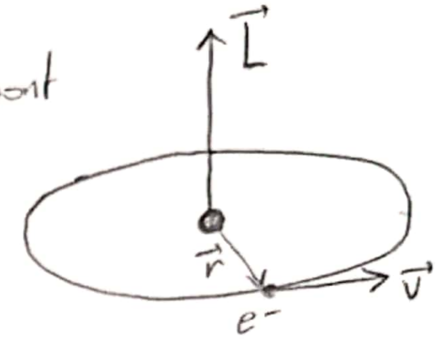
Examen de MQ-I – Session de Rattrapage

20 Juin 2022

Corrigé.

Questions de cours (6pts)

1. Hypothèses de Bohr pour expliquer le spectre de l'atome d'Hydrogène :

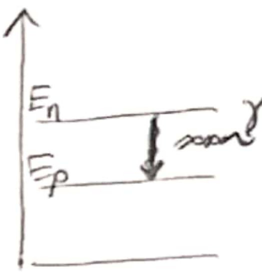


i) les seules orbites permises pour l'é sont celles pour lesquelles le moment cinétique (ou moment angulaire)

0,5

$\|\vec{L}\| = n\hbar$ avec $n \geq 1$ et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$\longrightarrow$ quantification du moment cinétique.



ii) L'é rayonne de l'énergie seulement lorsqu'il saute d'une orbite caractérisée par une énergie E_n à une autre orbite d'énergie E_p plus petite, la fréquence d'émission $\nu(n \to p)$ est telle que $h\nu_{n \to p} = E_n - E_p$.

0,5

2. L'énergie, dans le modèle de Bohr s'écrit :

$$E_n = \frac{Z^2 . E_I}{n^2}$$

a) pour l'é de l'ion Li^{2+} dans son état fondamental

$$E_f = E_{n=1} = \frac{Z^2 . E_I}{1^2} = -\frac{3^2(13,6)}{1^2} = -122,4 \text{ eV}$$

1

dans le premier état excité

$$E_{ex} = E_{n=2} = \frac{Z^2 . E_I}{2^2} = -\frac{3^2(13,6)}{2^2} = -30,6 \text{ eV}$$

b) La longueur d'onde (en Å) mise en jeu.

on sait que $h\nu_{2\to1} = E_{ex} - E_f = \Delta E$

avec $h\nu_{2\to1} = \frac{hc}{\lambda}$

donc $\boxed{\lambda = \frac{hc}{\Delta E}}$ AN : $\lambda = \frac{12400 \text{ eV}.\text{Å}}{(-30{,}6 + 122{,}4)\text{eV}}$

0,5

$\boxed{\lambda \cong 135 \text{ Å}}$

3. Équation de Schrödinger dépendante du temps

0,5 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$

4. Soient : X : opérateur multiplication par x.
D_x : " dérivation par rapport à x.

pour une fonction $f(x)$. On a :

$$[X, D_x] f(x) = (X D_x) f(x) - (D_x X) f(x)$$

$$= (X) \frac{d}{dx} f(x) - (D_x)\, x f(x)$$

1

$$= x \frac{df(x)}{dx} - \frac{d}{dx}\left(x f(x)\right)$$

$$= x \frac{df(x)}{dx} - f(x) - x \frac{df(x)}{dx}$$

$$= - f(x)$$

Il s'en suit que $\boxed{[X, D_x] = -\mathbb{1}}$

5. * Soient C et D deux observables qui commutent.
* Soient $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ deux kets $\sim C$ avec deux Vp
$\lambda_1 \neq \lambda_2$

on a : $[C, D] = 0 \iff \langle \varphi_1 | [C, D] | \varphi_2 \rangle = 0$

$\iff \langle \varphi_1 | CD - DC | \varphi_2 \rangle = 0$

avec $C | \varphi_2 \rangle = \lambda_2 | \varphi_2 \rangle$ 1

$\langle \varphi_1 | C = \lambda_1 \langle \varphi_1 |$

donc $\langle \varphi_1 | CD - DC | \varphi_2 \rangle = 0$

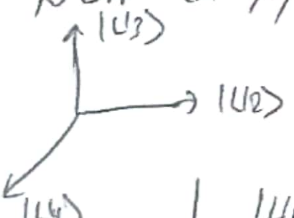
$\iff \lambda_1 \langle \varphi_1 | D | \varphi_2 \rangle - \lambda_2 \langle \varphi_1 | D | \varphi_2 \rangle = 0$

