés
des années précédentes

*Jean-Louis Basdevant, Jean Dalibard,
Philippe Grangier*

Édition 2005

Table des matières

1	Interaction proton-neutron.	2
2	Chaîne fermée de 8 centres.	4
3	Moment magnétique du deutéron.	7
4	Niveaux d'énergie dans un potentiel linéaire	9
5	Mécanisme de formation d'hydrogène moléculaire interstellaire	13
6	Oscillateur dans un champ électrique	18
7	Mesures successives sur la molécule NH ₃	21
8	Pigments organiques	24
9	Oscillations des Neutrinos	26

Les problèmes 1 à 8 ont été donnés comme sujets de contrôle d'environ une heure chacun aux promotions 2000 à 2003. Le problème 9 est un sujet de contrôle d'une année antérieure, d'une durée approximative de 2 heures.

Chaque énoncé est accompagné d'une version en langue anglaise.

1 Interaction proton-neutron.

On considère les états liés stationnaires d'une particule de masse m dans le puits de potentiel

$$V = \infty \quad \text{pour } x < 0, \quad V = -V_0 \quad \text{pour } 0 \leq x \leq a, \quad V = 0 \quad \text{pour } x > a$$

avec $V_0 > 0$.

On écrit la fonction d'onde d'un état lié ($E < 0$)

$$\psi = A \sin kx \quad \text{pour } x \leq a, \quad \psi = B e^{-Kx} \quad \text{pour } x > a \quad .$$

1. Justifier brièvement ces formes et exprimer k et K en fonction de E et V_0 .
2. Ecrire les conditions de continuité en $x = a$. En déduire la condition de quantification. Existe-t-il un état lié quel que soit V_0 ?
3. On utilise ce modèle pour décrire l'interaction nucléaire entre un neutron et un proton. L'expérience montre qu'il n'existe qu'un seul état lié, le deutéron. En déduire que V_0 est compris entre deux limites V_{min} et V_{max} que l'on calculera en MeV (1 MeV = 10^6 eV). On prendra $a = 2 \cdot 10^{-15}$ m = 2 fm. La masse m est la masse réduite $m = (m_p m_n)/(m_p + m_n) \simeq m_p/2$ soit $mc^2 \sim 470$ MeV ; on pourra utiliser $\hbar c \simeq 197$ MeV.fm.
4. Quelle est l'énergie de liaison pour $V_0 = V_{min}$? L'énergie de liaison du deutéron est $E_d = -2,2$ MeV. Utiliser le fait que $|E_d|$ est petit par rapport à V_{min} pour linéariser les équations et calculer V_0 .

English version : Proton-neutron interaction .

Consider the stationary bound states of a particle of mass m in the potential well

$$V = \infty \quad \text{for } x < 0, \quad V = -V_0 \quad \text{for } 0 \leq x \leq a, \quad V = 0 \quad \text{for } x > a$$

with $V_0 > 0$. We write the wave function of a bound state ($E < 0$) as

$$\psi = A \sin kx \quad \text{for } x \leq a, \quad \psi = B e^{-Kx} \quad \text{for } x > a \quad .$$

1. Justify briefly these forms and express k and K in terms of E and V_0 .
2. Write the continuity relations at $x = a$. Deduce from them the quantization condition. Is there a bound state for any value of V_0 ?
3. We use this model to describe the nuclear interaction between a neutron and a proton. Experiment shows that there exists only one bound state, the deuteron. Deduce from this observation that the value of V_0 is between two limits V_{min} and V_{max} , and calculate their numerical values in MeV (1 MeV = 10^6 eV). One can take $a = 2 \cdot 10^{-15}$ m = 2 fm. The mass m is the reduced mass $m = (m_p m_n)/(m_p + m_n) \simeq m_p/2$, i.e. $mc^2 \sim 470$ MeV ; one can use $\hbar c \simeq 197$ MeV.fm.
4. What is the binding energy if $V_0 = V_{min}$? The deuteron binding energy is $E_d = -2,2$ MeV. Use the fact that $|E_d|$ is small compared to V_{min} in order to linearize the equations, and calculate V_0 .

Solution

1. La solution générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps est

$$\psi(x \leq 0) = 0, \quad \psi(0 \leq x \leq a) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi(x > a) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}$$

avec les conditions aux limites $\psi(0) = 0$ et $\psi(\infty) = 0$,
et $k = \sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}$ $K = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$.

2. Les conditions de continuité sont

$$A \sin ka = Be^{-Ka}, \quad ka \cos ka = -KBe^{-Ka}$$

d'où la condition de quantification

$$Ka = -ka \cot ka, \quad \text{avec} \quad K^2 a^2 + k^2 a^2 = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$$

que l'on peut discuter graphiquement comme le potentiel carré. Il n'y a d'état lié que si $\sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} \geq \pi/2$, le nombre d'états liés augmente avec V_0 .

3. Il n'y a qu'un seul état lié si $\pi/2 \leq \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} \leq 3\pi/2$ soit $V_{min} = \pi^2 \hbar^2 / 8ma^2 = 25,5 \text{ MeV}$, $V_{max} = 9V_{min}$.
4. Pour $V = V_{min}$, $E = 0$. $|E_d|$ petit signifie que V_0 est proche de V_{min} . En remplaçant les deux courbes par leurs tangentes $Ka = (\pi/2)(ka - \pi/2) = a\sqrt{-2mE/\hbar^2}$, $ka = \sqrt{-2ma^2 V_0 / \hbar^2}$ d'où

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\frac{\pi}{2} + \frac{2a}{\pi} \sqrt{-2mE/\hbar^2} \right]^2 \simeq 35,9 \text{ MeV} \quad .$$

2 Chaîne fermée de 8 centres.

On considère les états d'un électron dans une structure formée de 8 atomes aux sommets d'un octogone régulier. On désigne par $|\xi_n\rangle$, $n = 1, \dots, 8$ les états de l'électron localisés respectivement au voisinage des atomes $n = 1, \dots, 8$. Ces états sont supposés orthogonaux $\langle \xi_n | \xi_m \rangle = \delta_{n,m}$.

Le hamiltonien \hat{H} de ce système est défini dans la base $\{|\xi_n\rangle\}$, par $\hat{H} = -A\hat{W}$, où $A > 0$, et \hat{W} est défini par :

$$\hat{W}|\xi_n\rangle = (|\xi_{n+1}\rangle + |\xi_{n-1}\rangle)$$

où nous définissons les conditions cycliques $|\xi_9\rangle \equiv |\xi_1\rangle$ et $|\xi_0\rangle \equiv |\xi_8\rangle$. On note $|\varphi_k\rangle$ les états propres de \hat{H} , et E_k , $k = 1, \dots, 8$ les valeurs propres correspondantes.

On définit l'opérateur de translation \hat{R} par $\hat{R}|\xi_n\rangle = |\xi_{n+1}\rangle$.

1. Vérifier que $\hat{R}^8 = \hat{I}$ et en déduire les valeurs propres λ_k , $k = 1, \dots, 8$ de \hat{R} . (Ces valeurs propres sont toutes différentes).
2. En écrivant les vecteurs propres correspondants de \hat{R} sous la forme $|\psi_k\rangle = \sum_{p=1}^8 c_k^p |\xi_p\rangle$, écrire la relation de récurrence pour les coefficients c_k^p et déterminer ces coefficients en normalisant $|\psi_k\rangle$.
Donner la valeur du produit scalaire $\langle \xi_p | \psi_k \rangle$.
3. Vérifier que les vecteurs $|\psi_k\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace à 8 dimensions considéré.
4. Vérifier que ces mêmes vecteurs $|\psi_k\rangle$ sont vecteurs propres de l'opérateur $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger$ défini par $\hat{R}^{-1}|\xi_n\rangle = |\xi_{n-1}\rangle$ et calculer les valeurs propres correspondantes.
5. Exprimer \hat{W} en fonction de \hat{R} et \hat{R}^{-1} . En déduire les vecteurs propres $|\varphi_k\rangle$ de \hat{H} et les niveaux d'énergie correspondants. Discuter les dégénérescences des niveaux.
6. Exprimer les états localisés $|\xi_n\rangle$, $n = 1, \dots, 8$ en fonction des états propres de l'énergie $|\varphi_k\rangle$, $k = 1, \dots, 8$.
7. A l'instant initial $t = 0$ l'électron est localisé sur le site $n = 1$, $|\psi(t=0)\rangle = |\xi_1\rangle$. Calculer la probabilité $p_1(t)$ de retrouver l'électron sur le site $n = 1$ à un instant ultérieur t ; on posera $\omega = A/\hbar$.
8. Existe-t-il des instants t pour lesquels $p_1(t) = 1$? Expliquer pourquoi. La propagation d'un électron sur la chaîne est-elle périodique? Que pensez-vous de la généralisation de ce résultat à un nombre quelconque de centres?

English version : An 8-center closed chain.

We consider the states of an electron in a regular 8-center closed chain of atoms. We note $|\xi_n\rangle$, $n = 1, \dots, 8$ the states of the electron when it is localized in the vicinity of the atoms $n = 1, \dots, 8$ respectively. These states are assumed to be orthogonal $\langle \xi_n | \xi_m \rangle = \delta_{n,m}$.

The Hamiltonian \hat{H} of this system is defined in the basis $\{|\xi_n\rangle\}$, by $\hat{H} = -A\hat{W}$, where $A > 0$, and \hat{W} is defined by :

$$\hat{W}|\xi_n\rangle = (|\xi_{n+1}\rangle + |\xi_{n-1}\rangle)$$

where we use the cyclic definitions $|\xi_9\rangle \equiv |\xi_1\rangle$ and $|\xi_0\rangle \equiv |\xi_8\rangle$. We note $|\varphi_k\rangle$ the eigenstates of \hat{H} , and E_k , $k = 1, \dots, 8$ the corresponding eigenvalues.

We define the translation operator \hat{R} by $\hat{R}|\xi_n\rangle = |\xi_{n+1}\rangle$.

1. Check that $\hat{R}^8 = \hat{I}$ and calculate the eigenvalues λ_k , $k = 1, \dots, 8$ of \hat{R} (these eigenvalues are all different).
2. We write the corresponding eigenvectors of \hat{R} as $|\psi_k\rangle = \sum_{p=1}^8 c_k^p |\xi_p\rangle$. Write the recursion relation between the coefficients c_k^p and determine these coefficients by normalizing $|\psi_k\rangle$. Give the values of the scalar products $\langle \xi_p | \psi_k \rangle$.
3. Check that the vectors $|\psi_k\rangle$ form an orthonormal basis of the 8-dimensional space under consideration.
4. Check that these same vectors $|\psi_k\rangle$ are also the eigenvectors of the operator $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger$ defined by $\hat{R}^{-1}|\xi_n\rangle = |\xi_{n-1}\rangle$ and calculate the corresponding eigenvalues.
5. Express \hat{W} in terms of \hat{R} and \hat{R}^{-1} and thereby deduce the eigenstates $|\varphi_k\rangle$ of \hat{H} and the corresponding energy levels. Discuss the degeneracies of these levels.
6. Express the localized states $|\xi_n\rangle$, $n = 1, \dots, 8$ in terms of the energy eigenstates $|\varphi_k\rangle$, $k = 1, \dots, 8$.
7. At time $t = 0$ the electron is assumed to be localized on the site $n = 1$, $|\psi(t = 0)\rangle = |\xi_1\rangle$. Calculate the probability $p_1(t)$ to find the electron again on the site $n = 1$ at a later time t ; we set $\omega = A/\hbar$.
8. Does there exist a time $t \neq 0$ for which $p_1(t) = 1$? Explain why. Is the propagation of an electron on the chain periodic? How does this result generalize to an arbitrary number of centers along the chain?

