Examen de Mécanique Quantique - I
SMP4 - Session Normale 2022
Corrigé

Questions de cours

① Soit A un opérateur hermitique, et $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$ deux vecteurs propres tq :

$$\left.\begin{array}{ll} (i) & A|\varphi_1\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle \\ (ii) & A|\varphi_2\rangle = \lambda_2 |\varphi_2\rangle \\ & \text{avec } \lambda_1 \neq \lambda_2 \end{array}\right] \overset{?}{\Longrightarrow} \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$$

1.5

d'aprés (ii) $\langle \varphi_1 | A | \varphi_2 \rangle = \lambda_2 \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ (iii)

d'aprés (i) $\langle \varphi_1 | A^\dagger = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \Longrightarrow \langle \varphi_1 | A = \lambda_1 \langle \varphi_1 |$

car A est hermitique $A^\dagger = A$ (on suppose que $\lambda \in \mathbb{R}^*$)

donc $\langle \varphi_1 | A | \varphi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ (iv)

Alors, d'aprés (iii) et (iv) on tire que

$$\lambda_1 \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \lambda_2 \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$$

$$\Rightarrow (\lambda_1 - \lambda_2) \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0 \quad \text{avec } \lambda_1 \neq \lambda_2$$

Il s'en suit que $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0$

② A un opérateur hermitique (auto-adjoint) et $|u_n\rangle$ un vecteur propre associé à la valeur propre a_n tq :

$$A|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle \longrightarrow \langle u_n|A|u_n\rangle = a_n \underbrace{\langle u_n|u_n\rangle}_{=1} = a_n$$

1.5

or, pour la valeur moyenne de $A^\dagger$:

$$\begin{cases} \langle u_n|A^\dagger|u_n\rangle = \langle u_n|A|u_n\rangle^* = a_n^* \text{ (i) d'une part} \\ \langle u_n|A^\dagger|u_n\rangle \overset{A^\dagger = A}{=\!=\!=} \langle u_n|A|u_n\rangle = a_n. \text{ (ii)} \end{cases}$$

de (i) et (ii) on tire que $a_n^* = a_n \longrightarrow a_n$ est une valeur propre réelle.

③ ⓐ Relation donnant l'évolution de la valeur moyenne d'une grandeur représentée par l'observable A.

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$$ th. d'Ehrenfest.

1

ⓑ pour $A \longrightarrow AB$, la relation précédente s'écrit :

$$\frac{d}{dt}\langle AB\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle [AB,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t}(AB)\right\rangle$$

avec
$$[AB,H] = A[B,H] + [A,H]B$$

et $$\frac{\partial}{\partial t}(AB) = A\frac{\partial}{\partial t}B + \frac{\partial A}{\partial t}.B$$

1

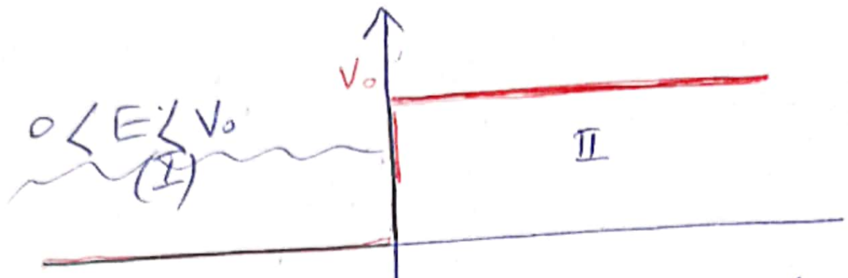
$$\Longrightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle AB\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle A[B,H]\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]B\rangle + \left\langle A\frac{\partial B}{\partial t}\right\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}.B\right\rangle}$$

2

Exercice Marche de potentiel

1) Allure de $V(x)$

on a $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \quad (I) \\ V_0 & \text{pour } x > 0 \quad (II) \end{cases}$, l'allure est donc



0,5

2) Les équations vérifiées par la fonction d'onde dans les deux régions :

l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\varphi(x) = 0$$

région (I) $V(x) = 0$ et $\varphi(x) = \varphi_I(x)$ 0,5

$\rightarrow$ $\varphi_I''(x) + k^2 \varphi_I(x) = 0$ (i) avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$

région (II) $V(x) = V_0$ et $\varphi(x) = \varphi_{II}(x)$ 0,5

$\rightarrow$ $\varphi_{II}''(x) - \rho^2 \varphi_{II}(x) = 0$ (ii) avec $\rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$