$\iff (\lambda_1 - \lambda_2) \langle \varphi_1 | D | \varphi_2 \rangle = 0$

or $\lambda_1 \neq \lambda_2 \longrightarrow \boxed{\langle \varphi_1 | D | \varphi_2 \rangle = 0}$

Problème (14 pts)

Soit un système physique dont l'espace à 3 dim est $\rightsquigarrow$



et deux opérateurs L_x, L_y sont définis par :

$L_x |u_1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$

$L_x |u_2\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (|u_1\rangle + |u_3\rangle)$

$L_x |u_3\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$

$L_y |u_1\rangle = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$

$L_y |u_2\rangle = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} (|u_1\rangle - |u_3\rangle)$

$L_y |u_3\rangle = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$

1) a) matrices $\rightsquigarrow$ L_x et L_y dans la base $B = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$.

$$\hat{L}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{L}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

0,5 0,5

b) Les opérateurs L_x et L_y sont hermitiques ?

A est hermitique $\Longrightarrow$

$A^+ = A$ soit $(A^+)_{nm} \equiv (A)^*_{mn} = (A)_{nm}$

ceci étant réalisé pour les matrices $\hat{L}_x$ et $\hat{L}_y$

$\Rightarrow$ L_x et L_y sont alors hermitique. 0,5

c) Déduction :

On a l'hamiltonien du système est donné par :

$$H = \frac{\omega}{\hbar}\left(L_x^2 - L_y^2\right)$$

avec

$$\hat{L}_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_y^2 = -\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

donc

$$\hat{H} \equiv \frac{\omega}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}\right]$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} \equiv \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \hbar\omega\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1

ou bien

$H|u_1\rangle = \hbar\omega|u_3\rangle$, $H|u_2\rangle = 0$, $H|u_3\rangle = \hbar\omega|u_1\rangle$

d) les valeurs propres E_k et vecteurs propres $|\varphi_k\rangle$ du système

équation caractéristique : $\det(\hat{H} - \lambda I_{3\times3}) = 0$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & \hbar\omega \\ 0 & -\lambda & 0 \\ \hbar\omega & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{vmatrix} + \hbar\omega \begin{vmatrix} 0 & -\lambda \\ \hbar\omega & 0 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow -\lambda^3 + \hbar\omega(\lambda\hbar\omega) = 0 \Rightarrow -\lambda^3 + \lambda(\hbar\omega)^2 = 0$$

donc $\lambda(\lambda^2 - (\hbar\omega)^2) = 0 \Rightarrow \lambda = 0, \hbar\omega, -\hbar\omega$

les energies du syst sont donc :

$$E_1 = 0 \quad , \quad E_2 = \hbar\omega \quad , \quad E_3 = -\hbar\omega$$

0,25 0,25 0,25

à E_k est associé le ket propre $|\varphi_k\rangle = a_k|u_1\rangle + b_k|u_2\rangle + c_k|u_3\rangle$

avec $k = 1, 2, 3$

*) pour $k = 1$: $E_1 = 0$

on a $H|\varphi_1\rangle = 0|\varphi_1\rangle$ or $H|u_2\rangle = 0$

$\rightarrow a_1 = c_1 = 0$

or $\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = 1 \Rightarrow |b_1|^2 = 1 \rightarrow b_1 = e^{i\alpha_1}$

