

CONTRÔLE NON CLASSANT DU COURS DE PHYSIQUE PHY 311

Mercredi 9 juillet 2008, durée : 2 heures

Documents autorisés : cours, recueil de problèmes, copies des diapositives montrées en cours, énoncés et corrigés de PC, notes personnelles. Les parties 3 et 4 sont indépendantes l'une de l'autre et chacune peut être traitée immédiatement après la partie 2. Le barème prévu pour chaque partie est donné à titre indicatif. Le barème réel pourra différer légèrement de cette prévision.

La chaîne périodique et les oscillations de Bloch

Le mouvement d'une particule dans un potentiel périodique est un problème central en physique. Un exemple important est la conduction électrique des métaux, causée par le mouvement des électrons dans le réseau cristallin. On étudie ici une version très simplifiée de ce problème, en s'intéressant au mouvement d'une particule unique sur une chaîne de sites régulièrement espacés. On va en particulier chercher à rendre compte d'un phénomène *a priori* surprenant, appelé *oscillations de Bloch* : si on ajoute une force constante à celle créée par le réseau périodique, la particule se met en mouvement oscillatoire (alors qu'elle serait uniformément accélérée si le réseau périodique était absent).

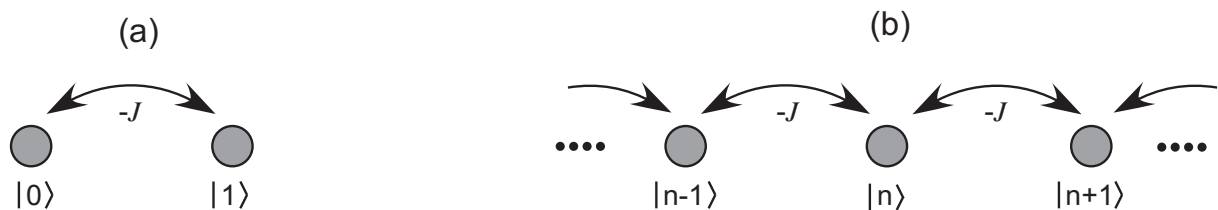


FIG. 1 { (a) Modèle à deux sites étudié dans la première partie. (b) Chaîne infinie étudiée en parties 2, 3 et 4.

1 Le problème à deux sites (3/20)

On considère dans un premier temps le cas où la particule peut occuper uniquement deux sites de l'espace, séparés par une distance a (figure 1a). On note respectivement $|0\rangle$ et $|1\rangle$ les états correspondant à la particule localisée sur le site de gauche et sur le site de droite, l'ensemble $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ formant une base orthonormée. On suppose que la particule a la même énergie E_0 sur chacun de ces deux sites. La particule peut également sauter d'un site à l'autre par effet tunnel, et on note $-J$ l'élément de matrice correspondant. L'hamiltonien total de la particule est donc

$$\hat{H} = E_0 (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) - J (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) .$$

- 1.1. Écrire l'hamiltonien sous forme de matrice 2×2 dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.
- 1.2. Donner la forme des états propres et les énergies propres correspondantes.
- 1.3. On prépare la particule dans l'état $|0\rangle$ à l'instant initial $t = 0$. Quelle est la probabilité de trouver la particule dans l'état $|1\rangle$ à l'instant t ?

2 Les états stationnaires de la chaîne périodique infinie (6/20)

La particule peut maintenant se déplacer sur une chaîne uni-dimensionnelle infinie de sites (figure 1b). On note $|n\rangle$ l'état correspondant à la particule localisée sur le n -ième site, n étant un entier positif, négatif ou nul. On choisit les états $|n\rangle$ orthonormés : $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$.

En absence d'écart tunnel entre sites, tous les états $|n\rangle$ ont la même énergie E_0 . L'écart tunnel permet à la particule de sauter du site n vers les deux sites voisins $n \pm 1$. Comme dans la partie précédente, on note $-J$ l'élément de matrice décrivant ce saut. L'hamiltonien de la particule sur la chaîne s'écrit donc

$$\hat{H} = \sum_n E_0 |n\rangle\langle n| - J (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) .$$

2.1. On cherche les états propres $|\phi\rangle$ de l'hamiltonien \hat{H} . En écrivant $|\phi\rangle$ sous la forme $|\phi\rangle = \sum_n D_n |n\rangle$, donner l'équation de récurrence vérifiée par les coefficients D_n . On notera E l'énergie de l'état $|\phi\rangle$.