Solution

1. On a, de façon évidente, $\hat{R}^8 = \hat{I}$, par conséquent $\lambda_k^8 = 1$ et $\lambda_k = e^{ik\pi/4}$ $k = 1, \dots, 8$.
2. La définition $\hat{R}|\psi_k\rangle = e^{ik\pi/4}|\psi_k\rangle$ donne la relation de récurrence $e^{ik\pi/4}c_k^p = c_k^{p-1}$. Soit (à une phase arbitraire près) $c_k^p = e^{-ikp\pi/4}/\sqrt{8}$.
3. On a bien $\langle \psi_k | \psi_j \rangle = (1/8) \sum_p e^{-i(j-k)p\pi/4} = \delta_{k,j}$, CQFD.
4. Par un calcul direct, on a $\hat{R}^{-1}|\psi_k\rangle = e^{-ik\pi/4}|\psi_k\rangle$. Les valeurs propres de $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger$ sont $\lambda_k^{-1} = \lambda_k^*$.
5. On a évidemment $\hat{W} = (\hat{R} + \hat{R}^{-1})$ ou $\hat{H} = -A(\hat{R} + \hat{R}^{-1})$. Les vecteurs propres de \hat{H} sont donc les mêmes que ceux de \hat{R} et de \hat{R}^{-1} , $|\varphi_k\rangle = (1/\sqrt{8}) \sum_{p=1}^8 e^{-ikp\pi/4} |\xi_p\rangle$, $k = 1, \dots, 8$, avec les valeurs propres $E_k = -2A \cos(k\pi/4)$. Le niveau fondamental $E_8 = -2A$ est non dégénéré, les niveaux $E_7 = E_1 = -A\sqrt{2}$, $E_6 = E_2 = 0$ et $E_5 = E_3 = A\sqrt{2}$ sont dégénérés deux fois, le niveau $E_4 = 2A$ est non dégénéré.
6. Puisque les vecteurs $\{|\varphi_k\rangle\}$ forment une base hilbertienne, on a

$$|\xi_n\rangle = \sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k | \xi_n \rangle = \sum_k (c_k^n)^* |\varphi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_k e^{ikn\pi/4} |\varphi_k\rangle \quad .$$

7. On a $|\psi(t = 0)\rangle = (1/\sqrt{8}) \sum_k e^{ik\pi/4} |\varphi_k\rangle$, soit $|\psi(t)\rangle = (1/\sqrt{8}) \sum_k e^{i(k\pi/4 - E_k t/\hbar)} |\varphi_k\rangle$. La probabilité demandée est $p_1(t) = |\langle \xi_1 | \psi(t) \rangle|^2$ soit $p_1(t) = |(1/8) \sum_k e^{-iE_k t/\hbar}|^2$. Insérant les valeurs des énergies E_k on obtient, en posant $\omega = A/\hbar$

$$p_1(t) = |(1/8) \sum_k e^{-iE_k t/\hbar}|^2 = |(1/4)(1 + 2 \cos(\omega t \sqrt{2}) + \cos(2\omega t))^2| \quad .$$

8. On a bien évidemment $p_1(0) = 1$. Pour obtenir $p_1(t) = 1$ à un instant ultérieur il faudrait trouver $t \neq 0$ tel que $\cos(\omega t\sqrt{2}) = 1$ et $\cos(2\omega t) = 1$. Cela signifierait que $\omega t\sqrt{2} = 2N\pi$ et $2\omega t = 2N'\pi$ avec N et N' entiers. En prenant le rapport de ces deux expressions, il faudrait que $\sqrt{2} = N'/N$, soit $\sqrt{2}$ rationnel! Par conséquent, la particule ne se retrouve jamais dans son état de départ, sur le site 1, et le système a une évolution non-périodique. On peut toutefois montrer qu'il revient aussi près que l'on veut de son point de départ si l'on attend un temps t suffisamment long, ce que l'on appelle l'ergodicité. Ce type d'évolution dans le temps s'appelle un mouvement *quasi-périodique*; il est semblable aux structures spatiales quasi-cristallines. Avec 2 centres, molécule NH_3 , 4 centres, ou pour le benzène, avec 6 centres, ce phénomène ne se produit pas car les niveaux d'énergie ont des rapports rationnels et l'évolution est périodique. En revanche, au delà de $n = 6$ centres, on observera toujours le même phénomène, les valeurs des $\cos(2k\pi/n)$, $k = 1, \dots, n$ ayant toujours des rapports irrationnels.

3 Moment magnétique du deutéron.

On observe qu'un noyau de deutérium plongé dans un champ magnétique uniforme \mathbf{B} possède trois états d'énergie notés $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$, d'énergies respectives $E_0, 0, -E_0$, avec $E_0 > 0$. On posera $\omega = E_0/\hbar$.

Ce noyau a un moment magnétique. On suppose que l'observable \hat{M} associée à la projection de ce moment magnétique sur une direction fixe perpendiculaire au champ \mathbf{B} a la forme $\hat{M} = \mu_0 \hat{A}$, avec $\mu_0 > 0$, où \hat{A} est défini par

$$\hat{A}|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle, \quad \hat{A}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle], \quad \hat{A}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \quad .$$

1. Ecrire la matrice représentative de \hat{A} dans la base $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$.
2. Calculer les valeurs propres m_1, m_2 et m_3 de \hat{M} et les vecteurs propres normalisés correspondants $|1\rangle, |2\rangle$ et $|3\rangle$, en ordonnant les valeurs propres $m_1 > m_2 > m_3$.
3. On suppose qu'à l'instant $t = 0$ l'état du noyau est $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculer $\langle E \rangle$ et ΔE dans cet état.
4. Calculer, à l'instant t , la valeur moyenne $\langle M \rangle$ dans l'état $|\psi(t)\rangle$ défini ci-dessus.
5. Quelles sont les probabilités de trouver m_1, m_2 et m_3 à l'instant t lors d'une mesure de M sur $|\psi(t)\rangle$?
6. Interpréter physiquement cette évolution de la composante du moment magnétique transverse.

English version : Magnetic moment of the deuteron.

When a deuterium nucleus is placed in a uniform magnetic field \mathbf{B} , one observes that it has three energy states which we note $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$, of respective energies $E_0, 0, -E_0$, with $E_0 > 0$. We set $\omega = E_0/\hbar$.

This nucleus possesses a magnetic moment and we assume that the observable \hat{M} associated with the projection of this magnetic moment along a direction perpendicular to the field \mathbf{B} has the form $\hat{M} = \mu_0 \hat{A}$, with $\mu_0 > 0$, where \hat{A} is defined by

$$\hat{A}|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle, \quad \hat{A}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle], \quad \hat{A}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \quad .$$

1. Write the matrix representation of \hat{A} in the basis $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$.
2. Calculate the eigenvalues m_1, m_2 and m_3 of \hat{M} and the corresponding normalized eigenvectors $|1\rangle, |2\rangle$ and $|3\rangle$, ordering the eigenvalues as $m_1 > m_2 > m_3$.
3. We assume that at time $t = 0$ the state of the nucleus is $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculate $\langle E \rangle$ and ΔE in this state.
4. Calculate, at time t , the expectation value $\langle M \rangle$ in the state $|\psi(t)\rangle$ defined above.
5. What are the probabilities to find m_1, m_2 and m_3 at time t by measuring M on $|\psi(t)\rangle$?
6. Give a physical interpretation to this evolution of the transverse component of the magnetic moment.

Solution

1. Dans la base $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$, \hat{A} est représenté par la matrice

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

2. Les valeurs propres de \hat{A} sont $a_1 = 1$, $a_2 = 0$, $a_3 = -1$. Les vecteurs propres correspondants sont respectivement

$$|1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad .$$

D'où les vecteurs propres et valeurs propres de \hat{M}

$$|1\rangle \quad m_1 = \mu_0; \quad |2\rangle \quad m_2 = 0; \quad |3\rangle \quad m_3 = -\mu_0 .$$

3. $|\psi(0)\rangle = |1\rangle = [|+\rangle + \sqrt{2}|0\rangle + |-\rangle]/2$ et $\langle E \rangle = 0$, $\Delta E = E_0/\sqrt{2}$.

4.

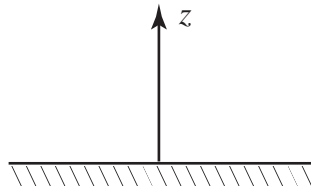
$$|\psi(t)\rangle = [|+\rangle e^{-i\omega t} + \sqrt{2}|0\rangle + |-\rangle e^{i\omega t}]/2$$

d'où $\langle M \rangle = \mu_0 \cos \omega t$.

5. Puisque $P(m_i) = |\langle i|\psi(t)\rangle|^2$, on obtient $P(+\mu_0) = (1 + \cos \omega t)^2/4$, $P(0) = (\sin^2 \omega t)^2/2$, $P(-\mu_0) = (1 - \cos \omega t)^2/4$.
6. Cette composante transverse du moment magnétique a un mouvement sinusoïdal de pulsation ω . De façon générale, on montrerait que la composante du moment magnétique dans le plan perpendiculaire à \mathbf{B} a un mouvement circulaire uniforme de vitesse angulaire ω autour de \mathbf{B} (Précession de Larmor, voir les chapitres 8 et 10 du cours).

4 Niveaux d'énergie dans un potentiel linéaire

On se propose d'étudier les niveaux d'énergie d'un électron au voisinage de l'armature d'un condensateur plan. On suppose que l'électron est contraint à se déplacer suivant l'axe vertical (voir la figure). Son mouvement est uni-dimensionnel, on note z sa position et on suppose que l'armature inférieure du condensateur (chargée positivement) est une paroi infranchissable. On note $-q$ la charge de l'électron ($q > 0$) et m sa masse. L'énergie potentielle électrostatique de l'électron est $V(z) = q\mathcal{E}z$ pour $z \geq 0$ et $V(z) = \infty$ pour $z < 0$; dans cette expression, le champ électrique constant \mathcal{E} est positif, $\mathcal{E} > 0$. On suppose, pour simplifier, que l'armature supérieure est à très grande distance (à $z = \infty$).

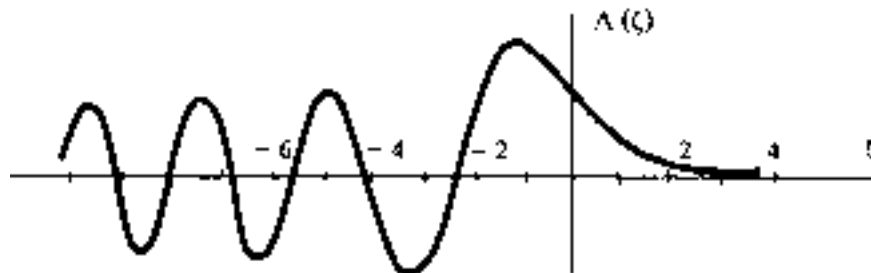


1. Ecrire l'équation qui détermine les fonctions propres $\psi_n(z)$ et les valeurs propres E_n correspondantes.
2. Quelles conditions aux limites en $z = 0$ et $z = \infty$ doivent satisfaire les fonctions propres ?
3. En posant $z = z_0 x$ et $E = E_0 \epsilon$, ramener l'équation aux valeurs propres à l'équation pour des quantités sans dimension :

$$-\psi''(x) + x\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad (1)$$

Donner l'expression de z_0 et E_0 .

4. Les solutions de l'équation différentielle $u''(\zeta) - \zeta u(\zeta) = 0$ sont des fonctions spéciales appelées fonctions d'Airy. La solution $A(\zeta)$ qui s'annule pour $\zeta \rightarrow \infty$ est représentée sur la figure.



$$\text{On a pour } \zeta \rightarrow \infty, \quad A(\zeta) \sim \frac{\alpha}{2\zeta^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\zeta^{3/2}\right) \quad (a)$$

$$\text{et pour } \zeta \rightarrow -\infty, \quad A(\zeta) \sim \frac{\alpha}{|\zeta|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\zeta^{3/2} + \pi/4\right) \quad (b)$$

où α est une constante de normalisation. Les premiers zéros ζ_n de $A(\zeta)$ sont $\zeta_1 = -2,338$, $\zeta_2 = -4,088$, $\zeta_3 = -5,521$. Ainsi que les suivants, ils s'obtiennent en bonne approximation à partir de la forme (b) ci-dessus.

Quels sont les niveaux d'énergie de l'électron ? Comment obtient-on les fonctions d'onde correspondantes ?

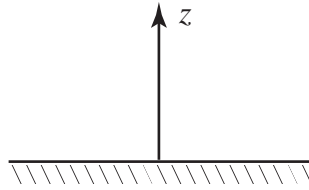
5. Calculer les deux premiers niveaux d'énergie pour une valeur du champ de $\mathcal{E} = 10^6$ V/m. Quelle est la fréquence d'un photon émis ou absorbé lors d'une transition entre ces deux états ?

6. Doit-on tenir compte de cette quantification de l'énergie à la température habituelle ($kT \sim 1/40$ eV)? A quelle température doit-on descendre pour observer le phénomène correctement?
7. Quel est l'ordre de grandeur de la hauteur moyenne de l'électron dans l'état fondamental?
8. Avec des techniques de manipulation de neutrons ultra-froids, on a pu, à Grenoble, mesurer les états stationnaires de neutrons dans le champ de pesanteur, au dessus d'un miroir situé à $z = 0$.
 - Sachant que la masse du neutron est $M \simeq 1,675 \cdot 10^{-27}$ kg, et en prenant la valeur $g = 9,8 \text{ m s}^{-2}$ pour l'accélération de la pesanteur, quelles sont les énergies des deux premiers niveaux gravitationnels du neutron?
 - Quel est l'ordre de grandeur de la hauteur moyenne du neutron au dessus du miroir dans l'état fondamental?
 - Par le théorème du viriel (dont la démonstration, qui n'est pas demandée, se trouve dans le cours) on peut démontrer que, dans ce problème, on a dans *tout* état stationnaire l'égalité $2\langle p^2/2M \rangle = \langle V(z) \rangle$. Calculer la valeur exacte de $\langle z \rangle$ dans l'état fondamental.
 - Comparer l'énergie de l'état fondamental avec l'énergie potentielle classique d'une particule de cette masse à cette altitude $\langle z \rangle$. Expliquer la différence.