donc $\boxed{|\varphi_1\rangle = |u_2\rangle}$ à un facteur près. 0,5

*) pour $k = 2$ $E_2 = \hbar\omega$

on a $H|\varphi_2\rangle = \hbar\omega|\varphi_2\rangle$

$$\Leftrightarrow \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} c_2 = a_2 \\ 0 = b_2 \\ a_2 = c_2 \end{cases}$$

avec $\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = 1 = |a_2|^2 + |b_2|^2 + |c_2|^2 \Rightarrow 2|a_2|^2 = 1$

donc $a_2 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_2}$

par suite $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1\rangle + |u_3\rangle\right)$ à un facteur près. 0,5

*) pour $k=3$: $E_3 = -\hbar\omega$

on a $H|\varphi_3\rangle = -\hbar\omega|\varphi_3\rangle$

$$\Leftrightarrow \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{pmatrix} = -\hbar\omega \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{cases} c_3 = -a_3 \\ 0 = b_3 \\ a_3 = -c_3 \end{cases}$$

comme $\langle\varphi_3|\varphi_3\rangle = 1 \longrightarrow a_3 = -c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i K_3}$

et donc :

$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1\rangle - |u_3\rangle\right)$$ à un facteur de phase global près. 0,5

2. Soit L'opérateur L_z représenté dans $\mathcal{B}$ par

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

on a L_z est représenté par $\hat{L}_z$ qui est une matrice diagonale donc les éléments diagonaux sont réels

L_z est hermitique ⊕ 0,75

les kets propres de L_z sont les $|u_k\rangle$ de la base $\Longrightarrow$

L_z est observable.

Rq : Vp de L_z ; $\underbrace{+\hbar,\ 0,\ -\hbar}_{V_p} \rightarrow$ rep. à $\underbrace{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle}_{\vec{V}_p}$

3. À $t=0$: $|\psi(t=0)\rangle \equiv |\psi(0)\rangle = |u_1\rangle$

ⓐ on mesure la grandeur physique $L_z \longrightarrow$ à $\hat{L}_z$.

De manière générale, la mesure de L_z donne l'une des valeurs propres de $\hat{L}_z$, c-à-d : $+\hbar$, 0, ou $-\hbar$. 0,5

Ici le système se trouve initialement dans $|u_1\rangle$, ket propre de L_z associé à la valeur propre $+\hbar$; on a alors

$$P_0(+\hbar) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 = |\underbrace{\langle u_1|u_1\rangle}_{=1}|^2 = 1 . \quad 0{,}75$$

donc la valeur $+\hbar$ est <u>certaine</u> (on la mesure avec certitude)

ou bien

$$\left.\begin{aligned} P_0(-\hbar) &= |\langle u_3|\psi(0)\rangle|^2 = |\langle u_3|u_1\rangle|^2 = 0 \\ P_0(0) &= |\langle u_2|\psi(0)\rangle|^2 = |\langle u_2|u_1\rangle|^2 = 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{P_0(-\hbar) = P_0(0) = 0}$$

b) <u>On suppose qu'on mesure l'observable L_z^2</u>

on a $(L_z^2) = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$\rightarrow$ vp sont $\begin{cases} \hbar^2 \nearrow |u_1\rangle, |u_3\rangle & \text{dégénérée deux fois} \\ 0 \nearrow |u_2\rangle & \text{simple.} \end{cases}$

donc

$$P(+\hbar^2) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle u_3|\psi(0)\rangle|^2$$
$$= |\langle u_1|u_1\rangle|^2 + |\langle u_3|u_1\rangle|^2 = 1 \quad 0{,}75$$

donc la mesure de $+\hbar^2$ se fait avec certitude.

c) <u>État du système juste après la mesure</u>

cet état sera :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_{\hbar^2}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_{\hbar^2}|\psi\rangle}}$$

$P_{\hbar^2}$ est le projecteur sur le sous-espace associé à la valeur propre $\hbar^2$ engendré par les vecteurs propres $|u_1\rangle$ et $|u_3\rangle$