3) Résolution des équations (i) et (ii)

pour l'éq. (i) : $\varphi_I(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\text{onde réfléchie}}$

0,5

pour l'éq. (ii) : $\varphi_{II}(x) = C e^{-\rho x} + D e^{\rho x}$

la fonction d'onde φ_{II} doit être bornée quand $x \to +\infty$

donc $D \equiv 0$ et donc (0,5)

$$\varphi_{II}(x) = \underbrace{C e^{-\rho x}}_{\text{onde evanescente}}$$

④ Continuité de φ et φ' au point $x = 0$

on écrit :

$$\begin{cases} \varphi_I(0^-) = \varphi_{II}(0^+) \\ \varphi'_I(0^-) = \varphi'_{II}(0^+) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A + B = C & \text{(i)} \\ ikA - ikB = -\rho C & \text{(ii)} \end{cases}$$

(1)

⑤ Déduction

d'après les équations (i) et (ii), on écrit :

$$\begin{cases} ik \times \text{(i)} + \text{(ii)} : \quad 2ikA = ikC - \rho C \longrightarrow \boxed{\dfrac{C}{A} = \dfrac{2k}{k + i\rho}} \\ \rho \times \text{(i)} + \text{(ii)} : \quad (\rho + ik) A = (ik - \rho) B \longrightarrow \boxed{\dfrac{B}{A} = \dfrac{\rho + ik}{-\rho + ik}} \end{cases}$$

(0,5)

⑥ le courant de probabilité s'écrit :

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

pour l'onde incidente $\varphi_I^i(x) = A e^{ikx}$ on écrit :

$$\vec{j}_i(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(A^* e^{-ikx}.(ik) A e^{ikx} - A e^{ikx}.(-ik) A^*. e^{-ikx}\right)\vec{e}_x$$

soit $\vec{j}_i(x) = \dfrac{\hbar}{2im}|A|^2 . 2ik\,\vec{e}_x \equiv \boxed{\dfrac{\hbar k}{m}|A|^2\,\vec{e}_x = \vec{j}_i(x)}$ (0,5) pour l'onde réfléchie $\varphi_I^r(x) = Be^{-ikx}$

soit $\vec{j}_r(x) = \frac{\hbar}{2im}\left(B^* e^{ikx}(-ik)e^{-ikx}.B - Be^{-ikx}.(ik)B^* e^{ikx}\right)\vec{e}_x$

$= \frac{\hbar}{2im}|B|^2 2ik\,\vec{e}_x$

soit donc $\boxed{\vec{j}_r(x) = \frac{\hbar k}{m}|B|^2\vec{e}_x}$ 0,5

(7) le coef. de réflexion $R = |\vec{j}_r/\vec{j}_i|$

on a $R = |\vec{j}_r/\vec{j}_i| = \dfrac{\frac{\hbar k}{m}|B|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \dfrac{|B|^2}{|A|^2}$

or d'après la question (5), on a trouvé que

$\frac{B}{A} = \frac{\rho+ik}{-\rho+ik}$, On en déduit alors que

$R = \dfrac{|\rho+ik|^2}{|-\rho+ik|^2} = 1.$ 1

Interprétation, dans le cas où l'énergie de la particule $E < V_0$, la MQ reproduit exactement le résultat classique, qui dit que la particule rebrousse son chemin en $x_0 = 0$: Réflexion totale. 0,5

(8) Supposant que, la particule peut exister dans la région (II) $\longrightarrow$ probabilité d'$\exists \neq 0$

dans la région (II) on a :

$\sigma = |\varphi_{II}(x)|^2 =$ probabilité d'existence.

soit à la profondeur, au bout duquel, la particule assimilée à un électron, peut se trouver avec une probabilité $\sigma = |\varphi_{II}(a)|^2 = 0{,}5\,\%$. On écrit :

$$\sigma = |\varphi_{II}(a)|^2 = |C\, e^{-\rho a}|^2 = |C|^2\, e^{-2\rho a}$$

avec $\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+i\rho} \longrightarrow |C|^2 = |A|^2 \cdot \frac{4k^2}{k^2+\rho^2}$, $A = 1$

$$= \frac{4k^2}{k^2+\rho^2}$$

donc $e^{-2\rho a} = \left(\frac{k^2+\rho^2}{4k^2}\right) \cdot \sigma$

$\Leftrightarrow \quad a = \frac{1}{2\rho} \ln\left(\frac{4k^2}{(k^2+\rho^2)\sigma}\right)$ avec $\rho = \frac{\sqrt{2m_e(V_0-E)}}{\hbar}$ et $\frac{4k^2}{k^2+\rho^2} = \frac{4E}{V_0}$