2.2. On cherche la solution de cette équation de récurrence sous la forme $D_n = D_0 e^{iqna}$, où q est un nombre réel dont la dimension est celle d'un vecteur d'onde. Montrer qu'on trouve ainsi une solution pour tout q , l'énergie correspondante $E(q)$ vérifiant l'équation

$$E(q) = E_0 - 2J \cos(qa) . \quad (1)$$

On notera $|\phi_q\rangle$ le vecteur ainsi obtenu. On ne cherchera pas à normaliser $|\phi_q\rangle$ et on prendra par convention $D_0 = 1$.

2.3. Parmi les états $|\phi_q\rangle$ trouvés ci-dessus, montrer que les états correspondants à q et $q + 2\pi/a$ sont identiques. Dans la suite, on restreindra les valeurs de q à l'intervalle $-\pi/a < q \leq \pi/a$.

2.4. États particulier du système.

- Préciser l'état fondamental du système et donner son énergie.
- Préciser l'état de plus grande énergie du système et donner son énergie.
- Comparer l'expression de ces deux états aux états propres trouvés en partie 1.

2.5. L'opérateur « impulsion » sur la chaîne. On définit cet opérateur par

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2a} \sum_n (|n\rangle\langle n+1| - |n+1\rangle\langle n|) . \quad (2)$$

- On se donne un vecteur d'état quelconque $|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle$. On pose $|\chi\rangle = \hat{P}|\psi\rangle = \sum_n \beta_n |n\rangle$. Exprimer les coefficients β_n en fonction des coefficients α_n . En considérant la limite $a \rightarrow 0$, rapprocher ce résultat de celui vu dans le cours pour l'opérateur impulsion en physique ondulatoire à une dimension.
- Montrer que les états $|\phi_q\rangle$ sont des états propres de l'opérateur \hat{P} avec une impulsion $p(q)$ dont on donnera l'expression en fonction de \hbar, a, q . Simplifier cette relation pour $|q| \ll 1/a$.

3 Évolution sur la chaîne infinie (5/20)

On se donne un vecteur d'état $|\psi_0\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle$, avec $\sum_n |\alpha_n|^2 = 1$. Pour assurer la convergence des expressions intervenant dans la suite, on supposera que $|\alpha_n|$ tend vers 0 plus vite que toute puissance de n quand n tend vers $\pm\infty$.

3.1. Montrer qu'on peut écrire $|\psi_0\rangle$ sous la forme

$$|\psi_0\rangle = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} C(q) |\phi_q\rangle dq, \quad (3)$$

où $C(q)$ est une fonction périodique de q de période $2\pi/a$. On rappelle que toute fonction périodique de ce type peut (pourvu qu'elle soit suffisamment régulière) se décomposer en série de Fourier :

$$C(q) = \sum_n \beta_n e^{-iqna} \quad \text{avec} \quad \beta_n = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} C(q) e^{inqa} dq.$$

On exprimera $C(q)$ en fonction des coefficients α_n .

3.2. À l'instant initial, la particule est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$ donné en (3). Donner sans calcul l'état $|\psi(t)\rangle$ de la particule à l'instant t sous une forme similaire à (3), faisant également intervenir $C(q)$.

3.3. On suppose que les coefficients $C(q)$ intervenant dans (3) ne prennent des valeurs non nulles que dans la région $|q| \ll \pi/a$. Réécrire l'expression précédente en développant $E(q)$ à l'ordre le plus bas non nul en q (on ne cherchera pas à calculer l'intégrale).

3.4. **Évolution d'une particule libre.** On souhaite rapprocher les résultats obtenus ci-dessus de ceux connus pour le mouvement quantique à une dimension d'une particule libre de masse M . On suppose que la particule libre a pour fonction d'onde $\psi(x, 0)$ à l'instant $t = 0$. Rappeler sans démonstration :

- (a) l'expression de la transformée de Fourier $\varphi(p)$ de $\psi(x, 0)$,
- (b) l'expression de la fonction d'onde $\psi(x, t)$, sous forme d'une intégrale sur l'impulsion p , faisant notamment intervenir $\varphi(p)$.