2)

Donc $P_{\hbar^2} = |u_1\rangle\langle u_1| + |u_3\rangle\langle u_3|$

ainsi :

$$P_{\hbar^2}|\psi\rangle = \left(|u_1\rangle\langle u_1| + |u_3\rangle\langle u_3|\right)|u_1\rangle = |u_1\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\psi|P_{\hbar^2}|\psi\rangle = \langle u_1|u_1\rangle = 1$$

D'où, l'état du système immédiatement après la mesure est :

$$|\psi'\rangle = \frac{|u_1\rangle}{\sqrt{1}} = |u_1\rangle = |\psi(0)\rangle$$ 1

4) a) L'expression de L'opérateur d'évolution $U(t,0)$:

L'hamiltonien H étant indépendant du temps, donc :

$$U(t,0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H.t\right)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\omega}{\hbar}(L_x^2 - L_y^2)} = \exp\left(-i\frac{\omega}{\hbar^2}(L_x^2 - L_y^2)\right)$$ 0,5

b) le ket $|\psi(t)\rangle$ décrivant le système à $t > 0$

le système étant conservatif $\longrightarrow$

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

avec $F(H) = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}t\right)$

sachant que :

$$H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle \longrightarrow F(H)|\varphi_k\rangle = F(E_k)|\varphi_k\rangle$$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_k c_k(0)|\varphi_k\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(0)F(H)|\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_k c_k(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle$$

Là, il faut noter que, plutôt décomposer l'état $|\psi(0)\rangle$ qui est $|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle$ dans la base propre du H ; c-à-d :

$$\boxed{|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_3\rangle} \boxed{= 0|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_3\rangle}$$

donc

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{C_1(0)}_{=0} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} |\varphi_1\rangle + \underbrace{C_2(0)}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} |\varphi_2\rangle + \underbrace{C_3(0)}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t} |\varphi_3\rangle$$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} |\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{+i\omega t} |\varphi_3\rangle}$$

0,75

*) Comme $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_3\rangle$, Il s'en suit qu'il y a pas un facteur de phase global entre $|\psi(0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi_t\rangle$ et $|\psi_{t=0}\rangle$ sont deux kets discernables.

0,25

ⓒ $|\psi(t)\rangle$ en fonction des kets $\{|u_k\rangle\}$

on a $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_3\rangle)$ et $|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_3\rangle)$ d'après ①-ⓐ. Or d'après ④-ⓑ on a :

$$|\psi(t)\rangle = c_2(t)|\varphi_2\rangle + c_3(t)|\varphi_3\rangle$$

avec $c_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t}$

et $c_3(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t} = c_2^*(t)$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{c_2(t)}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_3\rangle) + \frac{c_2^*(t)}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_3\rangle)$$

$$= \frac{(c_2(t) + c_2^*(t))}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{(c_2(t) - c_2^*(t))}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

or $c_2(t) + c_2^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \sqrt{2}\cos(\omega t)$

$c_2(t) - c_2^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}) = -i\sqrt{2}\sin(\omega t)$

Alors : $\boxed{|\psi(t)\rangle = \cos(\omega t)|u_1\rangle - i\sin(\omega t)|u_3\rangle}$ 1

