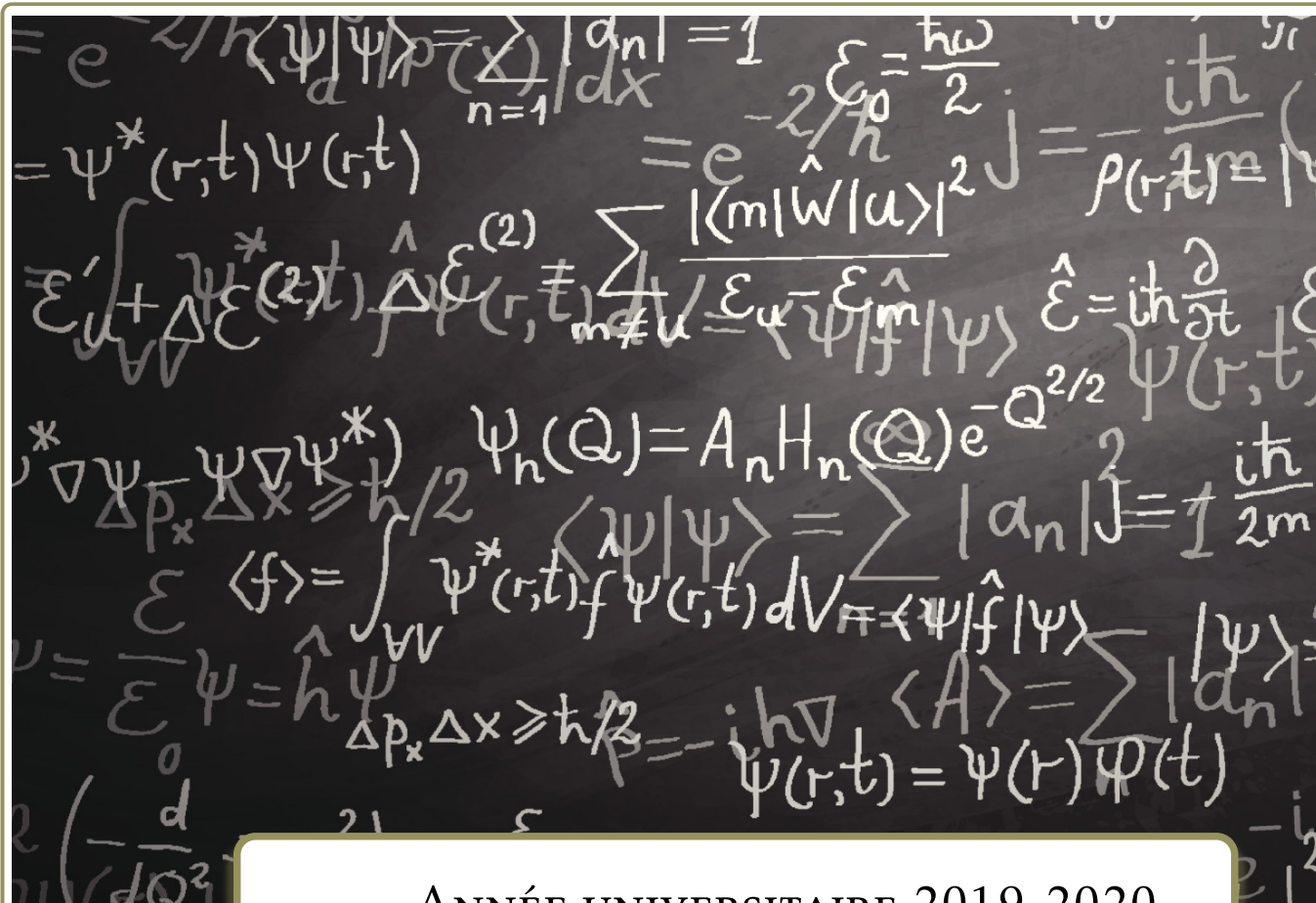


Problèmes et Exercices résolus de Mécanique

Quantique : SMP4

Prof. Mohamed GOUIGHRI



ANNÉE UNIVERSITAIRE 2019-2020

\hbar
 λ
 c
 ω
 i

Partie A - Caractère corpusculaire de la lumière

I. Rayonnement du corps noir

Le champ électromagnétique à l'intérieur d'une cavité fermée est équivalent à un ensemble dénombrable d'oscillateurs harmoniques linéaires et indépendants. L'énergie du champ est donc égale à l'énergie de ces oscillateurs.