3.5. En introduisant une analogie entre les résultats des questions 3.3 et 3.4, montrer que l'équation établie en 3.3 s'interprète comme décrivant le mouvement d'une particule libre de masse effective M_{eff} que l'on précisera. Commenter physiquement la dépendance de M_{eff} avec l'amplitude de saut tunnel J quand $J \rightarrow 0$.

4 Les oscillations de Bloch (6/20)

La particule évolue toujours sur la chaîne infinie, mais on suppose que cette particule est en plus soumise à une force constante F , dérivant du potentiel $-Fx$. Dans la base discrète des états $|n\rangle$ considérée ici, ce potentiel s'écrit

$$\hat{V} = - \sum_n n F a |n\rangle \langle n|.$$

L'hamiltonien total du système est maintenant $\hat{H}' = \hat{H} + \hat{V}$. On ne cherchera pas à calculer les états propres de cet hamiltonien.

4.1. On considère une particule préparée à l'instant $t = 0$ dans un des états $|\phi_q\rangle$ trouvés ci-dessus :

$$|\psi(0)\rangle = |\phi_{q_0}\rangle = \sum_n e^{inq_0 a} |n\rangle$$

et on cherche à montrer que l'état du système reste à n'importe quel instant égal à un état $|\phi_q\rangle$, à une phase globale près. Pour cela, on cherche l'état de la particule à l'instant t sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{i[nq(t)a - \alpha(t)]} |n\rangle \quad (4)$$

où $q(t)$ et $\alpha(t)$ sont des fonctions réelles.

Reporter l'expression (4) pressentie pour $|\psi(t)\rangle$ dans l'équation de Schrödinger et montrer qu'on peut effectivement trouver une solution sous cette forme. On mettra le résultat sous forme de deux équations différentielles régissant l'évolution de $q(t)$ et $\alpha(t)$.

4.2. Montrer que la solution des équations pour $q(t)$ et $\alpha(t)$ est :

$$q(t) = q_0 + \frac{Ft}{\hbar}, \quad (5)$$

$$\alpha(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E(q(t')) dt'. \quad (6)$$

4.3. Quel est l'état du système à l'instant $T = 2\pi\hbar/(Fa)$? Montrer que la quantité $\alpha(T)$ est indépendante de q_0 et donner son expression.

4.4. On considère maintenant l'état initial $|\psi_0\rangle$ écrit en (3), où la fonction $C(q)$ est quelconque. En utilisant la linéarité de l'équation de Schrödinger, donner sans calcul l'état du système à l'instant $T = 2\pi\hbar/(Fa)$. Comment se comparent les propriétés physiques du système à l'instant 0 et à l'instant T ?

4.5. Des atomes refroidis par la lumière, placés dans le potentiel périodique créé par un faisceau lumineux, et soumis à la force F envisagée ci-dessus, constituent un système modèle pour l'étude de ce phénomène. Par une méthode de temps de vol, on mesure à des instants régulièrement espacés la vitesse moyenne $\bar{v} = \langle \hat{P} \rangle / M$ de l'assemblée atomique, où \hat{P} est l'opérateur impulsion défini à la question 2.5. Le résultat est représenté sur la figure 2 pour des atomes de césium (masse $M = 2.2 \times 10^{-25}$ kg) placés dans un potentiel de période $a = 425$ nm. Commenter le phénomène observé (quelques lignes sont suffisantes). Peut-on rendre compte de l'ordre de grandeur de l'amplitude des oscillations?

4.6. Calculer la force F et l'accélération F/M à laquelle ces atomes sont soumis.

4.7. En utilisant une analogie avec la diffraction d'ondes par des structures cristallines périodiques, justifier qualitativement le fait que la particule « oscille », c'est-à-dire que sa vitesse change périodiquement de sens, au lieu d'augmenter régulièrement comme sous l'action d'une force constante dans le vide.