English version : Energy levels in a linear potential.

We want to study the energy levels of an electron near the electrode of a planar capacitor.

We assume the electron has a one-dimensional motion along the vertical axis (see the figure). We note z its position and we assume that it cannot penetrate the lower (positively charged) electrode at $z = 0$. We note $-q$ the charge of the electron ($q > 0$) and m its mass. The electrostatic potential energy of the electron is $V(z) = q\mathcal{E}z$ for $z \geq 0$ and $V(z) = \infty$ for $z < 0$; in this expression, the constant electric field \mathcal{E} is positive, $\mathcal{E} > 0$. For simplicity, we assume that the negative electrode is at a very large distance (in fact at $z = \infty$).

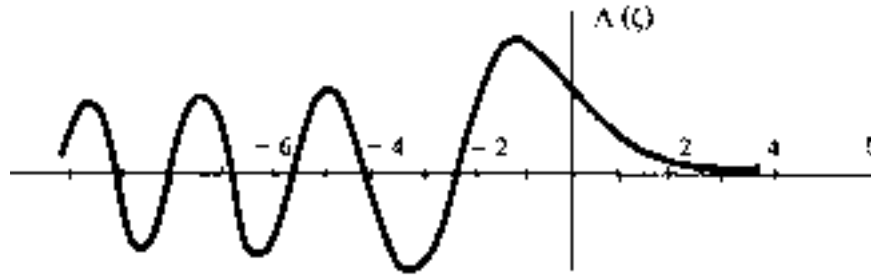


1. Write the equation that determines the eigenfunctions $\psi_n(z)$ and the corresponding eigenvalues E_n .
2. What boundary conditions must the eigenfunctions satisfy at $z = 0$ and $z = \infty$?
3. By setting $z = z_0 x$ and $E = E_0 \epsilon$, transform the eigenvalue equation into the following equation involving dimensionless quantities :

$$-\psi''(x) + x\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad (2)$$

Give the expression of z_0 and E_0 .

4. The solutions of the differential equation $u''(\zeta) - \zeta u(\zeta) = 0$ are called the Airy functions. The solution $A(\zeta)$ that vanishes for $\zeta \rightarrow \infty$ is represented below.



$$\text{For } \zeta \rightarrow \infty, \quad A(\zeta) \sim \frac{\alpha}{2\zeta^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\zeta^{3/2}\right) \quad (a)$$

$$\text{and for } \zeta \rightarrow -\infty, \quad A(\zeta) \sim \frac{\alpha}{|\zeta|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\zeta^{3/2} + \pi/4\right) \quad (b)$$

where α is a normalization constant. The first zeros of $A(\zeta)$ are $\zeta_1 = -2,338$, $\zeta_2 = -4,088$, $\zeta_3 = -5,521$. They are obtained in good approximation from form (b) above.

What are the energy levels of the electron? How does one obtain the corresponding wave functions?

5. Calculate the first two energy levels for a field of $\mathcal{E} = 10^6$ V/m. What is the frequency of a photon emitted or absorbed in a transition between these two states?
6. Does one need to take into account this energy quantization at room temperature ($kT \sim 1/40$ eV)? At what temperature must one operate in order to observe this energy quantization properly?
7. What is the *order of magnitude* of the mean position of the electron in its ground state?
8. Using ultracold neutron techniques, it has been possible to measure, in Grenoble, the stationary states of neutrons in the earth's gravitational field, above a mirror located at $z = 0$.
 - The neutron mass is $M \simeq 1,675 \cdot 10^{-27}$ kg; we take the value $g = 9,8$ m s⁻² for the acceleration of gravity. What are the energies of the two lowest lying gravitational energy levels of a neutron?
 - What is the order of magnitude of the mean altitude of a neutron above the mirror in its ground state?
 - Using the virial theorem (whose proof is not required here, it can be found in the textbook), one can show that in this problem, one has in *any* energy eigenstate the equality $2\langle p^2/2M \rangle = \langle V(z) \rangle$. Calculate the exact value of $\langle z \rangle$ in the ground state.
 - Compare the quantum ground-state energy with the classical potential energy of the neutron at the altitude $\langle z \rangle$. Explain the difference.

Solution

1. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n''(z) + q\mathcal{E}z\psi_n(z) = E_n\psi_n(z) \quad .$$

2. $\psi(0) = 0, \quad \psi(\infty) = 0.$
 3. Le changement $z = z_0 x$ et $E = E_0 \epsilon$, avec

$$z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2mq\mathcal{E}} \right)^{1/3}, \quad \text{et} \quad E_0 = \left(\frac{\hbar^2 q^2 \mathcal{E}^2}{2m} \right)^{1/3}$$

donne bien l'équation aux valeurs propres voulue

$$-\psi''(x) + x\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad (3)$$

avec $\psi(0) = 0$ et $\psi(\infty) = 0.$

4. Par la translation $\zeta = x - \epsilon$ l'équation (3) se transforme en

$$u''(\zeta) - \zeta u(\zeta) = 0 \quad \text{avec} \quad \psi(x) = u(x - \epsilon) \quad .$$

Les conditions aux limites deviennent alors

$$u(\infty) = 0, \quad u(-\epsilon) = 0 \quad .$$

La quantification vient de cette dernière condition : $\epsilon_n = -\zeta_n$ où les ζ_n sont les zéros de la fonction d'Airy, c'est-à-dire $E_n = -E_0 \zeta_n$.

Les fonctions propres s'obtiennent directement à partir de la fonction d'Airy : $\psi_n(z) = \lambda A((z/z_0) + \zeta_n)$ pour $z > 0$, où λ est une constante de normalisation, et $\psi_n(z) = 0$ pour $z \leq 0$.

5. Pour $\mathcal{E} = 10^6$ V/m, on obtient $E_0 = 3,36 \cdot 10^{-3}$ eV. Les deux premiers niveaux d'énergie sont $E_1 = 7,85 \cdot 10^{-3}$ eV et $E_2 = 13,73 \cdot 10^{-3}$ eV, soit une fréquence $\nu = (E_2 - E_1)/h = 1420$ GHz ou une longueur d'onde $\lambda = 0,21$ mm.
 6. L'espacement des niveaux est relativement faible devant l'énergie d'agitation thermique $kT \simeq 0,025$ eV. Pour éviter que l'agitation thermique ne perturbe les observations, il faut descendre à des températures de quelques dizaines de K.
 7. Pour $\mathcal{E} = 10^6$ V/m, on obtient $z_0 = 3,4$ nm, ce qui est l'ordre de grandeur de $\langle z \rangle$.
 8. Dans le cas des neutrons et du champ de pesanteur, on remplace l'énergie potentielle électrostatique $V(z) = q\mathcal{E}z$ par le potentiel gravitationnel $V(z) = Mgz$,

– On obtient

$$z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2M^2G} \right)^{1/3}, \quad \text{et} \quad E_0 = \left(\frac{\hbar^2 G^2 M}{2} \right)^{1/3}$$

soit $E_0 \sim 6 \cdot 10^{-13}$ eV et $z_0 \sim 5,86$ μm . L'énergie du fondamental est donc $E_1 = 2,338 E_0 = 1,4 \cdot 10^{-12}$ eV.

– Par le théorème du viriel, on a $2\langle p^2/2M \rangle = \langle V(z) \rangle$. On a d'autre part, dans tout état stationnaire $|n\rangle$, $E_n = \langle p^2/2M \rangle + \langle V(z) \rangle$. Par conséquent $E_n = 3\langle V(z) \rangle = 3Mg\langle z \rangle$. D'où la valeur exacte de $\langle z \rangle = E_1/3Mg = 4,5$ μm .

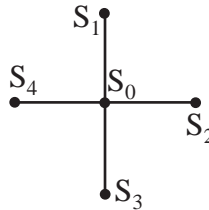
– L'énergie potentielle d'un neutron "classique" à cette hauteur est $V_{class} = Mg\langle z \rangle = 4,7 \cdot 10^{-13}$ eV, donc évidemment la même que la valeur moyenne de l'énergie potentielle quantique. Elle n'est que le tiers de l'énergie (totale) du niveau quantique qui contient évidemment une part d'énergie cinétique, qui met en "lévitation" quantique le neutron. Dans le cas classique, le niveau fondamental du neutron correspondrait à une altitude nulle, ce qui serait contraire aux relations d'incertitude.

L'expérience faite à Grenoble est due à V. Nesvizhevsky et al., Nature, vol 415, p. 297 (2002)

5 Mécanisme de formation d'hydrogène moléculaire interstellaire

L'hydrogène moléculaire H_2 du milieu interstellaire ne peut se former à partir de l'hydrogène atomique H que par l'intermédiaire de catalyseurs que sont les micro-cristaux de glace présents dans ce milieu. Les atomes H peuvent être adsorbés par ces cristaux, ils migrent alors de site en site par effet tunnel. Lorsque deux atomes H se retrouvent sur le même site du cristal, la réaction $H + H \rightarrow H_2 + \gamma$ peut se produire et la molécule H_2 quitte le cristal qui, lui, absorbe l'énergie de réaction du photon ($E_\gamma \sim 4,5$ eV).

Pour simuler le cristal et la migration des atomes d'hydrogène, on considère un modèle de cristal très simplifié, dans lequel un atome H situé à l'instant $t = 0$ sur le site s_0 (voir la figure), ne peut évoluer au cours du temps que vers les sites voisins s_1, s_2, s_3 et s_4 .



On désigne par $|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, |\phi_4\rangle$, les cinq états (orthonormés) de cet atome quand il est situé au voisinage de l'un de ces sites. Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'atome de sauter d'un site à l'autre par effet tunnel, les cinq états $|\phi_i\rangle$ sont états propres de l'hamiltonien \hat{H}_0 avec la même énergie E_0 .

Le couplage entre l'état $|\phi_0\rangle$ et les états $|\phi_k\rangle, k = 1 \dots 4$ modifie l'hamiltonien. On doit ajouter un terme \hat{H}_1 défini par

$$\begin{aligned}\hat{H}_1|\phi_0\rangle &= -a(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \\ \hat{H}_1|\phi_k\rangle &= -a(|\phi_0\rangle) \quad k = 1 \dots 4\end{aligned}$$

où la quantité a est réelle positive. On néglige les autres couplages possibles.

1. Ecrire la forme matricielle de $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$
2. On considère les 3 états suivants

$$\begin{aligned}|\Psi_1\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle) \\ |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle) \\ |\Psi_3\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle)\end{aligned}$$

Vérifier qu'ils sont vecteurs propres orthonormés de \hat{H} et donner les valeurs propres $E_i, i = 1 \dots 3$ correspondantes.

3. Montrer que deux états indépendants de la forme

$$|\Psi_n\rangle = \gamma_n(c_n|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \quad n = 4, 5 \quad ,$$

où γ_n et c_n sont des constantes que l'on déterminera, sont également états propres orthonormés de \hat{H} et donner les valeurs propres E_4 et E_5 correspondantes en supposant $E_4 < E_5$.

4. Le déterminant de la matrice

$$M = \begin{pmatrix} x & y & y & y & y \\ y & x & 0 & 0 & 0 \\ y & 0 & x & 0 & 0 \\ y & 0 & 0 & x & 0 \\ y & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix}$$

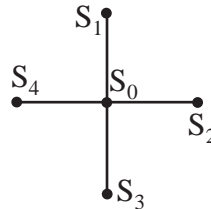
est $\det M = x^3(x^2 - 4y^2)$. Vérifier les résultats obtenus précédemment.

5. Donner les niveaux d'énergie de \hat{H} et les états propres normalisés correspondants. Quelle est la dégénérescence de ces niveaux ?
6. L'atome d'hydrogène se trouve à l'instant $t = 0$ sur le site s_0 . Ecrire son état $|\psi(t)\rangle$ à un instant ultérieur.
7. Discuter la localisation de l'atome à l'instant t . Au bout de quel temps T peut-on dire que l'atome a changé de site ?
8. Calculer la valeur numérique du temps T en prenant $4a = 5 \cdot 10^{-5}$ eV.
9. Deux sites d'un cristal de glace sont distants d'environ 0.3 nm. On suppose que la taille du cristal est d'environ 0.6 μm , et que le temps de migration entre deux sites voisins est le temps T trouvé précédemment. Quel est, à votre avis, l'ordre de grandeur du temps pour que deux atomes d'hydrogène adsorbés au hasard sur la surface du cristal se rencontrent.

English version : A model for the formation of interstellar molecular hydrogen

In the interstellar medium, molecular hydrogen H_2 can only be formed starting from H atoms through a catalytic mechanism. Micro-crystals of ice are present in this medium. The hydrogen atoms can be adsorbed on these crystals, they can then migrate from one site to another by quantum tunneling. When two hydrogen atoms meet on the same site, the reaction $H + H \rightarrow H_2 + \gamma$ can take place since the crystal absorbs the energy of the photon ($E_\gamma \sim 4,5$ eV), and the H_2 molecule leaves the crystal.