On définit la densité d'énergie $u(\nu, T)$ comme :

$$u(\nu, T) = \rho(\nu) \langle E \rangle$$

où $\rho(\nu)$ est le nombre des oscillateurs par unité de volume, $\langle E \rangle$ est l'énergie moyenne de chaque oscillateur, ν est la fréquence et T la température absolue.

1. Dans la théorie de l'électromagnétisme classique, l'énergie E d'un oscillateur varie de façon continue et on montre que le nombre d'oscillateurs dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$ est donnée par :

$$dN = P(E) dE = a e^{-E/kT} dE$$

où k est la constante de Boltzmann et $P(E)$ la probabilité associée à l'énergie E .

a. Sachant que $\rho(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$, établir l'expression de $u(\nu, T)$.

b. On définit $u(T)$ comme : $u(T) = \int_0^\infty u(\nu, T) d\nu$.

Quelle est la signification de $u(T)$? En donner l'expression et conclure.

2. Dans le cadre de l'hypothèse de Planck : les échanges d'énergie entre la matière du corps noir et le rayonnement électromagnétique se font par paquets d'énergie égale à $\varepsilon = h\nu$ (quantum d'énergie), h étant la constante de Planck.

L'énergie (continue) des oscillateurs s'écrit alors sous la forme suivante :

$$E_n = nh\nu, n \in \mathbb{N}$$

a. Montrer que :

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

b. En déduire la nouvelle expression de $u(T)$. Conclure.

On donne :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \alpha^n = \frac{1}{1-\alpha} \quad \text{si } \alpha < 1 \quad ; \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

II. Effet photoélectrique

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

On éclaire la cathode d'une cellule photoélectrique avec deux radiations monochromatiques de longueurs d'ondes dans le vide $\lambda_1 = 0,2537 \mu m$ et $\lambda_2 = 0,5890 \mu m$. Les énergies maximales des électrons éjectés par ces radiations sont respectivement $E_1 = 3,14 eV$ et $E_2 = 0,36 eV$.

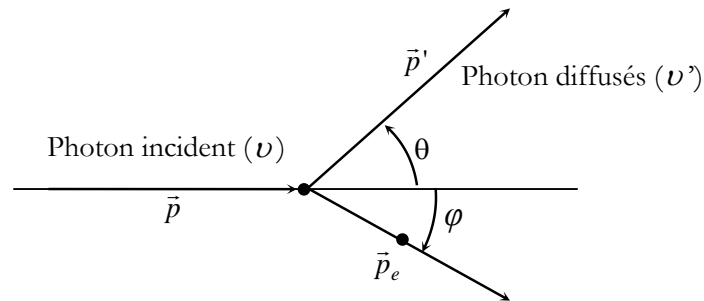
Déduire une estimation expérimentale de :

1. La constante de Planck ;
2. L'énergie minimale d'extraction des électrons ;
3. La longueur d'onde maximale produisant un effet photoélectrique sur cette photocathode.

III. Effet Compton

L'effet Compton consiste en l'interaction d'un photon d'énergie $h\nu$ avec un électron libre (son énergie est purement cinétique) ou faiblement lié. L'électron, de masse m , est supposé initialement au repos.

Après l'interaction, le photon d'énergie $h\nu'$ est émis dans la direction θ alors que l'électron est émis dans la direction φ . Ces angles sont comptés par rapport à la direction du photon incident.



Au cours de l'interaction, le photon cède une partie de son énergie et de son impulsion à l'électron qui acquiert une quantité de mouvement \vec{p} et une énergie E telle que $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$; c étant la vitesse de la lumière dans le vide.