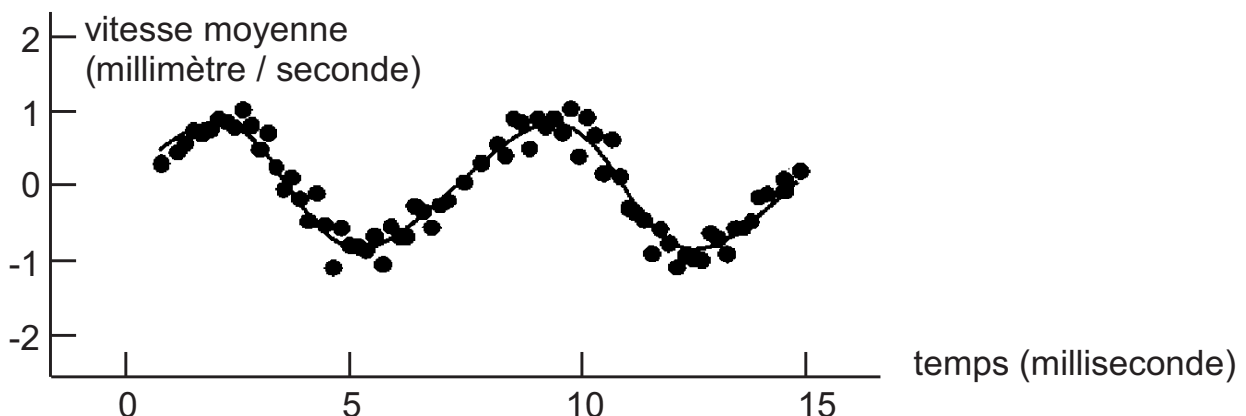


FIG. 2 { Mesure de la vitesse moyenne d'atomes de césium placés dans un potentiel périodique et soumis à une force uniforme supplémentaire F . Le potentiel périodique est créé par une onde lumineuse stationnaire. La ligne continue sert de guide visuel aux données expérimentales. Figure extraite de M. Ben Dahan *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4508 (1996).

Corrigé

1 Le problème à deux sites

1.1. On trouve une matrice identique à celle vue dans le cours pour la description des deux premiers états de la molécule d'ammoniac :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -J \\ -J & E_0 \end{pmatrix} .$$

1.2. Les états propres de cette matrice sont l'état symétrique $|\psi_s\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, associé à la valeur propre $E_0 - J$, et l'état antisymétrique $|\psi_a\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$, associé à la valeur propre $E_0 + J$.

1.3. On décompose l'état initial $|\psi(0)\rangle$ sur la base propre de l'hamiltonien :

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_s\rangle + |\psi_a\rangle) .$$

On en déduit l'état du système à l'instant t :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(E_0-J)t/\hbar} |\psi_s\rangle + e^{-i(E_0+J)t/\hbar} |\psi_a\rangle .$$

La probabilité recherchée est

$$P_1(t) = |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4} e^{-i(E_0-J)t/\hbar} - e^{-i(E_0+J)t/\hbar} = \sin^2(Jt/\hbar) .$$

On retrouve l'oscillation caractéristique de l'inversion de la molécule d'ammoniac.

2 Les états stationnaires de la chaîne périodique infinie

2.1. On multiplie l'équation aux valeurs propres $\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ par le bra $\langle n|$ et on obtient

$$E_0 D_n - J(D_{n+1} + D_{n-1}) = E D_n ,$$

qui correspond à l'équation de récurrence recherchée.

2.2. On reporte la solution proposée dans l'énoncé et on trouve

$$e^{iqna} (E - E_0 + 2J \cos(qa)) D_0 = 0$$

Comme le coefficient D_0 est non nul (sinon le vecteur $|\phi\rangle$ serait nul), on en déduit que E vérifie l'équation

$$E(q) = E_0 - 2J \cos(qa) \quad |\phi_q\rangle = \sum_n e^{iqna} |n\rangle .$$

2.3. Si on change q en $q + 2\pi/a$, l'expression du vecteur $|\phi_q\rangle$ est inchangée. En effet chacun des coefficients du développement $D_n = e^{iqna}$ sur la base $|n\rangle$ devient $e^{i(q+2\pi/a)na} = e^{iqna}$ puisque $e^{i2\pi n} = 1$ pour tout n . Pour éviter le double comptage d'états, on est donc amené à restreindre l'intervalle utile des valeurs de q à un intervalle semi-ouvert de longueur $2\pi/a$, par exemple $]-\pi/a, \pi/a]$.