In order to simulate the crystal and the migration of the atoms, we consider a simplified model where a hydrogen atom located initially (at $t = 0$) on the site s_0 (see the figure) can only evolve towards 4 neighboring sites s_1, s_2, s_3 and s_4 .



We note $|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, |\phi_4\rangle$, the five (orthonormal) states of the atom when it is located in the vicinity of the five sites. If we neglect the possibility that the atom can jump from one site to another by quantum tunneling, the five states $|\phi_i\rangle$ are eigenstates of the Hamiltonian \hat{H}_0 with the same energy E_0 .

The coupling between the state $|\phi_0\rangle$ and the states $|\phi_k\rangle$, $k = 1 \dots 4$ modifies the Hamiltonian. We must add a coupling term \hat{H}_1 defined by

$$\begin{aligned}\hat{H}_1|\phi_0\rangle &= -a(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \\ \hat{H}_1|\phi_k\rangle &= -a(|\phi_0\rangle) \quad k = 1 \dots 4\end{aligned}$$

where the quantity a is real positive. We neglect all other possible couplings.

1. Write the matrix form of $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$
2. We consider the three following states

$$\begin{aligned}|\Psi_1\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle) \\ |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle) \\ |\Psi_3\rangle &= \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle)\end{aligned}$$

Check that they are orthonormal eigenvectors of \hat{H} and give the corresponding eigenvalues E_i , $i = 1 \dots 3$.

3. Show that there exist two independent states of the form

$$|\Psi_n\rangle = \gamma_n(c_n|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \quad n = 4, 5 \quad , \quad (4)$$

where γ_n and c_n are constants, which are also orthonormal eigenvectors of \hat{H} . Calculate γ_n and c_n and the eigenvalues E_4 and E_5 , assuming $E_4 < E_5$.

4. The determinant of the matrix

$$M = \begin{pmatrix} x & y & y & y & y \\ y & x & 0 & 0 & 0 \\ y & 0 & x & 0 & 0 \\ y & 0 & 0 & x & 0 \\ y & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix}$$

is $\det M = x^3(x^2 - 4y^2)$. Check the previous results.

5. Give the energy levels of \hat{H} and the corresponding orthonormal eigenvectors. What is the degeneracy of these levels.
6. At time $t = 0$ the hydrogen atom is located on site s_0 . Write its state $|\psi(t)\rangle$ at a later time.
7. Discuss the localization of the atom at time t . After what amount of time T can one say that the atom has left the site s_0 ?
8. Calculate the numerical value of T with $4a = 5 \cdot 10^{-5}$ eV.
9. Two neighboring sites of a cristal are separated by a distance 0.3 nm. We assume that the time to jump between two neighboring sites on the surface of the cristal has the value T calculated above, and that the size of the cristal is roughly 0.6 μm . What is, in your opinion, the order of magnitude of the time which is necessary for two hydrogen atoms adsorbed at random on the surface of the cristal to meet.

Solution

1. On a

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -a & -a & -a & -a \\ -a & E_0 & 0 & 0 & 0 \\ -a & 0 & E_0 & 0 & 0 \\ -a & 0 & 0 & E_0 & 0 \\ -a & 0 & 0 & 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

2. On obtient sans difficulté

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi_1\rangle &= E_0|\Psi_1\rangle \\ \hat{H}|\Psi_2\rangle &= E_0|\Psi_2\rangle \\ \hat{H}|\Psi_3\rangle &= E_0|\Psi_3\rangle \end{aligned}$$

Les trois vecteurs sont vecteurs propres orthonormés de \hat{H} avec valeurs propres $E_i = E_0$, $i = 1 \dots 3$.

3. Les deux états indépendants demandés correspondent à

$$- c_4 = 2, \gamma_4 = 1/\sqrt{8} \text{ soit}$$

$$|\Psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(2|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \quad , \quad (6)$$

$$- c_5 = -2, \gamma_5 = 1/\sqrt{8} \text{ soit}$$

$$|\Psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(-2|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle) \quad , \quad (7)$$

Les valeurs propres correspondantes sont $E_4 = E_0 - 2a$ et $E_5 = E_0 + 2a$.

4. Les racines de $\det M = x^3(x^2 - 4y^2) = 0$ sont $x = 0$ (racine triple), $x = y$ et $x = -y$. On retrouve bien les valeurs propres E_n ci-dessus si l'on pose $x = E_0 - E_n$ et $y = -a$.

5. Les niveaux d'énergie de \hat{H} et les états propres correspondants sont donc, par exemple,

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0, & |\Psi_1\rangle \\ E_2 &= E_0, & |\Psi_2\rangle \\ E_3 &= E_0, & |\Psi_3\rangle \\ E_4 &= E_0 - 2a, & |\Psi_4\rangle \\ E_5 &= E_0 + 2a, & |\Psi_5\rangle \quad . \end{aligned}$$

Bien entendu, la valeur propre $E = E_0$ est trois fois dégénérée, toute combinaison linéaire orthonormée de $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$ et $|\Psi_3\rangle$ convient tout aussi bien.

6. Si l'atome d'hydrogène se trouve à l'instant $t = 0$ sur le site s_0 , son état initial est

$$|\psi(0)\rangle = |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_4\rangle - |\Psi_5\rangle) \quad .$$

On a par conséquent, en choisissant $E_0 = 0$, ce qui est un choix de l'origine des énergies, et en posant $2a/\hbar = \omega$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_4\rangle e^{i\omega t} - |\Psi_5\rangle e^{-i\omega t}) \quad . \quad (8)$$

En remplaçant $|\Psi_4\rangle$ et $|\Psi_5\rangle$ par leurs expressions en termes d'états localisés, on a aussi

$$|\psi(t)\rangle = [\cos \omega t |\phi_0\rangle + \frac{i}{2} \sin \omega t (|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle + |\phi_3\rangle + |\phi_4\rangle)] \quad (9)$$

7. On voit que la probabilité d'observer l'atome d'hydrogène sur le site s_0 à l'instant t est égale à $|\langle \phi_0 | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2 \omega t$. De même, la probabilité de présence est la même sur chacun des sites s_i , $i = 1, \dots, 4$, soit $|\langle \phi_i | \psi(t) \rangle|^2 = (1/4) \sin^2 \omega t$.
Au temps $T = \pi/(2\omega)$, $|\langle \phi_0 | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2 \omega T = 0$ et l'atome a quitté le site s_0 .
8. On a $T = \pi\hbar/(4a)$ soit, numériquement avec $4a = 5 \cdot 10^{-5}$ eV, $T = 0,4 \cdot 10^{-10}$ s.
9. Dans un cristal de $0.6 \mu\text{m}$ dont les atomes sont distants de 0.3 nm, il y aura environ $N \sim 1000$ pas élémentaires séparant deux sites tirés au hasard. Dans leur marche aléatoire, il faudra que les atomes d'hydrogène parcourent $N^2 \sim 10^6$ mailles en moyenne pour se rencontrer. Le temps mis par les atomes pour se rencontrer sera donc $\tau \sim N^2 T \sim 10^{-4}$ s. La formation de la molécule H_2 est donc pratiquement instantanée dès lors que les atomes sont adsorbés. Le taux de formation de l'hydrogène moléculaire dépend donc seulement du taux d'adsorption des atomes d'hydrogène interstellaires par les cristaux de glace du milieu interstellaire.

6 Oscillateur dans un champ électrique

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, de pulsation ω , formé d'une particule de masse m élastiquement liée à l'origine et se déplaçant suivant l'axe Ox . Le hamiltonien est $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m + (1/2)m\omega^2 x^2$. On note $\phi_n(x)$, $n = 0, 1, \dots$ ses fonctions propres.

1. Quelles sont les valeurs propres correspondantes E_n ?
2. La particule a une charge électrique q . On applique un champ électrique constant uniforme \mathcal{E} parallèle à Ox . Si la position de la particule est \hat{x} , son moment dipolaire est $\hat{d} = q\hat{x}$. Ecrire l'énergie potentielle \hat{W} de l'oscillateur dans le champ.
3. Ecrire le hamiltonien \hat{H} du système en présence du champ.
4. Quels sont les niveaux d'énergie W_n du système dans le champ \mathcal{E} ? (On rappelle que $x^2 + 2ax = (x+a)^2 - a^2$.)
5. Quelles sont, en fonction des $\{\phi_n(x)\}$, les nouvelles fonctions propres $\{\psi_n(x)\}$ en présence du champ ?
6. Quelle est la valeur moyenne du moment dipolaire $\langle \hat{d} \rangle$ dans l'état $\psi_n(x)$? Interpréter le résultat.
7. On considère maintenant une particule de masse m dans un oscillateur harmonique isotrope à 3 dimensions centré à l'origine. Le hamiltonien est

$$\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + (1/2)m\omega^2 \hat{r}^2 \quad ,$$

où $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ et $\hat{r}^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

(La question ne requiert pas la connaissance de l'oscillateur à 3 dimensions, que l'on trouvera aux pages 101 et 464 du cours. Les niveaux d'énergie sont $E_N = (N + 3/2)\hbar\omega$ $N = 0, 1, \dots$)

La particule a une charge q et on applique un champ $\vec{\mathcal{E}}$ constant uniforme. En opérant comme dans les questions 4 et 6, calculer la valeur moyenne du moment dipolaire $\langle \vec{d} \rangle$ du système dans le champ.

8. On considère un gaz d'atomes d'Argon dans leur état fondamental, dans des conditions normales de température et de pression.

Pour de petites perturbations de l'atome par rapport à son état fondamental, on assimile un électron externe d'un atome d'Argon à une particule liée par un potentiel harmonique à 3 dimensions, de pulsation ω , au reste de l'atome (noyau et cortège électronique). Le potentiel est centré au centre de gravité de l'atome. La particule a une masse $m = m_e$ et une charge $q = -e$, e étant la charge élémentaire.

On rappelle que lorsque un atome d'un milieu acquiert un moment dipolaire électrique \vec{d} sous l'influence d'un champ électrique extérieur $\vec{\mathcal{E}}$, le vecteur *polarisation* $\vec{\mathcal{P}}$ du milieu est $\vec{\mathcal{P}} = N_v \vec{d}$ où N_v est le nombre volumique d'atomes dans le milieu. La susceptibilité électrique χ du milieu est définie par $\vec{\mathcal{P}} = \varepsilon_0 \chi \vec{\mathcal{E}}$ où ε_0 est la permittivité du vide.

Expérimentalement, pour l'Argon, on a $\chi = 5,17 \cdot 10^{-4}$.

- (a) Calculer la pulsation ω définie ci-dessus.

On donne : $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C, volume molaire du gaz parfait dans les conditions normales $V_m = 22,4 \cdot 10^{-3}$ m³ mol⁻¹, nombre d'Avogadro $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ mol⁻¹. Permittivité du vide $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F m⁻¹.

- (b) Calculer l'énergie $\epsilon = \hbar\omega$ et comparer cette énergie avec l'énergie d'excitation de l'argon de son état fondamental vers son premier état excité : $E_{exc} = 8,8$ eV. Que

peut-on en conclure sur le modèle d'oscillateur harmonique pour un électron externe de l'atome d'Argon dans son état fondamental?

English version : Harmonic oscillator in an electric field

Consider a one-dimensional harmonic oscillator, consisting of a particle of mass m elastically bound to the origin, and moving along the x axis. The Hamiltonian is $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m + (1/2)m\omega^2 x^2$. We call $\phi_n(x)$, $n = 0, 1, \dots$ its eigenfunctions.

1. What are the corresponding eigenvalues E_n ?
2. The particle has an electric charge q . We apply a constant uniform electric field \mathcal{E} parallel to the x axis. If the position of the particle is \hat{x} , its electric dipole moment is $\hat{d} = q\hat{x}$. Write the potential energy \hat{W} of the oscillator in the field.
3. Write the Hamiltonian \hat{H} of the system in the presence of the field.
4. What are the energy levels W_n of the system in the field \mathcal{E} ? (We recall that $x^2 + 2ax = (x+a)^2 - a^2$.)
5. What are, in terms of the functions $\{\phi_n(x)\}$, the new eigenfunctions $\{\psi_n(x)\}$ in the presence of the field?
6. What is the expectation value of the dipole moment $\langle \hat{d} \rangle$ in the state $\psi_n(x)$? Interpret the result.
7. We now consider a particle of mass m placed in a 3-dimensional isotropic harmonic oscillator centered at the origin. The hamiltonian is

$$\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + (1/2)m\omega^2 \hat{r}^2 \quad ,$$

where $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ and $\hat{r}^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

(The question does not require the knowledge of the 3-dimensional harmonic oscillator, which can be found on pages 101 and 464 of the book. The energy levels are $E_N = (N + 3/2)\hbar\omega$ $N = 0, 1, \dots$)

The particle has a charge q and we apply a constant uniform field $\vec{\mathcal{E}}$. By operating in the same way as in questions 4 and 6, calculate the expectation value of the dipole moment $\langle \vec{d} \rangle$ of the system in the field.

