

T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Série N°4

Exercice 1: Postulats de la mesure

On considère un système physique S dont l'espace des états, à trois dimensions, est rapporté à la base orthonormée complète formée par les trois kets $\mathcal{B} = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. On considère l'énergie totale et deux autres grandeurs physiques A et B associées au système. Les observables quantiques associées à ces grandeurs sont respectivement l'hamiltonien H et les deux observables A et B . Elles sont définies par leurs actions sur les vecteurs de la base :

$$\begin{aligned} H|u_1\rangle &= \hbar\omega|u_1\rangle, & H|u_2\rangle &= 2\hbar\omega|u_2\rangle, & H|u_3\rangle &= \hbar\omega|u_3\rangle \\ A|u_1\rangle &= a|u_1\rangle, & A|u_2\rangle &= a|u_3\rangle, & A|u_3\rangle &= a|u_2\rangle \\ B|u_1\rangle &= b|u_2\rangle, & B|u_2\rangle &= b|u_1\rangle, & B|u_3\rangle &= b|u_3\rangle. \end{aligned}$$

où : a , b et ω_0 sont des constantes réelles positives. À l'instant $t = 0$, le système est dans l'état initial :

$$|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

- 1) Donner l'expression normalisée du vecteur $|\psi(0)\rangle$.
- 2) Écrire les matrices représentant les observables H , A et B dans la base \mathcal{B} .
- 3) On mesure, à l'instant $t = 0$, l'énergie du système.
 - a) Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
 - b) Calculer la valeur moyenne de l'énergie $\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0) | A | \psi(0) \rangle$.
 - c) Calculer l'écart quadratique moyen ΔH
- 4) Au lieu de mesurer l'énergie du système à l'instant $t = 0$, on mesure la grandeur A .
 - a) Quelles résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
 - b) Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?
- 5) Exprimer le vecteur d'état $\psi(t)$ du système à l'instant t .
- 6) Calculer les valeurs moyennes $\langle A \rangle_t$ et $\langle B \rangle_t$ des observables A et B à l'instant t . Conclure.
- 7) Quels résultats obtient-on si l'on mesure à l'instant t l'observable A ? Même question pour l'observable B . Interprétation.

Exercice 2: Éléments de matrice - Évolution de la Position et de l'Impulsion d'un système

Soit H l'opérateur hamiltonien d'un système physique. On désigne par $|\phi_n\rangle$ les vecteurs propres de H , de valeurs propres E_n : $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$.

- 1) A étant un opérateur quelconque, démontrer la relation : $\langle \phi_n | [A, H] | \phi_n \rangle = 0$.
- 2) On considère un problème à une dimension, où le système physique est une particule de masse m , et d'énergie potentielle $V(X)$; dans ce cas, H s'écrit : $H = \frac{1}{2m}P_x^2 + V(X)$
 - a) Calculer en fonction de P_x , X , $V(X)$ les commutateurs : $[H, P_x]$, $[H, X]$ et $[H, XP_x]$.
 - b) Montrer que l'élément de matrice $\langle \phi_n | P_x | \phi_n \rangle = 0$.
 - c) Établir une relation entre les deux éléments de matrice : $\langle \phi_n | \frac{P_x^2}{2m} | \phi_n \rangle$ et $\langle \phi_n | X \frac{dV}{dX} | \phi_n \rangle$
 - d) On considère que $V(X) = V_0 X^k$ où $k = 2, 4, 6 \dots$ et $V_0 > 0$, Trouver la relation entre :

$$\langle T \rangle = \langle \phi_n | \frac{P_x^2}{2m} | \phi_n \rangle \quad \text{et} \quad \langle V \rangle = \langle \phi_n | V(X) | \phi_n \rangle$$

- 3) On se place dans le cas particulier : $k = 2$ et on suppose que l'état de la particule est décrit à un instant t donné, par un ket $|\Psi\rangle_t$ quelconque.



- a) En utilisant un résultat du cours que l'on précisera, relier

$$\frac{d\langle X \rangle_t}{dt} \text{ à } \langle P_x \rangle_t \quad \text{ET} \quad \frac{d\langle P_x \rangle_t}{dt} \text{ à } \langle X \rangle_t$$

On définit $\omega^2 = 2V_0/m$ (où ω est une constante ayant les dimensions d'une pulsation).

- b) En déduire

$$\frac{d^2\langle X \rangle_t}{dt^2} \quad \text{ET} \quad \frac{d^2\langle P_x \rangle_t}{dt^2}$$

- c) Intégrer les équations obtenues pour avoir les lois de variation au cours du temps de $\langle X \rangle_t$ et $\langle P_x \rangle_t$, sachant qu'à l'instant $t = 0$, l'état de la particule est décrit par un ket $|\Psi\rangle_0$ pour lequel : $\langle X \rangle_{t=0} = x_0$ et $\langle P_x \rangle_{t=0} = p_0$.

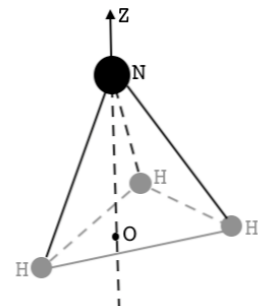
- d) Que se passera-t-il si $|\Psi\rangle_0 = |\phi_n\rangle$.

Exercice 3: Molécule d'Ammoniac (facultatif)

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} :

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



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{H} représentant H dans la base $\{|\phi_{-}\rangle, |\phi_{+}\rangle\}$.
2. À $t = 0$, l'état de la molécule est :

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

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 :

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

- 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 \mathcal{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 ?