$\Leftrightarrow \quad a = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e(V_0-E)}} \ln\left(\frac{4E}{V_0 \cdot \sigma}\right)$

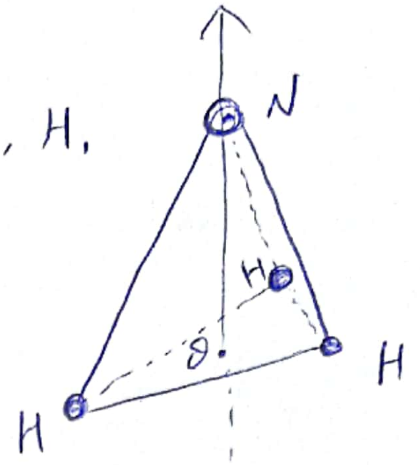
1.5

$$\boxed{a = \frac{1}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar c}{\sqrt{m_e c^2 (V_0 - E)}} \ln\left(\frac{4E}{V_0 \cdot \sigma}\right)}$$

A.N : $a = \frac{1}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{12400 \text{ eV}.\text{Å}}{\sqrt{0{,}5 \cdot 10^6 \cdot (6-3)}\text{ eV}} \ln\left(\frac{4 \times 3}{6 \times \frac{0{,}5}{100}}\right)$

$$\boxed{a = 21{,}4469 \text{ Å}}$$

/ Problème /



l'Hamiltonien qui décrit cette molécule, H, possède deux états propres normalisés $|\phi_\pm\rangle$ d'énergie $E_\pm$ avec

$$H|\phi_+\rangle = E_+|\phi_+\rangle \quad \text{et} \quad H|\phi_-\rangle = E_-|\phi_-\rangle$$

avec $E_\pm = E_0 \pm \hbar\omega \quad (\omega > 0)$

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

$$\hat{H} = \begin{array}{cc} |\phi_-\rangle & |\phi_+\rangle \\ \end{array}$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_- & 0 \\ 0 & E_+ \end{pmatrix} \begin{array}{l} \langle\phi_-| \\ \langle\phi_+| \end{array} \equiv \begin{pmatrix} E_0 - \hbar\omega & 0 \\ 0 & E_0 + \hbar\omega \end{pmatrix}$$

(0,5)

② À $t=0$, l'état de la molécule est

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

pour avoir l'expression de l'état à l'instant t, on applique l'opérateur d'évolution U tq :

$$|\psi(t)\rangle = U(0,t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-0)}\,|\psi(0)\rangle$$

soit donc

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\left(c_-|\phi_-\rangle + c_+|\phi_+\rangle\right)$$

$$= c_- e^{-\frac{i}{\hbar}E_- t}|\phi_-\rangle + c_+ e^{-i\frac{E_+ t}{\hbar}}$$

$$= \left[c_- e^{i\omega t}|\phi_-\rangle + c_+ e^{-i\omega t}|\phi_+\rangle\right] \times e^{-\frac{i}{\hbar}E_0}$$

(1)

donc $\boxed{|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iE_0}{\hbar}\right) \times \left\{c_- e^{i\omega t}|\phi_-\rangle + c_+ e^{-i\omega t}|\phi_+\rangle\right\}}$

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

$$\hat{Z} = a \begin{array}{c} \begin{array}{cc} |\phi_-\rangle & |\phi_+\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \langle\phi_-| \\ \langle\phi_+| \end{array}$$

a représente une certaine longueur.

ⓐ la valeur moyenne et l'écart quadratique de Z dans l'état propre $|\phi_+\rangle$.