8. Consider a gas of Argon atoms in their ground state, under normal temperature and pressure conditions.

For small perturbation to the ground state, one can approximate an external electron of an Argon atom by a particle which is bound by a 3-dimensional harmonic potential of angular frequency ω to the center of gravity of the rest of the atom, i.e. the nucleus and the other electrons. The particle has a mass $m = m_e$ and a charge $q = -e$, where e is the unit charge.

We recall that when an atom of a medium acquires an electric dipole moment \vec{d} under the influence of an external electric field $\vec{\mathcal{E}}$, the *polarization* vector $\vec{\mathcal{P}}$ of the medium is $\vec{\mathcal{P}} = N_v \vec{d}$ where N_v is the number density of the medium. The electric susceptibility χ of the medium is defined by $\vec{\mathcal{P}} = \epsilon_0 \chi \vec{\mathcal{E}}$ where ϵ_0 is the permittivity of free space.

Experimentally, for Argon, one has $\chi = 5,17 \cdot 10^{-4}$.

- (a) Calculate the frequency ω defined above.
 The physical constants are : $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C, molar volume of the perfect gas under standard conditions $V_m = 22,4 \cdot 10^{-3}$ m³ mol⁻¹, Avogadro's number $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ mol⁻¹. Permittivity of free space $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F m⁻¹.
- (b) Calculate the energy $\epsilon = \hbar\omega$ and compare it with the excitation energy of Argon from its ground state to its first excited state : $E_{exc} = 8,8$ eV. What can one conclude as to the harmonic oscillator model for an external electron in Argon in its ground state ?

Solution

1. $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.
2. $\hat{W} = -\hat{d}\mathcal{E} = -q\hat{x}\mathcal{E}$.
3. $H = \hat{p}^2/2m + (1/2)m\omega^2x^2 - qx\mathcal{E} = \hat{p}^2/2m + (1/2)m\omega^2(x - q\mathcal{E}/m\omega^2)^2 - (1/2)q^2\mathcal{E}^2/m\omega^2$.
4. En posant $\hat{X} = x - q\mathcal{E}/m\omega^2$, on a $\partial/\partial X = \partial/\partial x$, et $H = \hat{P}^2/2m + (1/2)m\omega^2X^2 - (1/2)q^2\mathcal{E}^2/m\omega^2$. Par conséquent $W_n = (n + 1/2)\hbar\omega - (1/2)q^2\mathcal{E}^2/m\omega^2$.
5. $\psi_n(x) = \phi_n(X) = \phi_n(x - q\mathcal{E}/m\omega^2)$
6. $\langle \hat{d} \rangle = q^2\mathcal{E}/m\omega^2$. Le champ polarise l'oscillateur, qui oscille maintenant autour du point $x = q\mathcal{E}/m\omega^2$. Les niveaux d'énergie sont tous déplacés de la même quantité $-(1/2)q^2\mathcal{E}^2/m\omega^2$ en raison de cette polarisation.
7. En présence du champ, le hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - q\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + (1/2)m\omega^2\vec{r}^2 - q\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

que l'on peut, comme précédemment, récrire sous la forme

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + (1/2)m\omega^2(\vec{r} - q\vec{\mathcal{E}}/(m\omega^2))^2 - (1/2)q^2\mathcal{E}^2/m\omega^2 \quad . \quad (10)$$

- La valeur moyenne du moment dipolaire induit du système dans le champ est donc $\langle \vec{d} \rangle = q^2\vec{\mathcal{E}}/(m\omega^2)$.

8. La polarisation du gaz est donc

$$\vec{\mathcal{P}} = \frac{N_v q^2}{m\omega^2} \vec{\mathcal{E}}$$

soit

$$\chi = \frac{N_v q^2}{\epsilon_0 m \omega^2} \quad .$$

- (a) On obtient donc

$$\omega^2 = \frac{N_v q^2}{\chi \epsilon_0 m} \quad .$$

L'application numérique donne $\omega = 1,28 \cdot 10^{16}$ s⁻¹.

- (b) Cette valeur correspond à $\hbar\omega = 8,42$ eV, clivage entre le niveau fondamental et le premier niveau excité de l'oscillateur hamonique. Elle se compare en bonne approximation avec le clivage atomique $E_{exc} = 8,8$ eV. Le modèle de l'électron élastiquement lié est une bonne approximation à faible différence d'énergie par rapport à l'état fondamental. Il reproduit en bonne approximation le premier état excité.

7 Mesures successives sur la molécule NH3

On considère une molécule d'ammoniac, et on s'intéresse aux combinaisons linéaires de ses deux états de plus basse énergie, $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$. Dans la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$ on choisit l'origine des énergies de façon que le hamiltonien s'écrive sous la forme

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\hbar\omega/2 & 0 \\ 0 & +\hbar\omega/2 \end{pmatrix} ,$$

où $\hbar\omega = E_A - E_S$. Dans cette base, l'opérateur position \hat{X} est défini par

$$\hat{X} = x_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

1. Soit un état de la forme $|\psi_\theta\rangle = \cos\theta|\psi_S\rangle + \sin\theta|\psi_A\rangle$ où θ est un angle quelconque. Calculer $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$ et ΔX dans cet état.
2. Soit un état $|\psi(t)\rangle$ tel que $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_\theta\rangle$. Ecrire l'expression de $|\psi(t)\rangle$ à un instant ultérieur $t > 0$.
3. Dans toute la suite du problème, on considère le cas $\theta = \pi/4$. On désigne par $|\psi(t)\rangle$ l'état tel que $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_{\theta=\pi/4}\rangle$.
Quelles sont les valeurs de $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$ et ΔX dans l'état $|\psi(t=0)\rangle$?
4. On laisse évoluer le système pendant un temps T . Quelle est la probabilité de trouver le résultat $+x_0$ dans la mesure de X à l'instant T ?
5. En supposant qu'on a trouvé le résultat $+x_0$, quel est l'état $|\psi(t=T(1+\varepsilon))\rangle$ immédiatement après la mesure ($0 < \varepsilon \ll 1$) ?
6. On effectue sur le *même système* une série de N mesures successives de X aux instants $t = T/N, 2T/N, \dots, (N-1)T/N, T$. Quelle est la probabilité $P_N(T)$ de trouver que *toutes* ces mesures donnent le même résultat $+x_0$?
7. Que vaut $P_N(T)$ dans la limite d'un très grand nombre de mesures, $N \rightarrow \infty$? (On rappelle que, pour $|\epsilon| \ll 1$, $\cos \epsilon \simeq 1 - \epsilon^2/2$ et que $(1 + \epsilon)^N = \exp(N \ln(1 + \epsilon)) \simeq \exp(N\epsilon)$.)
8. Commenter le résultat ; vous paraît-il vraisemblable ?

English version : Successive measurements on the NH3 molecule.

We consider an ammonia molecule, and we are interested in linear combinations of its two lowest lying energy levels, $|\psi_S\rangle$ and $|\psi_A\rangle$. In the basis $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$ we choose the origin of energies such that the Hamiltonian is written as

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\hbar\omega/2 & 0 \\ 0 & +\hbar\omega/2 \end{pmatrix} ,$$

where $\hbar\omega = E_A - E_S$. In this basis the position operator \hat{X} is defined as

$$\hat{X} = x_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

1. Consider a state of the form $|\psi_\theta\rangle = \cos\theta|\psi_S\rangle + \sin\theta|\psi_A\rangle$ where θ is an arbitrary angle. Calculate $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$ and ΔX in this state.
2. Consider a state $|\psi(t)\rangle$ such that $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_\theta\rangle$. Write the expression of $|\psi(t)\rangle$ at a later time $t > 0$.
3. In all the rest of the problem, we consider the case $\theta = \pi/4$. We call $|\psi(t)\rangle$ the state which at time $t = 0$ is $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_{\theta=\pi/4}\rangle$.
What are the values of $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$ and ΔX in the state $|\psi(t=0)\rangle$?
4. We let the system evolve for a time T . What is the probability to find the result $+x_0$ in a measurement of X at time T ?
5. Assuming we have obtained the result $+x_0$, what is the state $|\psi(t=T(1+\varepsilon))\rangle$ immediately after the measurement ($0 < \varepsilon \ll 1$)?
6. We perform on the *same system* a sequence of N successive measurements of X at times $t = T/N, 2T/N, \dots, (N-1)T/N, T$. What is the probability $P_N(T)$ to find that *all* these measurements give the same result $+x_0$?
7. What is the value of $P_N(T)$ in the limit of a very large number of measurements, $N \rightarrow \infty$? We recall that, for $|\epsilon| \ll 1$, $\cos \epsilon \simeq 1 - \epsilon^2/2$ and that $(1+\epsilon)^N = \exp(N \ln(1+\epsilon)) \simeq \exp(N\epsilon)$.
8. Comment on the result. Do you think it's plausible?

Solution

1. On obtient $\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = (-\hbar\omega/2)(\cos^2\theta - \sin^2\theta) = (-\hbar\omega/2) \cos 2\theta$.
Puisque $\hat{H}^2 = (\hbar\omega/2)^2 \hat{I}$ on obtient $\Delta E = (\hbar\omega/2) |\sin 2\theta|$.
De même $\langle X \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = x_0 \sin 2\theta$, et, puisque $\hat{X}^2 = x_0^2 \hat{I}$, $\Delta X = x_0 |\cos 2\theta|$.
2. Puisque $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ sont états propres de l'énergie, on a pour $\theta = \pi/4$ $|\psi(t)\rangle = \cos\theta e^{i\omega t/2} |\psi_S\rangle + \sin\theta e^{-i\omega t/2} |\psi_A\rangle$
3. Pour $\theta = \pi/4$ on a $|\psi(t)\rangle = (e^{i\omega t/2} |\psi_S\rangle + e^{-i\omega t/2} |\psi_A\rangle) / \sqrt{2}$.
Les valeurs moyennes demandées sont, à $t = 0$, $\langle E \rangle = 0$, $\Delta E = (\hbar\omega/2)$, $\langle X \rangle = +x_0$ et $\Delta X = 0$ (l'état $|\psi(0)\rangle$ est état propre de \hat{X}).
4. Les états propres de \hat{X} sont $|\psi_\pm\rangle = (|\psi_S\rangle \pm |\psi_A\rangle) / \sqrt{2}$. La probabilité demandée est donc

$$P_+(T) = |\langle \psi_+ | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2(\omega T/2) \quad .$$
5. Si le résultat trouvé est $+x_0$, l'état après immédiatement après mesure est $|\psi(T+\varepsilon)\rangle = |\psi_+\rangle = (|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) / \sqrt{2} \equiv |\psi(0)\rangle$.
6. Puisque après chaque mesure, le système se retrouve dans l'état initial $|\psi_+\rangle$ et que les intervalles de temps sont les mêmes entre deux mesures, la probabilité est $P_N(T) = (\cos^2 \omega T/2N)^N$.
7. Dans la limite (mathématique) $N \rightarrow \infty$, on obtient

$$P_N \sim (1 - \omega^2 T^2 / 8N^2)^{2N} \sim 1 - \omega^2 T^2 / 4N \rightarrow 1 \quad .$$

8. Si l'on croit le résultat précédent, le fait de mesurer, c'est à dire d'observer le système, l'empêche d'évoluer ! La solution de ce "paradoxe" réside dans le fait que toute mesure est d'extension spatiale et temporelle finie. On ne peut pas, en pratique, subdiviser le temps T à l'infini sauf à interagir en permanence avec le système – ce qui est un autre problème. On peut également remarquer qu'une mesure durant un temps petit τ nécessite un échange d'énergie $\delta E \geq \hbar/\tau$, ce qui perturbe trop l'état mesuré lorsque $\tau \rightarrow 0$.

8 Pigments organiques

Certains pigments organiques sont constitués d'ions linéaires le long desquels les électrons se déplacent librement. Ces ions, de formule $(C_n H_{n+2})^-$ dérivent, par enlèvement d'un groupement $(CH)^+$, de molécules de polyéthylène à nombre pair d'atomes de carbone. Dans un ion de ce genre, les liaisons se réarrangent pour former une structure *linéaire* du type suivant



qui contient un nombre *impair* n d'atomes de carbone équidistants séparés de $d = 1,40 \text{ \AA}$. Dans cette structure, on peut considérer que les $n + 1$ électrons des doubles liaisons initiales du polyéthylène correspondant se déplacent *indépendamment* les uns des autres dans un puits de potentiel infini à une dimension de longueur $L_n = nd$

$$V(x) = +\infty \text{ si } x < 0 \text{ ou } x > L_n \quad ; \quad V(x) = 0 \text{ si } 0 \leq x \leq L_n \quad .$$

(En toute rigueur $L_n = (n - 1)d + 2b$, b représentant les effets de bord ; l'expérience montre que le choix $b = d/2$ est acceptable).