* <u>Probabilités des ≠tes résultats de mesure de L_z :</u>

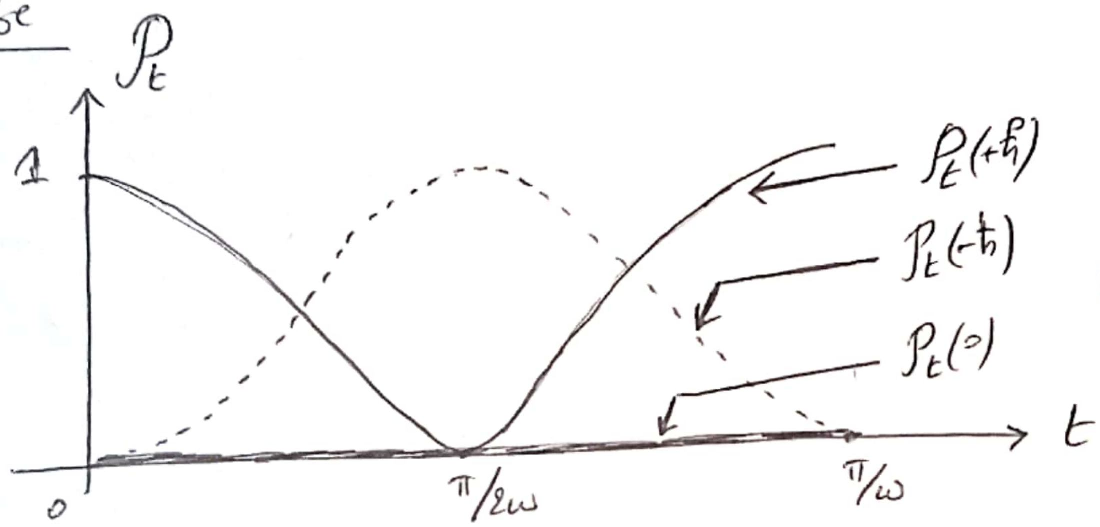
$$P_t(+\hbar) = |\langle u_1|\psi_t\rangle|^2 = \cos^2(\omega t) \,.\quad 0,5$$

$$P_t(0) = |\langle u_2|\psi_t\rangle|^2 = 0 \,.\quad 0,5$$

$$P_t(-\hbar) = |\langle u_3|\psi_t\rangle|^2 = \sin^2(\omega t) \,.\quad 0,5$$

on vérifie bien que $\sum P = 1$

Courbe



1

$P_t(0)$ étant nulle $\forall t$
$P_t(-\hbar)$ varie en sens inverse de $P_t(+\hbar)$ de telle sorte qu'à un instant donné on a $P_t(+\hbar) + P_t(-\hbar) = 1$.
En particulier $P(+\hbar)$ est minimale quand $P(-\hbar)$ est maximale et inversement.

d) <u>Calcul des valeurs $\langle L_u\rangle_t$, $(u = x, y, z)$ dans l'état $|\psi_t\rangle$.</u>

par définition $\langle L_u\rangle_t = \langle\psi_t|L_u|\psi_t\rangle$

dans la base $B = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$:

$$|\psi_t\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ 0 \\ -i\sin(\omega t) \end{pmatrix} \Longrightarrow \langle\psi_t| = \left(\cos(\omega t) \,,\, 0 \,,\, i\sin(\omega t)\right)$$

par exemple, pour $u = z$:

$$\langle L_z \rangle_t = \hbar \begin{pmatrix} \cos(\omega t), & 0, & i\sin(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ 0 \\ -i\sin(\omega t) \end{pmatrix}$$

$$= \hbar \begin{pmatrix} \cos(\omega t), & 0, & i\sin(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ 0 \\ i\sin(\omega t) \end{pmatrix}$$

$$= \hbar \left(\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t) \right) \Longrightarrow \langle L_z \rangle_t = \hbar \cos(2\omega t)$$

1

même raisonnement pour $u = x$ et $u = y$

on trouve

$$\langle L_x \rangle_t = 0 \qquad \text{et} \qquad \langle L_y \rangle_t = 0$$

Interprétation :

le vecteur $\langle \vec{L} \rangle_t = \langle L_x \rangle_t \vec{e}_x + \langle L_y \rangle_t \vec{e}_y + \langle L_z \rangle_t \vec{e}_z = \langle L_z \rangle_t \vec{e}_z$ varie en module mais garde une direction fixe, celle de $\vec{e}_z$. donc $\langle \vec{L} \rangle_t$ vibre en permanence, le long de oz, avec la fréquence $\omega/2\pi$.

0,5