En écrivant les lois de conservations, établir que :

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta)}$$

En déduire que :

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)$$

Partie B - Caractère ondulatoire de la matière

IV. Ondes de matière - Diffraction sur un cristal

On a réalisé des expériences de diffraction sur un cristal en utilisant divers types de particules :

1. Sachant que la distance interatomique d du cristal est de l'ordre de l'angström, quelle doit être la longueur d'onde des rayons X à utiliser ? Quelle est l'énergie des photons correspondant ?
2. On remplace le faisceau de rayons X par des neutrons. A la température T , leur énergie est donnée par $E = \frac{3}{2} k_B T$.

Calculer la longueur d'onde λ de l'onde de matière associée aux neutrons ($T = 300K$).

Pourrait-on observer une figure de diffraction ?

3. On utilise à présent des électrons accélérés sous une tension U . Quel doit être l'ordre de grandeur de U pour réaliser l'expérience ?

Données : $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$; $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$; $m_n = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$; $m_e = 9 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$.

V. L'atome d'hydrogène

La fonction d'onde décrivant l'état fondamental de l'électron de l'atome d'hydrogène s'écrit, en coordonnées sphériques :

$$\psi(r) = C e^{-\frac{r}{a}}$$

où C est une constante réelle et positive et a est le rayon de l'orbite de Bohr : $a = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

1. Calculer la constante C .
2. Calculer la densité de probabilité de présence de l'électron et tracer son allure.
3. Calculer la probabilité de trouver l'électron entre les deux sphères de rayons r et $r + dr$.

Pour quelle valeur de r , cette probabilité est-elle maximale ?

VI. Paquet d'ondes gaussien (facultatif)

Une particule **libre** de masse m , d'impulsion $p = \hbar k$ et d'énergie E décrite par le paquet d'ondes $\psi(x, t)$ à une dimension :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

1. Trouver la relation entre E et k . En déduire la relation de dispersion $\omega(k)$.
2. On considère le paquet d'ondes à l'instant initial : $\psi(x, t = 0) = \psi(x)$.
 - a. Montrer que $g(k)$ n'est autre que la transformée de Fourier de $\psi(x)$.
 - b. Etablir l'égalité de Parseval Plancherel :

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$$

On suppose par la suite que la fonction $g(k)$ est une gaussienne centrée en k_0 :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{a^2}{4} (k - k_0)^2 \right)$$

où a est une constante ayant la dimension d'une longueur.

3. Paquet d'ondes à l'instant $t = 0$:

a. Montrer que $\psi(x, 0)$ est donnée par :

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x} \exp \left(\frac{-x^2}{a^2} \right)$$

On donne :

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha^2 y^2 + \beta y) dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right)$$

b. On définit le centre du paquet d'ondes par le point x_M où $|\psi(x, 0)|^2$ est maximale ; donner la position du centre du paquet d'ondes $\psi(x, 0)$.

c. Montrer que la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est égale à 1.

d. On définit la largeur Δy d'une gaussienne $f(y) = \exp(-y^2/b^2)$ par $\Delta y = b/\sqrt{2}$.

Déterminer les largeurs $\Delta x(0)$ de $|\psi(x, 0)|^2$ et $\Delta k(0)$ de $|g(k)|^2$. En déduire que le paquet d'ondes $\psi(x, 0)$ obéit à la relation d'incertitude d'Heisenberg.

4. Evolution du paquet d'ondes $\psi(x, t)$ dans le temps :

A l'instant $t > 0$, l'expression du paquet d'ondes $\psi(x, t)$ est de la forme (à ne pas démontrer) :

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi} \right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi} \cdot e^{ik_0 x}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2} \right)^{1/4}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}} \right]$$

a. Calculer la densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$ associée à la particule à l'instant t .

b. Déterminer la position $x_M(t)$ du centre du paquet d'ondes à l'instant t . Quelle est sa vitesse de déplacement ? La comparer à la vitesse de groupe associée au paquet.

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

c. Déterminer la largeur $\Delta x(t)$ et l'amplitude $A(t)$ de $|\psi(x,t)|^2$. Décrire qualitativement la variation de ces deux grandeurs en fonction du temps. Conclure quant à l'évolution de la forme de la densité de probabilité au cours du temps.