1. Quels sont les niveaux d'énergie ε_k d'un électron dans ce potentiel ?
2. A cause du principe de Pauli, il ne peut pas y avoir plus de deux électrons par niveau d'énergie. Quelles sont, alors, l'énergie E_0 de l'état fondamental et l'énergie E_1 du premier état excité de l'ensemble des $n + 1$ électrons ?
(On donne $\sum_{k=1}^N k^2 = N(N + 1)(2N + 1)/6$.)
3. Quelle est la longueur d'onde λ_n de la lumière absorbée lors d'une transition de l'état fondamental au premier état excité du système ? (On pourra faire usage de la longueur d'onde de Compton de l'électron, $\lambda_c = h/(m_e c) = 2,426 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$.)
4. On observe expérimentalement que les ions $n = 9$, $n = 11$ et $n = 13$ absorbent respectivement dans le bleu ($\lambda_9 \simeq 4700 \text{ \AA}$), le jaune orangé ($\lambda_{11} \simeq 6000 \text{ \AA}$) et le rouge ($\lambda_{13} \simeq 7300 \text{ \AA}$). Ce modèle en rend-il compte ?
5. Les ions $n \leq 7$ sont-ils colorés ? Que pensez-vous des ions $n \geq 17$ et de l'ion $n = 15$?

English Version : Organic pigments

Some pigments are made of linear molecular ions, along which electrons move freely.

Consider molecular ions of the chemical formula $(C_n H_{n+2})^-$, which can be considered as deriving from polyethylene molecules with an even number of carbon atoms, by removing a $(CH)^+$ group. In an ion of this type, the bonds rearrange themselves and lead to a *linear* structure of the following type :



with an odd number n of equally spaced carbon atoms separated by $d = 1,40 \text{ \AA}$. In this structure, one can consider that the $n + 1$ electrons of the double bonds of the original polyethylene molecule move *independently* of one another in a one-dimensional infinite potential well of length $L_n = nd$

$$V(x) = +\infty \text{ if } x < 0 \text{ or } x > L_n \quad ; \quad V(x) = 0 \text{ if } 0 \leq x \leq L_n \quad .$$

(Actually, one should have $L_n = (n - 1)d + 2b$, where b represents the edge effects. Experimentally, the choice $b = d/2$ is appropriate).

1. What are the energy levels ε_k of an electron in this potential?
2. Owing to the Pauli principle, at most two electrons can occupy the same energy level. What are energies of the ground state E_0 and of the first excited state E_1 of the set of $n + 1$ electrons? (We recall that $\sum_{k=1}^N k^2 = N(N + 1)(2N + 1)/6$.)
3. What is the wavelength λ_n of the light absorbed in a transition between the ground state and the first excited state? (One can introduce the Compton wavelength of the electron, $\lambda_c = h/(m_e c) = 2,426 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$.)
4. Experimentally, ones observes that the ions $n = 9$, $n = 11$ and $n = 13$ absorb respectively blue light ($\lambda_9 \simeq 4700 \text{ \AA}$), yellow light ($\lambda_{11} \simeq 6000 \text{ \AA}$) and red light ($\lambda_{13} \simeq 7300 \text{ \AA}$). Does this model account for the experimental observation?
5. Are the ions $N \leq 7$ colored? What do you think of the ions $n \geq 17$ and of the ion $n = 15$?

Solution

1. Les niveaux d'énergie sont

$$\varepsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2 k^2}{2mL_n^2} \quad k = 1, 2, \dots$$

2. L'énergie de l'état fondamental des n électrons est

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL_n^2} 2 \sum_{k=1}^{(n+1)/2} k^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_n^2} \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{12} .$$

L'énergie du premier état excité est

$$E_1 = E_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_n^2} \left[\left(\frac{n+3}{2} \right)^2 - \left(\frac{n+1}{2} \right)^2 \right] = E_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+2)}{2mL_n^2} .$$

3. On a $h\nu = E_1 - E_0 = \pi^2 \hbar^2 (n+2)/(2mL_n^2)$. Puisque $\lambda = c/\nu$, on obtient

$$\lambda_n = \frac{8mc}{h} \frac{n^2 d^2}{n+2} = \frac{8d^2}{\lambda_c} \frac{n^2}{n+2}$$

4. A partir de la forme générale $\lambda_n() = 646,33 \frac{n^2}{n+2}$, on obtient $\lambda_9 = 4760 \text{ \AA}$, $\lambda_{11} = 6020 \text{ \AA}$, $\lambda_{13} = 7280 \text{ \AA}$, en bon accord avec l'expérience.
5. Pour $n \leq 7$, on a $\lambda_7 = 3520 \text{ \AA}$, $\lambda_5 = 2310 \text{ \AA}$ qui se situent dans l'ultraviolet, les ions $n \leq 7$ n'absorbent pas dans le visible et ne sont pas colorés.

Pour $n \geq 17$, la longueur d'onde $\lambda_{n=17} = 9830 \text{ \AA}$ se situe dans l'infrarouge, de même que celles de $n \geq 17$). Ces ions n'absorbent pas dans le visible lors de transitions de l'état fondamental vers le *premier* état excité. Ils sont néanmoins colorés par absorption dans des transitions vers des états plus excités. Pour $n = 15$ la transition vers le premier état excité est dans l'infra-rouge $\lambda = 855 \text{ nm}$ et celle vers le deuxième état excité dans le très proche ultraviolet $\lambda = 404 \text{ nm}$. Cet ion n'est pas coloré (de peu!).

9 Oscillations des Neutrinos

En radioactivité bêta, ou plus généralement en physique des interactions faibles, l'électron est toujours associé à une particule neutre : le neutrino ν_e . Or, il existe dans la nature une particule, le lepton μ ou *muon*, dont les propriétés physiques paraissent analogues à celles de l'électron, mis à part sa masse $m_\mu \simeq 200 m_e$. Le muon a des interactions faibles identiques à celles de l'électron, à cela près qu'il apparaît en association avec un neutrino *différent*, le ν_μ .

Par exemple, un faisceau de neutrinos produit dans un accélérateur peut interagir avec un neutron (n) d'un noyau pour donner un proton (p) suivant les réactions

$$\nu_e + n \rightarrow p + e \quad \text{et} \quad \nu_\mu + n \rightarrow p + \mu , \quad (1)$$

alors que les réactions $\nu_e + n \rightarrow p + \mu$ ou $\nu_\mu + n \rightarrow p + e$ ne s'observent jamais. Les réactions (1) sont utilisées en pratique pour détecter les neutrinos.

De même, un méson π^- peut se désintégrer suivant les modes

$$\pi^- \rightarrow \mu + \bar{\nu}_\mu \quad (\text{mode dominant}) \quad \text{et} \quad \pi^- \rightarrow e + \bar{\nu}_e , \quad (2)$$

alors que $\pi^- \rightarrow \mu + \bar{\nu}_e$ ou $\pi^- \rightarrow e + \bar{\nu}_\mu$ ne s'observent jamais. C'est ainsi que l'on produit abondamment des neutrinos (il est facile de produire des mésons π). Dans (2) nous avons fait apparaître les *antiparticules* $\bar{\nu}_\mu$ et $\bar{\nu}_e$. Il y a une symétrie (presque) parfaite entre particules et antiparticules, si bien que, de même que l'électron est associé au neutrino ν_e , de même l'antiélectron e^+ est associé à l'antineutrino $\bar{\nu}_e$. On observe les réactions dites conjuguées de charge de (1) et (2)

$$\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+ , \quad \bar{\nu}_\mu + p \rightarrow n + \mu^+ \quad \text{et} \quad \pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu . \quad (3)$$

Dans tout ce qui suit, ce que nous faisons pour les neutrinos vaut, de façon symétrique, pour les antineutrinos.

En 1975, on a découvert un troisième lepton, le τ , beaucoup plus lourd, $m_\tau \simeq 3500 m_e$, lui aussi pourvu d'un neutrino ν_τ , et obéissant aux mêmes lois physiques que ses deux congénères plus légers aux effets de masse près. On sait depuis les années 1990 et les mesures faites au grand accélérateur du CERN, le LEP, que ces trois neutrinos ν_e, ν_μ, ν_τ (et leurs antiparticules) sont *les seuls* de leur espèce (du moins pour des masses inférieures à 100 GeV/ c^2).

Pendant longtemps, on a pensé que les neutrinos étaient des particules de masse nulle. Les masses de ces particules (multipliées par c^2) sont, en tout état de cause, beaucoup plus faibles que les énergies mises en jeu dans les expériences où elle apparaissent. Par conséquent, beaucoup de limites expérimentales directes sur ces masses sont compatibles avec des valeurs nulles. Cependant, plusieurs arguments théoriques et cosmologiques suggéraient qu'il pouvait en être autrement. Une grande découverte des dix années est d'avoir prouvé sans conteste que les masses des neutrinos ne sont pas toutes nulles.

Le thème de ce problème est de montrer comment on peut mesurer la différence de masse des neutrinos par un effet d'oscillation quantique. Cette théorie repose sur l'idée que les neutrinos « de saveur » ν_e, ν_μ et ν_τ , qui sont produits ou détectés expérimentalement, ne sont pas des états propres de la *masse*, mais sont des *combinaisons linéaires* d'états ν_1, ν_2, ν_3 qui, eux, sont états propres de la masse avec des masses m_1, m_2, m_3 .

Les neutrinos que l'on observe sur Terre ont des origines diverses. Ils peuvent être produits dans un accélérateur, dans un réacteur nucléaire, mais aussi dans l'atmosphère par les rayons cosmiques, dans les réactions thermo-nucléaires au cœur du soleil, ou encore dans des phénomènes astrophysiques comme les explosions de supernovae.

Mécanisme des oscillations : neutrinos des réacteurs

Dans cette première partie, nous considérons les oscillations de deux types de neutrinos, en l'occurrence le ν_e et le ν_μ . Ce cas simple nous permettra de comprendre la physique sous-jacente au cas général. Nous analyserons ici les données obtenues auprès de réacteurs nucléaires. L'énergie moyenne des (anti-)neutrinos produits dans ces réacteurs est $E = 4$ MeV, avec une dispersion du même ordre.

Dans tout ce qui suit, nous supposons que si m est la masse au repos du neutrino considéré et p et E son impulsion et son énergie, cette masse est si faible que l'énergie d'un neutrino de masse m est

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \simeq pc + \frac{m^2 c^4}{2pc} \quad , \quad (4)$$

et que le neutrino se propage en très bonne approximation à la vitesse de la lumière c .

Soit \hat{H} l'hamiltonien d'un neutrino libre d'impulsion p , que l'on suppose bien définie. On désigne par $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$ les deux états propres de \hat{H} :

$$\hat{H}|\nu_j\rangle = E_j|\nu_j\rangle \quad , \quad E_j = pc + \frac{m_j^2 c^4}{2pc} \quad , \quad j = 1, 2 \quad .$$

m_1 et m_2 sont les masses des deux états $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$, et on suppose $m_1 \neq m_2$.

Les oscillations de neutrinos se propageant librement proviennent de l'effet quantique suivant. Supposons que les états physiques de neutrinos produits (réactions (2)) ou détectés (réactions (1)) ne sont pas $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$, mais des combinaisons linéaires :

$$|\nu_e\rangle = |\nu_1\rangle \cos \theta + |\nu_2\rangle \sin \theta \quad , \quad |\nu_\mu\rangle = -|\nu_1\rangle \sin \theta + |\nu_2\rangle \cos \theta \quad (5)$$

où θ est un angle de mélange à déterminer. Ces combinaisons linéaires d'états propres de l'énergie vont osciller en fonction du temps et mener à des phénomènes mesurables.

1. A l'instant $t = 0$, on produit un neutrino d'impulsion p dans l'état $|\nu_e\rangle$. Calculer l'état $|\nu(t)\rangle$ à l'instant t en fonction de $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$.
2. Quelle est la probabilité P_e que ce neutrino soit détecté dans l'état $|\nu_e\rangle$ à l'instant t ? On exprimera le résultat en fonction de l'angle de mélange θ et de la *longueur d'oscillation* L

$$L = \frac{4\pi\hbar p}{|\Delta m^2| c^2} \quad , \quad \Delta m^2 = m_1^2 - m_2^2. \quad (6)$$

3. Calculer la longueur d'oscillation L pour l'énergie $E \simeq pc = 4$ MeV et une différence d'énergie de masse $\Delta m^2 c^4 = 10^{-4}$ eV².
4. On mesure les flux de neutrinos avec un détecteur situé à une distance ℓ du point de production. Exprimer la probabilité P_e en fonction de la distance parcourue $\ell = ct$.
5. L'énergie de masse du muon est $m_\mu c^2 = 106$ MeV. En déduire que dans ce type d'expérience, on ne peut pas détecter les ν_μ par la réaction (1). On rappelle que $m_p c^2 = 938,27$ MeV et $m_n c^2 = 939,57$ MeV.
6. Les détecteurs mesurent les flux de neutrinos avec une précision de $\sim 10\%$.
 - (a) En prenant $\Delta m^2 c^4 = 10^{-4}$ eV², déterminer la distance minimale ℓ_{\min} à laquelle il faut se placer pour détecter un effet d'oscillation. On supposera que le mélange dans (5) est maximal, c'est-à-dire $\theta = \pi/4$.

