Année Universitaire 2021-2022
25 Mai 2022
Session Normale

Université Ibn Zohr
Faculté des Sciences d'Agadir
Département de Physique

Examen de Mécanique Quantique I - SMP4

DURÉE 2H00 - AUCUN DOCUMENT N'EST AUTORISÉ

Questions de cours (5 pts)

1. Montrer que deux vecteurs propres $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ d'un opérateur hermitique $\mathbf{A}$ associés respectivement à deux valeurs propres λ_1 et λ_2 différentes, sont orthogonaux.

2. Soit A un opérateur hérmitique et $|u_n\rangle$ vecteur propre de A qui correspond à la valeur propre a_n tels que A$|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$. Montrer que a_n est un nombre réel.

3. $a)$ Rappeler la relation donnant l'évolution dans le temps de la valeur moyenne d'une grandeur représentée par l'observable A.
   $b)$ Soient A et B deux observables quelconques. Démontrer la relation suivante :

$$\frac{d}{dt}\langle \mathrm{A.B}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \mathrm{A}[\mathrm{B},\mathrm{H}]\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathrm{A},\mathrm{H}]\,\mathrm{B}\rangle + \langle \mathrm{A}\frac{\partial \mathrm{B}}{\partial t}\rangle + \langle \frac{\partial \mathrm{A}}{\partial t}\mathrm{B}\rangle$$

Exercice : Marche de potentiel (8 pts)

Une particule de masse m et d'énergie E est soumise à une marche de potentiel $V(x)$ définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad x<0 \quad \text{région (I)}, \\ V_0 & \text{pour} \quad x>0 \quad \text{région (II)}. \end{cases}$$

V_0 étant positif. On s'intéresse plus particulièrement au cas où l'énergie de la particule est inférieure à V_0, i.e. $0 < E < V_0$, et on posera :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad \rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

1. Tracer l'allure de $V(x)$.

2. Écrire les équations vérifiées par la fonction d'onde dans les deux régions. On notera par ψ_I et ψ_{II} la fonction d'onde respectivement dans la région (I) et (II).

3. Résoudre <u>physiquement</u> ces équations. Indiquer le type de chaque terme (onde incidente, réfléchie, transmise ou évanescente).

4. Exprimer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point $x = 0$.

5. Déduire les rapports des amplitudes des ondes réfléchie et transmise par rapport à l'onde incidente.

6. Le courant de probabilité qui caractérise le flux de particules est défini, à 1 dimension, par :

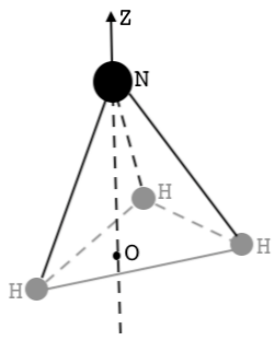
$$\vec{j}(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx}\right)\vec{e}_x$$

Calculer les courants de probabilité incident et réfléchi par la marche de potentiel.

7. Déterminer le coefficient de réflexion $R = |\vec{j}_r/\vec{j}_i|$. Interpréter.

8. Cependant, l'existence de la fonction d'onde dans la région (II) implique une probabilité non nulle de trouver la particule dans la région (II). En supposant que la particule est un électron de masse m_e et d'énergie $E = 3$ eV, et que $V_0 = 6$ eV, trouver la profondeur a de pénétration de la particule dans le cas ou la densité de probabilité est égale à 0.5%. On donne : $\hbar c = 12400\,\text{eV.Å}$, $m_e c^2 = 0.5$ MeV et $A = 1$ (amplitude de l'onde incidente).

$\boxed{\textit{Problème}}$: **Molécule d'Ammoniac (7 pts)**



La molécule d'ammoniac NH_3 peut se représenter en terme des coordonnées des noyaux où les trois atomes d'hydrogène (H) occupent les trois sommets de la base triangulaire équilatérale, alors que l'atome d'azote (N) se déplace le long de l'axe perpendiculaire; sa coordonnée est notée Z.
Dans le modèle ainsi défini, l'Hamiltonien H possède deux états propres normalisés $|\phi_\pm\rangle$ d'énergies $E_\pm$:

$$\mathrm{H}\,|\phi_\pm\rangle = E_\pm\,|\phi_\pm\rangle\,, \qquad E_\pm = E_0 \pm \hbar\omega \qquad (\omega > 0)$$

dans chacun de ces états, l'atome d'azote n'est ni d'un côté ni de l'autre, mais des deux côtés "à la fois".

1. Écrire la matrice $\hat{\mathrm{H}}$ représentant H dans la base $\{|\phi_-\rangle, |\phi_+\rangle\}$.

2. À $t = 0$, l'état de la molécule est :

$$|\psi(t=0)\rangle = c_-\,|\phi_-\rangle + c_+\,|\phi_+\rangle \qquad (c_\pm \in \mathbb{C})$$

Écrire l'expression de l'état à l'instant t, $|\psi(t)\rangle$, sur la base $\{|\phi_-\rangle, |\phi_+\rangle\}$.

3. L'opérateur associé à la coordonnée de l'atome d'azote, Z, est représenté sur la base $\{|\phi_-\rangle, |\phi_+\rangle\}$ par la matrice :

$$\hat{\mathrm{Z}} = a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{où } a \text{ est une certaine longueur}$$

$a)$ Quels sont la valeur moyenne et l'écart quadratique de Z dans l'état propre $|\phi_+\rangle$?
$b)$ Quelles sont les valeurs propres $z_i\,(i = 1,2)$ de l'observable étudiée ($z_1 < z_2$) ?
$c)$ Soit $|z_i\rangle$ $(i = 1,2)$ les vecteurs propres normalisés de Z; donner les expressions des $|z_i\rangle$ sur la base $\{|\phi_-\rangle, |\phi_+\rangle\}$.

4. On suppose qu'à $t = 0$, la molécule est dans l'état $|z_2\rangle$ et soit $|\psi(t)\rangle$ l'état du système à l'instant t.

$a)$ Quelles sont les probabilités $\mathscr{P}_i$ de trouver les valeurs z_i lors d'une mesure de Z effectuée à l'instant t ?
$b)$ À quels instants est-on sûr de trouver l'une de ces valeurs avec certitude ?