2.4. États particuliers du système.

(a) L'état fondamental du système est obtenu en prenant $q = 0$, correspondant à l'énergie $E_0 - 2J$.

(b) L'état de plus grande énergie est obtenu en prenant $q = \pi/a$, correspondant à l'énergie $E_0 + 2J$.

(c) L'état propre correspondant à l'énergie la plus basse est $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, qui peut être vu comme une généralisation de l'état symétrique $|0\rangle + |1\rangle$. L'état propre correspondant à l'énergie la plus haute est $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Cette alternance de signes + et - sur les différents sites peut être vue comme une généralisation de l'état antisymétrique $|0\rangle - |1\rangle$.

2.5. L'opérateur impulsion.

(a) L'action de \hat{P} sur $|\psi\rangle$ donne

$$\hat{P}|\psi\rangle$$

3.2. L'état initial est écrit comme une combinaison linéaire des états propres de l'hamiltonien. L'état à l'instant t s'obtient donc simplement :

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} C(q) e^{-iE(q)t/\hbar} |\phi_q\rangle dq .$$

3.3. Si $|q| \ll \pi/a$, on peut effectuer le développement $E(q) \simeq E_0 - 2J + Jq^2 a^2$, ce qui conduit à l'expression approchée de $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(E_0 - 2J)t/\hbar} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} C(q) e^{-iJq^2 a^2 t/\hbar} |\phi_q\rangle dq . \quad (11)$$

3.4. Évolution d'une particule libre.

(a) La transformée de Fourier $\varphi(p)$ vaut

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ixp/\hbar} dx . \quad (12)$$

(b) A l'instant t , $\psi(x, t)$ vaut

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) e^{-ip^2 t/(2M\hbar)} e^{ixp/\hbar} dp . \quad (13)$$

3.5. Il y a une analogie claire entre les deux paires d'équations (10-11) et (12-13) :

{ Dans le cas de la chaîne, la position de la particule ne peut prendre que des valeurs discrètes et l'amplitude de probabilité pour trouver la particule sur le site n vaut α_n . Pour la particule libre, la position x prend des valeurs continues et l'amplitude de probabilité pour trouver la particule en x vaut $\psi(x)$.

{ Dans le cas de la chaîne, les états $|\phi_q\rangle$ ont une impulsion bien déterminée et le coefficient $C(q)$ du développement de $|\psi_0\rangle$ sur les états $|\phi_q\rangle$ se calcule par une somme discrète (10). Pour la particule libre, le coefficient $\varphi(p)$ du développement de $\psi(x)$ sur la base des ondes planes $e^{ipx/\hbar}$, qui sont également des

{ Les deux équations (11) et (13) donnent l'évolution temporelle de la distribution en position, avec dans les deux cas un terme faisant intervenir le carré de "l'impulsion" : $\hbar q$ pour la chaîne infinie et p pour la particule libre.

L'identification des deux termes $e^{-iJq^2 a^2 t/\hbar}$ et $e^{-ip^2 t/(2M\hbar)}$ conduit à introduire une masse effective pour la particule sur la chaîne périodique infinie :

$$M_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2} .$$

On voit que la masse effective est d'autant plus grande que l'amplitude tunnel est faible. Ceci rappelle l'idée intuitive qu'un saut tunnel faible correspond à une forte inertie de la particule, avec une faible probabilité de sauter d'un site à l'autre en un temps donné.

Remarque. L'identification du problème de la particule libre et de la particule sur la chaîne ne peut se faire que pour $|q| \ll \pi/a$. Sinon la *relation de dispersion* qui relie l'énergie à $\hbar q$ n'est plus quadratique, et il n'y a plus d'analogie formelle entre les deux problèmes.