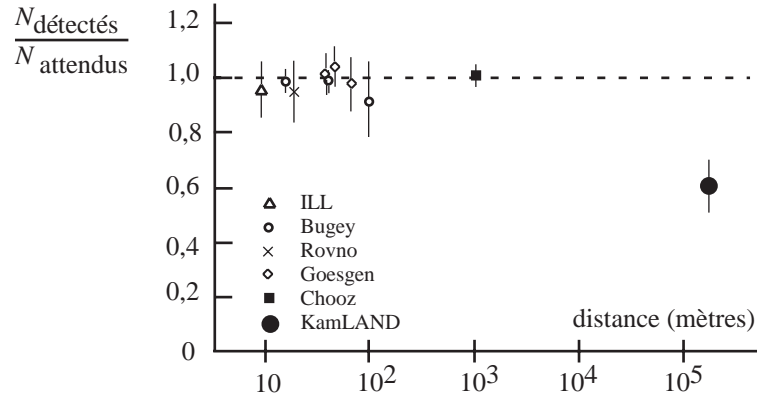


FIG. 1: Rapport entre les nombres de neutrinos électroniques détectés et attendus en l'absence d'oscillations, en fonction de la distance ℓ au réacteur.

- (b) Comment est changée ℓ_{\min} si le mélange n'est pas maximal?
7. Beaucoup d'expériences de détection de neutrinos issus de centrales nucléaires ont été réalisées, notamment auprès du réacteur franco-belge de Chooz dans les Ardennes et du réacteur du Bugey dans l'Ain. La plus récente provient de la collaboration KamLAND, au Japon. Les résultats sont donnés sur la figure 1.

- (a) Expliquer les résultats de la figure 1, hormis celui de KamLAND.
- (b) L'expérience KamLAND, réalisée en 2002, a consisté à recueillir les neutrinos issus de tous les (nombreux) réacteurs du Japon (et des pays voisins), ce qui revient à prendre une distance moyenne $\ell = 180$ km. En rassemblant leurs résultats et les nombreuses données obtenues sur les neutrinos solaires, les physiciens de Kamland arrivent aux valeurs suivantes :

$$|\Delta m^2| c^4 = 7,1 (\pm 0,4) \times 10^{-5} \text{ eV}^2, \quad \tan^2 \theta = 0,45 (\pm 0,02). \quad (7)$$

Montrer que ces valeurs sont compatibles avec le résultat $P_e = 0,61 (\pm 0,10)$ de la figure 1.

Oscillations des trois espèces : neutrinos atmosphériques

Nous nous penchons maintenant sur la formalisation du problème général des trois espèces de neutrinos. Nous nommons $|\nu_\alpha\rangle$, $\alpha = e, \mu, \tau$ les neutrinos de « saveur » et $|\nu_i\rangle$, $i = 1, 2, 3$ les états propres de la masse. Ces deux bases sont reliées entre elles par la matrice \hat{U} de Maki-Nagawaka-Sakata (MNS),

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_{i=1}^3 U_{\alpha i} |\nu_i\rangle, \quad \hat{U} = \begin{pmatrix} U_{e1} & U_{e2} & U_{e3} \\ U_{\mu1} & U_{\mu2} & U_{\mu3} \\ U_{\tau1} & U_{\tau2} & U_{\tau3} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Cette matrice est unitaire ($\sum_i U_{\beta i}^* U_{\alpha i} = \delta_{\alpha\beta}$) et peut s'écrire de la façon suivante :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{23} & s_{23} \\ 0 & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13}e^{-i\delta} \\ 0 & 1 & 0 \\ -s_{13}e^{i\delta} & 0 & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où $c_{ij} = \cos \theta_{ij}$ et $s_{ij} = \sin \theta_{ij}$. La résolution expérimentale complète du problème des oscillations de neutrinos consiste à mesurer les trois angles « de mélange » $\theta_{12}, \theta_{23}, \theta_{13}$, la phase δ , et les trois masses m_1, m_2, m_3 . On opère dans des conditions où la relation (4) est toujours valable.

1. À l'instant $t = 0$ on produit un neutrino d'impulsion p dans l'état $|\nu(0)\rangle = |\nu_\alpha\rangle$. Exprimer, en fonction des éléments de matrice $U_{\alpha i}$, son état à un instant t ultérieur. Écrire la probabilité $P_{\alpha \rightarrow \beta}(t)$ d'observer un neutrino de saveur β à l'instant t .
2. On définit les longueurs d'oscillations à l'énergie $E \simeq pc$ par :

$$L_{ij} = \frac{4\pi\hbar p}{|\Delta m_{ij}^2|c^2}, \quad \Delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2. \quad (9)$$

On note qu'il n'y a que deux longueurs d'oscillation indépendantes puisque $\Delta m_{12}^2 + \Delta m_{23}^2 + \Delta m_{31}^2 = 0$. Pour des neutrinos d'énergie $E = 4$ GeV, calculer les longueurs d'oscillation L_{12} et L_{23} . On prendra pour $|\Delta m_{12}^2|$ le résultat donné en (7), et on choisira $|\Delta m_{23}^2|c^4 = 2,5 \times 10^{-3} \text{ eV}^2$, résultat qui sera justifié dans la suite.

3. On dispose de compteurs de neutrinos ayant une précision de l'ordre de 10% et on travaille à l'énergie $E = 4$ GeV. À partir de quelles distances ℓ_{12} et ℓ_{23} du point de production de neutrinos peut-on espérer détecter une oscillation résultant d'une superposition $1 \leftrightarrow 2$ ou $2 \leftrightarrow 3$?
4. L'expérience Super-Kamiokande, réalisée en 1998, consiste à détecter les neutrinos « atmosphériques ». Ces neutrinos sont produits par collision de rayons cosmiques de grande énergie avec les noyaux de la haute atmosphère. Dans une série de réactions, des mésons π^\pm sont produits abondamment, et se désintègrent suivant la chaîne :

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu \quad \text{suivi de} \quad \mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu, \quad (10)$$

et une chaîne analogue pour les π^+ . Les flux de ces neutrinos sont mesurés par un détecteur souterrain grâce aux réactions (1) et (3).

On suppose pour simplifier que tous les muons se désintègrent avant d'atteindre la terre. En déduire qu'en l'absence d'oscillation de neutrinos, le rapport entre le nombre de neutrinos électroniques et muoniques

$$R_{\mu/e} = \frac{N(\nu_\mu) + N(\bar{\nu}_\mu)}{N(\nu_e) + N(\bar{\nu}_e)}$$

devrait être égal à 2.

5. Les corrections au rapport $R_{\mu/e}$ dues au fait qu'une partie des μ atteint le sol sont calculées très précisément. Une fois cette correction faite, on trouve en comparant les valeurs mesurées et calculées pour $R_{\mu/e}$

$$\frac{(R_{\mu/e})_{\text{mesuré}}}{(R_{\mu/e})_{\text{calculé}}} = 0,64 (\pm 0,05).$$

Pour expliquer cette baisse relative du nombre de ν_μ , on songe évidemment à un effet d'oscillation $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_e$ ou $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$. L'expérience de Super-Kamiokande consiste à faire varier la distance de vol des neutrinos en mesurant sélectivement la direction de leur provenance, comme indiqué sur la figure 2. Les neutrinos venant du haut ($\cos \alpha \sim 1$) ont parcouru une distance égale à l'épaisseur de l'atmosphère + la profondeur du détecteur, alors que ceux provenant du bas ($\cos \alpha \sim -1$) ont traversé le diamètre de la Terre (13 400 km). Étant donné la faiblesse des interactions de neutrinos avec la matière, tout se passe comme si les

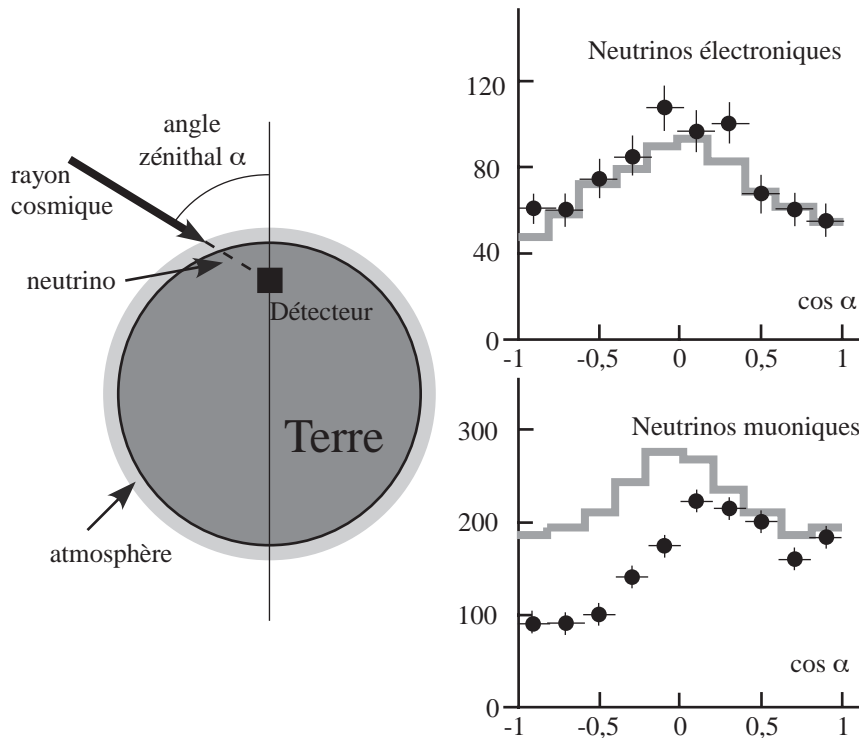


FIG. 2: À gauche : création des neutrinos atmosphériques par collision d'un rayon cosmique sur un noyau de l'atmosphère terrestre. Le détecteur souterrain mesure le flux de neutrinos électroniques et muoniques en fonction de l'angle zénithal α . À droite : nombre de neutrinos atmosphériques détectés dans l'expérience Super-Kamiokande en fonction de l'angle zénithal. La ligne grise représente les nombres attendus en l'absence d'oscillations (figure réalisée d'après K. Tanyaka, XXII Physics in Collisions Conference, Stanford 2002).

neutrinos voyagent librement sur une distance contrôlable comprise entre quelques dizaines de km et 13 400 km.

L'énergie des neutrinos étant typiquement de 4 GeV dans cette expérience, peut-on observer l'effet d'une oscillation $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$ du type étudié dans la première partie ?

6. Les distributions angulaires des ν_e et des ν_μ sont représentées sur la figure 2, ainsi que les distributions que l'on attendrait en l'absence d'oscillations. Expliquer pourquoi ces données sont compatibles avec le fait que l'on observe une oscillation $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$, pas d'oscillation $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\tau$, et pas d'oscillation $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$.
7. En vertu des résultats précédents, on suppose que l'on a affaire à une oscillation à deux neutrinos : $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$. On reprend donc le même formalisme que dans la première partie, mais en changeant l'identité des partenaires.

En comparant les flux de neutrinos muoniques arrivant du haut et du bas, estimer l'angle de mélange θ_{23} . Pour prendre en compte la grande dispersion en énergie des rayons cosmiques, donc des neutrinos atmosphériques, on remplacera le facteur oscillant $\sin^2(\pi\ell/L_{23})$ par sa moyenne $1/2$ si $\ell \gg L_{23}$.

Les résultats complets publiés par l'expérience Super-Kamiokande sont

$$|\Delta m_{23}^2| c^4 = 2,5 \times 10^{-3} \text{ eV}^2, \quad \theta_{23} = \pi/4, \quad \theta_{13} = 0.$$

Sont-ils en accord avec les considérations ci-dessus ?