*) on a pour la valeur moyenne :

$$\langle Z\rangle_{|\phi_+\rangle} = \langle Z\rangle_{|+\rangle} = \langle\phi_+|Z|\phi_+\rangle$$

$$= a\langle\phi_+|\phi_-\rangle = 0$$

0,5

*) pour l'écart quadratique

on a $\Delta Z^2 = \langle Z^2\rangle - \langle Z\rangle^2$

or $\langle Z^2\rangle = \langle\phi_+|Z^2|\phi_+\rangle = \langle\phi_+|Z.Z|\phi_+\rangle$

$$= a\langle\phi_+|Z|\phi_-\rangle$$

$$= a^2\langle\phi_+|\phi_+\rangle$$

donc $\Delta Z = \sqrt{a^2 - 0^2} = \boxed{a = \Delta Z}$

0,5

ⓑ les valeurs propres z_i $(i = 1, 2)$ de l'observable Z :

on a $\det(\hat{Z} - \lambda \mathbb{1}_{2\times 2}) = \begin{vmatrix} -\lambda & a \\ a & -\lambda \end{vmatrix} = 0$

$\Leftrightarrow \lambda^2 - a^2 = 0 \longrightarrow \lambda = \pm a$

donc $\boxed{z_1 = -a < z_2 = +a}$ les deux valeurs propres demandées.

~~1~~,5

© Soit $|z_1\rangle$ et $|z_2\rangle$ les deux $\vec{V}_p$ associés à z_1, et z_2 resp. cherchons les expressions de $|z_1\rangle$ et $|z_2\rangle$:

*) pour $|z_1\rangle$

Soit $|z_1\rangle = \alpha|\phi_-\rangle + \beta|\phi_+\rangle$

donc $z_1 = -a$ est une $V_p \rightsquigarrow \vec{V}_p : |z_1\rangle$ cela donne :

$$\hat{Z}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = -a\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$ et pour la norme $\alpha^2+\beta^2 = 1$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}0 & a\\ a & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = -a\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$ et $\alpha^2+\beta^2 = 1$

$$\Rightarrow \begin{cases} a\beta = -a\alpha \\ a\alpha = -a\beta \\ \alpha^2+\beta^2 = 1 \end{cases} \longrightarrow \beta = -\alpha \text{ et } \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$$

avec θ une phase qu'on prend égale à zero

Finalement $\boxed{|z_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_-\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_+\rangle}$ 0,5

*) pour $|z_2\rangle$

Soit $|z_2\rangle = \alpha|\phi_-\rangle + \beta|\phi_+\rangle$ avec $\alpha^2+\beta^2 = 1$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}0 & a\\ a & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = a\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \longrightarrow \beta = \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}$$

on trouve $\boxed{|z_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_+\rangle}$ 0,5

④ à $t=0$, la molécule est dans l'état $|z_2\rangle$.

donc $c_- = c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}$ d'après l'expression de $|z_2\rangle$.

et donc $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(e^{i\omega t} |\phi_-\rangle + e^{-i\omega t} |\phi_+\rangle \right)$

ⓐ <u>les probabilités P_i</u>

Ces probabilités se lisent à partir de l'expression du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ développé sur la base propre de Z, c-à-d : $\{|z_1\rangle, |z_2\rangle\}$

comme $|z_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_-\rangle - |\phi_+\rangle)$ et $|z_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_-\rangle + |\phi_+\rangle)$

$$\Rightarrow \begin{cases} |\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z_1\rangle + |z_2\rangle) \\ |\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|z_1\rangle + |z_2\rangle) \end{cases}$$

donc l'état $|\psi(t)\rangle$ exprimé dans $\{|z_1\rangle, |z_2\rangle\}$ s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2}} (|z_1\rangle + |z_2\rangle) + \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}} (-|z_1\rangle + |z_2\rangle) \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}} \left(i\sin(\omega t) |z_1\rangle + \cos(\omega t) |z_2\rangle \right)}$$ 0,5

donc $P_1(z=z_1) = P_1(z=-a) = |\langle z_1 | \psi(t)\rangle|^2$

$= |e^{-i\frac{E_0}{\hbar}}|^2 \cdot |i\sin(\omega t)|^2$

$= \sin^2(\omega t)$ 0,5

et $P_2(z=z_2) = P_2(z=+a) = \cos^2(\omega t)$. 0,5

ⓑ On trouvera $z_1 = -a$ avec certitude si on fait la mesure à un instant $t = t_n = \frac{(n+\frac{1}{2})\pi}{\omega}$ (comme ça $\sin^2(\omega t_n) = 1$)

0,5 de $\hat{n}$, on trouvera $z_2 = +a$ avec certitude si on fait la mesure à un instant $t = t'_n = \frac{n\pi}{\omega} = t_n - \frac{\pi}{2\omega}$ $(\cos^2(\omega t'_n) = 1)$. 10