4 Les oscillations de Bloch

4.1. On reporte la forme de la solution proposée dans l'équation de Schrödinger et on projette l'équation obtenue sur un état $|n\rangle$:

$$i\hbar(inqa - i\alpha) = E_0 - 2J \cos(q(t)a) - nFa .$$

Comme cette équation doit être vérifiée pour tout n , il faut que

$$\hbar\alpha = E(q(t)) \quad \hbar q = F .$$

4.2. L'équation sur q s'intègre pour donner $\hbar q(t) = \hbar q_0 + Ft$. Une fois $q(t)$ connu, on peut intégrer l'équation donnant α :

$$\hbar \alpha(t) = \int_0^t E(q(t')) dt' .$$

L'évolution de $q(t)$ rappelle celle qu'on trouve pour une particule uniformément accélérée, pour laquelle l'impulsion varie comme $p(t) = p_0 + Ft$, et donc le vecteur d'onde comme $k(t) = k_0 + Ft/\hbar$. Bien sûr, cette analogie n'est que partielle, car on a vu plus haut que les états $|\phi_q\rangle$ étaient périodiques vis à vis de q , ce qui n'est pas le cas pour une particule libre.

4.3. Si on choisit $T = 2\pi\hbar/(Fa)$, on obtient $q(T) = q_0 + 2\pi/a$. Or, on a vu en partie 2 que le vecteur $|\phi_q\rangle$ et le vecteur $|\phi_{q+2\pi/a}\rangle$ coïncident quel que soit q . L'état du système à cet instant est donc le même qu'à l'instant $t = 0$, à une phase près ($e^{-i\alpha(T)}$). Notons que cette phase $\alpha(T)$ ne dépend pas de q_0 . En effet

$$\hbar \alpha(T) = \int_0^T (E_0 - 2J \cos(q(t)a)) dt = E_0 T$$

car le terme en $\cos(q(t)a)$ ne contribue pas quand on l'intègre sur une période entière de son argument.

4.4. Par linéarité de l'équation de Schrödinger, l'état du système à l'instant T est égal à l'état du système à l'instant 0, multiplié par le terme de phase $e^{-iE_0 T/\hbar}$. Les propriétés physiques du système sont donc identiques à l'instant 0 et à l'instant T : l'évolution du système est périodique.

4.5. On observe une évolution périodique de la vitesse moyenne des atomes, avec une période de l'ordre de 8 ms. L'amplitude de l'oscillation est légèrement inférieure à 1 mm/s. Si l'état initial était exactement un état $|\phi_{q_0}\rangle$, on s'attendrait à ce que l'état à tout instant t soit un état $|\phi_{q(t)}\rangle$, avec $q(t) = q_0 + Ft/\hbar$. Ceci correspondrait d'après (8) à une vitesse $v(t) = p(t)/M = (\hbar/(Ma)) \sin(q(t)a)$, c'est-à-dire une oscillation sinusoïdale d'amplitude $\hbar/(Ma) = 1.1$ mm/s. L'amplitude mesurée est légèrement plus faible, ce qui traduit le fait que l'état initial est une superposition de différents états $|\phi_q\rangle$. On peut également remarquer que contrairement à la prédiction théorique, l'oscillation observée n'est pas parfaitement sinusoïdale, les parties de vitesse positive étant légèrement plus longues que les parties de vitesse négative : cette dissymétrie indique une limite du modèle discret étudié ici.

4.6. La période T mesurée est de 8 ms. Ceci correspond à une force $F = 2\pi\hbar/(aT) = 2 \times 10^{-25}$ N et une accélération $A = F/M = 2\pi\hbar/(MaT) = 0.9$ m/s², soit un dixième environ de l'accélération de la pesanteur.

4.7. On peut interpréter qualitativement l'oscillation observée en faisant une analogie avec le phénomène de diffraction de Bragg. La particule est accélérée par la force F et acquiert une vitesse positive si $F > 0$. La particule interagit également avec les différents sites du réseau, qui peuvent causer une réflexion vers l'arrière ($v < 0$) de la particule. Cette réflexion devient efficace quand la condition de diffraction de Bragg est remplie, ce qui correspond dans le cas présent à une phase opposée sur deux sites adjacents du réseau. La particule repart en arrière, est de nouveau accélérée, et ainsi de suite. Cette analogie n'est que qualitative dans le modèle discret considéré ici. On peut la rendre plus quantitative si on s'intéresse à la version continue du problème, en particulier dans l'approximation des « liaisons faibles », où la modulation du potentiel périodique est petite devant $\hbar^2/(Ma^2)$.