Solution

Mécanisme des oscillations : neutrinos des réacteurs

1. Initialement, l'état du neutrino est $|\nu(0)\rangle = |\nu_e\rangle = |\nu_1\rangle \cos \theta + |\nu_2\rangle \sin \theta$. On a donc à l'instant t

$$|\nu(t)\rangle = |\nu_1\rangle \cos \theta e^{-iE_1 t/\hbar} + |\nu_2\rangle \sin \theta e^{-iE_2 t/\hbar} .$$

2. La probabilité de trouver ce neutrino dans l'état $|\nu_e\rangle$ à l'instant t est

$$P_e(t) = |\langle \nu_e | \nu(t) \rangle|^2 = \left| \cos^2 \theta e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin^2 \theta e^{-iE_2 t/\hbar} \right|^2 ,$$

ce qui donne après un calcul simple :

$$P_e(t) = 1 - \sin^2(2\theta) \sin^2 \left(\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} \right) .$$

On a $E_1 - E_2 = (m_1^2 - m_2^2)c^4/(2pc)$. En définissant la longueur d'oscillation par $L = 4\pi\hbar p/(|\Delta m^2|c^2)$, on obtient

$$P_e(t) = 1 - \sin^2(2\theta) \sin^2 \left(\frac{\pi ct}{L} \right) .$$

3. Pour une énergie $E = pc = 4 \text{ MeV}$ et une différence de masse telle que $\Delta m^2 c^4 = 10^{-4} \text{ eV}^2$, on obtient une longueur d'oscillation $L = 100 \text{ km}$.
4. Le temps de vol est $t = \ell/c$. La probabilité $P_e(\ell)$ est donc

$$P_e(\ell) = 1 - \sin^2(2\theta) \sin^2 \left(\frac{\pi \ell}{L} \right) . \quad (11)$$

5. Une énergie du ν_μ de seulement 4 MeV est au dessous du seuil de la réaction $\nu_\mu + n \rightarrow p + \mu$. On ne peut donc pas mesurer le flux de ν_μ avec cette réaction dans les expériences faites auprès de réacteurs.
6. Pour détecter un déficit significatif dans le flux de neutrinos ν_e , il faut

$$\sin^2(2\theta) \sin^2 \left(\frac{\pi \ell}{L} \right) > 0,1 .$$

- (a) Pour le mélange maximal $\theta = \pi/4$, c'est-à-dire $\sin^2(2\theta) = 1$, cela impose $\pi\ell/L > 0,32$ ou encore $\ell > L/10$. Pour $E = 4 \text{ MeV}$ et $\Delta m^2 c^4 = 10^{-4} \text{ eV}^2$, on trouve $\ell > 10 \text{ km}$. Les distances typiques pour observer ce phénomène convenablement sont de l'ordre d'une fraction de la longueur d'oscillation.
- (b) Si le mélange n'est pas maximal, il faudra prendre des distances ℓ plus grandes que $L/10$. Notons que si l'angle de mélange est trop petit ($\sin^2(2\theta) < 0,1$ soit $\theta < \pi/10$), l'amplitude de l'oscillation est trop faible pour être détectée, quelle que soit la distance ℓ choisie. Il faut dans ce cas améliorer la précision de la détection pour pouvoir conclure.
7. (a) Dans toutes les expériences sauf KamLAND, la distance est inférieure à 1 km. Par conséquent, dans toutes ces expériences, on a $|1 - P_e| \leq 10^{-3}$. L'effet d'oscillation est alors indétectable, si l'estimation $|\Delta m^2|c^4 \sim 10^{-4} \text{ eV}^2$ est valable.
- (b) Pour $|\Delta m^2|c^4 = 7,1 \times 10^{-5} \text{ eV}^2$, $\tan^2 \theta = 0,45$ et $\ell = 180 \text{ km}$, on obtient $P_e = 0,50$ ce qui est en accord avec la mesure. La prédiction théorique prenant en compte les effets de dispersion énergétique est tracée sur la figure 3. On voit, en passant, combien il est important de bien contrôler les barres d'erreur dans ce type d'expérience.

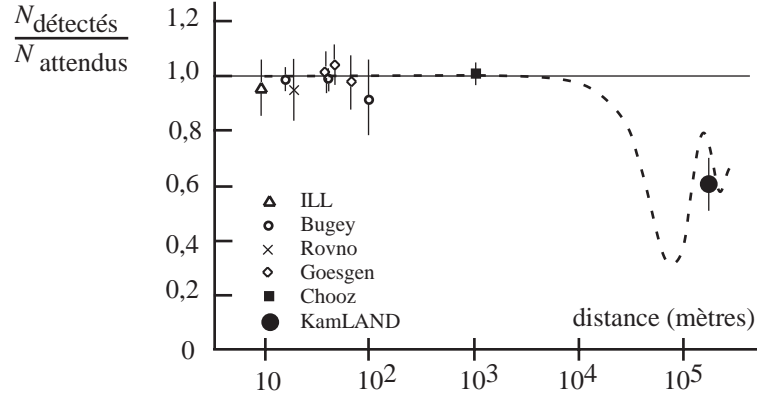


FIG. 3: Points expérimentaux de la figure 1 et prédiction théorique déduite de (11) (sinusoïde amortie par les effets de dispersion énergétique). Cette courbe représente le meilleur ajustement des données de neutrinos solaires. On remarquera que les données de KamLAND correspondent à la deuxième oscillation de la courbe.

Oscillations des trois espèces : neutrinos atmosphériques

1. À l'instant $t = 0$, on a :

$$|\nu(0)\rangle = |\nu_\alpha\rangle = \sum_j U_{\alpha j} |\nu_j\rangle ,$$

et par conséquent, à l'instant t :

$$|\nu(t)\rangle = e^{-ipct/\hbar} \sum_j U_{\alpha j} e^{-im_j^2 c^3 t / (2\hbar p)} |\nu_j\rangle .$$

On en déduit que la probabilité $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ d'observer un neutrino de saveur β à l'instant t est

$$P_{\alpha \rightarrow \beta}(t) = |\langle \nu_\beta | \nu(t) \rangle|^2 = \left| \sum_j U_{\beta j}^* U_{\alpha j} e^{-im_j^2 c^3 t / (2\hbar p)} \right|^2 .$$

2. On a $L_{ij} = 4\pi\hbar E / (|\Delta m_{ij}^2| c^3)$. Les longueurs d'oscillation sont proportionnelles à l'énergie. Il suffit donc de se reporter au résultat de la question 1.3, en faisant la conversion d'un facteur 1000 pour passer de 4 MeV à 4 GeV.

- Pour $|\Delta m_{12}^2| c^4 = 7,1 \times 10^{-5} \text{eV}^2$, on trouve $L_{12} = 140\,000 \text{ km}$.
- Pour $|\Delta m_{23}^2| c^4 = 2,5 \times 10^{-3} \text{eV}^2$, on trouve $L_{23} = 4\,000 \text{ km}$.

3. On cherche ici la distance minimale nécessaire pour observer une oscillation. On suppose donc que les angles de mélange θ_{12} et θ_{23} sont égaux à $\pi/4$, ce qui correspond à un mélange maximal. On a vu en première partie que si ce mélange n'est pas maximal, la visibilité des oscillations est réduite et que la distance nécessaire pour observer le phénomène d'oscillation est augmentée.

En reprenant le raisonnement de la première partie, on trouve que la modification du flux de neutrinos d'une espèce donnée sera détectable au bout d'une distance ℓ_{ij} telle que $\sin^2(\pi \ell_{ij} / L_{ij}) \geq 0,1$ c'est-à-dire $\ell_{ij} \geq L_{ij} / 10$. Cela correspond à $\ell_{12} \geq 14\,000 \text{ km}$ pour l'oscillation résultant d'une superposition $1 \leftrightarrow 2$, et $\ell_{23} \geq 400 \text{ km}$ pour l'oscillation résultant d'une superposition $2 \leftrightarrow 3$.

4. Le facteur 2 entre les flux attendus pour les neutrinos muoniques et électroniques résulte d'un simple comptage : chaque particule π^- (resp. π^+) donne naissance à un ν_μ , un $\bar{\nu}_\mu$ et un $\bar{\nu}_e$ (resp. un ν_μ , un $\bar{\nu}_\mu$ et un ν_e). En pratique, une partie des muons atteint le sol avant désintégration, ce qui vient modifier ce rapport. Bien entendu, cet effet est pris en compte dans le traitement précis des données.
5. Pour une énergie de 4 GeV, on a trouvé que la distance minimale pour observer l'oscillation résultant de la superposition $1 \leftrightarrow 2$ est 14 000 km. On constate donc que les oscillations $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$, correspondant au mélange $1 \leftrightarrow 2$ et étudiées dans la première partie, ne pourront pas être observées sur des distances terrestres. À cette échelle d'énergie (4 GeV) et pour des temps d'évolution correspondant au plus à la traversée de la terre (0,04 s), on peut négliger la différence d'énergie $E_1 - E_2$ et les phénomènes d'oscillation qu'elle entraîne. En revanche, si l'estimation $|\Delta m_{23}^2| c^4 > 10^{-3} \text{eV}^2$ est correcte, les échelles de distances terrestres permettent en principe d'observer des oscillations résultant des superpositions $2 \leftrightarrow 3$ ou $1 \leftrightarrow 3$, correspondant à $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$ ou $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\tau$.
6. La distribution angulaire (donc en distance ℓ) observée pour les ν_e ne montre aucun signe de déviation par rapport à la prédiction faite en négligeant toute oscillation. En revanche, il y a une nette indication d'oscillation des ν_μ : il y a un déficit clair de neutrinos muoniques venant du bas, c'est-à-dire ceux qui ont eu un long temps d'évolution.

Le déficit de neutrinos muoniques n'est pas dû à l'oscillation $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$ de la première partie. En effet, nous avons vu à la question précédente que celle-ci est négligeable sur l'échelle de temps considérée. Les données expérimentales de la figure 2 confirment d'ailleurs ce point : le déficit de neutrinos muoniques venant du bas n'est pas associé à une augmentation des neutrinos électroniques. Il ne peut donc s'agir¹ que d'une oscillation $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$.

Aucune oscillation $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\tau$ n'apparaît pas sur les données expérimentales. Dans le cadre du modèle envisagé ici, cela s'interprète comme la signature d'un angle de mélange θ_{13} très faible ou nul.

7. Reprenons le résultat de la question 1.4, et notamment la probabilité (11). La probabilité pour qu'un neutrino ν_μ , produit dans l'atmosphère terrestre, soit détecté en tant que ν_μ vaut :

$$P(\ell) = 1 - \sin^2(2\theta_{23}) \overline{\sin^2\left(\frac{\pi\ell}{L_{23}}\right)}, \quad (12)$$

où la moyenne porte sur la distribution en énergie du neutrino. Si on mesure le flux de neutrinos venant du haut, on a $\ell \ll L_{23}$, ce qui donne $P_{\text{haut}} = 1$. Si le neutrino vient du bas, le terme en $\sin^2(\pi\ell/L_{23})$ se moyenne à 1/2 et on trouve :

$$P_{\text{bas}} = 1 - \frac{1}{2} \sin^2(2\theta_{23}).$$

Les données expérimentales nous indiquent que, pour $-1 \leq \cos \alpha \leq -0,5$, $P_{\text{bas}} = 1/2$. La distribution est très plate à une valeur (100 événements) moitié de celle obtenue vers le haut (200 événements).

On en déduit que $\sin^2(2\theta_{23}) = 1$, soit $\theta_{23} = \pi/4$, c'est-à-dire un angle de mélange $\nu_\mu \rightleftharpoons \nu_\tau$ maximum. Les résultats publiés par Super-Kamiokande sont évidemment en plein accord avec cette analyse.

¹Pour être complets, signalons que les physiciens ont aussi examiné la possibilité d'une oscillation avec un neutrino "stérile", qui n'aurait aucune interaction directement détectable avec la matière.

Commentaires

La grande difficulté de ces expériences provient de la très faible section efficace d'interaction des neutrinos avec la matière. Les détecteurs sont de gigantesques masses d'eau, où l'on observe au mieux une dizaine d'événements par jour (par exemple $\bar{\nu}_e + p \rightarrow e^+ + n$). La « précision » d'un détecteur provient principalement de la statistique, c'est-à-dire du nombre total d'événements enregistrés.

En 1998, la première observation indiscutable de l'oscillation de neutrinos $\nu_\tau \rightleftharpoons \nu_\mu$ a été annoncée au Japon par l'expérience Super-Kamiokande (Y. Fukuda et *al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1562 (1998)). Cette expérience utilisait un détecteur contenant 50 000 tonnes d'eau, où 11 500 photomultiplicateurs détectaient la lumière Cherenkov des électrons ou muons produits. Une soixantaine de ν_τ ont également été détectés, mais en nombre insuffisant pour donner un supplément d'information. Le résultat de Super-Kamiokande a été raffiné par la suite. Une expérience d'accélérateurs a confirmé les valeurs obtenues (K2K collaboration, Phys. Rev. Lett. **90**, 041801 (2003)).

L'expérience KamLAND est une collaboration entre des physiciens japonais, américains et chinois. Le détecteur est un ballon de 1000 m³ rempli de scintillateur liquide (liquide organique C-H). Le sigle signifie KAMioka Liquid scintillator Anti-Neutrino Detector. Référence : KamLAND Collaboration, Phys. Rev. Lett. **90**, 021802 (2003) ; voir aussi <http://kamland.lbl.gov/>.

Un grand nombre de résultats proviennent d'expériences sur les neutrinos solaires. Nous n'avons pas abordé ce problème, extrêmement important mais trop complexe pour notre propos. Voir par exemple J. N. Bahcall, Astrophys. Jour. **467**, 475 (1996) et M. B. Smy, Mod. Phys. Lett. **A 17**, 2163 (2002).

Signalons enfin l'attribution du Prix Nobel 2002 à Raymond Davis Jr. et à Masatoshi Koshiba, pionniers de cette physique des neutrinos.

Pour en savoir plus : Thierry Lasserre et Daniel Vignaud, *La mystérieuse identité des neutrinos*, Pour La Science, octobre 2003, p. 58 ; André Rougé, *Physique subatomique*, Chapitre 8 (Éditions de l'École polytechnique, 2003).