Corrigé :

Partie A - Caractère corpusculaire de la lumière

I. Rayonnement du corps noir

1. a. Calcul de l'énergie moyenne d'un oscillateur $\langle E \rangle$:

Par définition, on a :

$$\langle E \rangle = \int_0^{+\infty} E dN$$

Or, le nombre d'oscillateurs dN dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$ est donnée par :

$$dN = P(E) dE = a e^{-E/kT} dE$$

Donc :

$$\langle E \rangle = \int_0^{+\infty} E dN = \int_0^{+\infty} E P(E) dE = a \int_0^{+\infty} E e^{-E/kT} dE = a \int_0^{+\infty} E e^{-\beta E} dE \quad ; \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

En intégrant par partie, on obtient :

$$\langle E \rangle = a \left[-E \frac{e^{-\beta E}}{\beta} \right]_0^{+\infty} + \frac{a}{\beta} \int_0^{+\infty} e^{-\beta E} dE = 0 + \frac{1}{\beta} \int_0^{+\infty} P(E) dE$$

Or : $\int_0^{+\infty} P(E) dE = 1$ (probabilité totale), donc :

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\beta} = kT$$

La densité spectrale d'énergie est définie par :

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$$

L'expérience montre que cette formule n'est valable que pour les faibles valeurs de la fréquence.

b. La quantité $u(T)$ définie par $u(T) = \int_0^{\infty} u(\nu, T) d\nu$ représente l'énergie totale disponible dans l'enceinte à la température T .

Cette quantité diverge ce qui est physiquement absurde :

$$u(T) = \int_0^{\infty} u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu \rightarrow +\infty$$

Cela traduit l'insuffisance de la théorie classique de l'électromagnétisme.

2. Hypothèse de Planck : *les échanges d'énergie entre la matière du corps noir et le rayonnement électromagnétique se font par paquets d'énergie égale à $\varepsilon = h\nu$ (quantum d'énergie), h étant la constante de Planck.*

L'énergie (continue) des oscillateurs s'écrit alors sous la forme suivante :

$$E_n = n h \nu, n \in \mathbb{N}$$

a. Calcul de l'énergie moyenne d'un oscillateur $\langle E \rangle$ dans le cadre de cette hypothèse :

La probabilité d'occupation du niveau d'énergie E_n est $P(E_n) = a e^{-E_n/kT}$; l'expression de l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ s'écrit alors :

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n \cdot P(E_n) = \sum_n a E_n e^{-\beta E_n} = \sum_n a n h \nu e^{-\beta n h \nu} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Or :

$$\sum_n P(E_n) = \sum_n a e^{-\beta E_n} = 1 \Rightarrow a = \frac{1}{\sum_n e^{-\beta n h \nu}}$$

Donc :

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n n h \nu e^{-\beta n h \nu}}{\sum_n e^{-\beta n h \nu}} = \frac{N}{D}$$

Or

$$D = \sum_n e^{-\beta n h \nu} = \sum_n (e^{-\beta h \nu})^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta h \nu}}$$

et

$$\frac{dD}{d\beta} = \sum_n \frac{d}{d\beta} (e^{-\beta n h \nu}) = - \sum_n n h \nu e^{-\beta n h \nu} = -N$$

Donc :

$$\langle E \rangle = - \frac{1}{D} \frac{dD}{d\beta} = - \frac{d \ln D}{d\beta} = \frac{d}{d\beta} \ln(1 - e^{-\beta h \nu}) = \frac{h \nu e^{-\beta h \nu}}{1 - e^{-\beta h \nu}} = \frac{h \nu}{e^{\beta h \nu} - 1}$$

Soit :

$$\langle E \rangle = \frac{h \nu}{e^{h \nu / kT} - 1}$$

b. La densité d'énergie :

$$u(\nu, T) = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} \langle E \rangle = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} \frac{h \nu}{e^{h \nu / kT} - 1} = \frac{8 \pi}{c^3} \frac{h \nu^3}{e^{h \nu / kT} - 1}$$

- L'énergie totale :

$$u(T) = \int_0^\infty u(\nu, T) d\nu = \frac{8 \pi}{c^3} \int_0^\infty \frac{h \nu^3}{e^{h \nu / kT} - 1} d\nu = \frac{8 \pi k^4 T^4}{h^3 c^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad ; \quad x = \frac{h \nu}{kT}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Sachant que $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$, on obtient la loi de Stefan : $u(T) = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c^3} T^4 = \alpha T^4$

II. Effet photoélectrique

1. Calcul de la constante de Planck :

L'énergie du photon incident est égale à l'énergie d'extraction du métal + l'énergie cinétique de l'électron éjecté :

$$h\nu = W + E_c$$

Ainsi, pour les deux radiations utilisées, on a :

$$\left. \begin{aligned} h\nu_1 &= \frac{hc}{\lambda_1} = W + E_1 \\ h\nu_2 &= \frac{hc}{\lambda_2} = W + E_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow E_1 - E_2 = hc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) \Rightarrow h = \frac{E_1 - E_2}{c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)}$$

A. N.

$$h = \frac{(3,14 - 0,36) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{3 \cdot 10^8 \left(\frac{1}{2537} - \frac{1}{5890} \right) \cdot 10^{10}} = 6,607 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$$

2. L'énergie minimale d'extraction des électrons :

$$W = \frac{hc}{\lambda_1} - E_1 = \frac{hc}{\lambda_2} - E_2$$

A. N.

$$W = \frac{hc}{\lambda_1} - E_1 = \frac{6,607 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{2537 \cdot 10^{-10}} - 3,14 = 1,74 \text{ eV}$$

3. La longueur d'onde maximale produisant un effet photoélectrique sur cette photocathode :

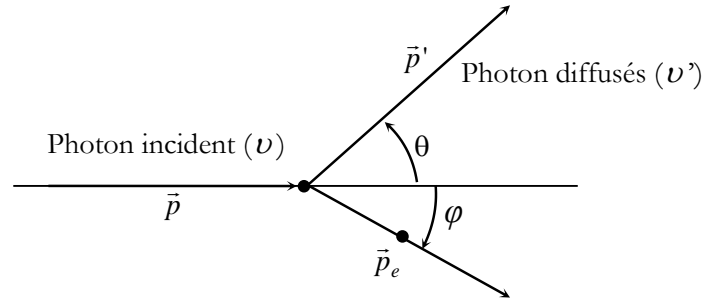
L'énergie minimale du photon incident est celle qui suffit à extraire les électrons du métal sans énergie cinétique :

$$h\nu_0 = W = \frac{hc}{\lambda_{\max}} \Rightarrow \lambda_{\max} = \frac{hc}{W}$$

A. N.

$$\lambda_{\max} = \frac{6,607 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,74 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,712 \text{ } \mu\text{m}$$

III. Effet Compton



Avant le choc

Après le choc

- Photon :

$$\text{Energie : } h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\text{Impulsion : } \vec{p} = \hbar \vec{k} ; p = \frac{h}{\lambda}$$

- Photon :

$$\text{Energie : } h\nu' = \frac{hc}{\lambda'}$$

$$\text{Impulsion : } \vec{p}' = \hbar \vec{k}' ; p' = \frac{h}{\lambda'}$$

- Electron (au repos) :

$$\text{Energie : } E_0 = mc^2$$

$$\text{Impulsion : } \vec{0}$$

- Electron :

$$\text{Energie : } E = \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}$$

$$\text{Impulsion : } \vec{p}_e$$

- Conservation de l'énergie totale :

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + E \Rightarrow h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (1)$$

Donc :

$$\begin{aligned} E^2 &= p_e^2 c^2 + m^2 c^4 = [h\nu - h\nu' + mc^2]^2 \\ &= (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu') + 2(h\nu - h\nu')mc^2 + m^2 c^4 \\ \Rightarrow p_e^2 c^2 &= (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu') + 2(h\nu - h\nu')mc^2 \quad (2) \end{aligned}$$

- Conservation de l'impulsion :

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \Rightarrow \vec{p}_e = \vec{p} - \vec{p}' \quad (3)$$

L'angle de diffusion θ est l'angle que fait \vec{p}' avec \vec{p} . En élevant au carré la relation (3), on a :

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta \quad (4)$$

Or, l'impulsion du photon est donnée par :

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad \text{et} \quad p' = \frac{h\nu'}{c}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

L'équation (4) devient :

$$p_e^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\left(\frac{h\nu}{c}\right)\left(\frac{h\nu'}{c}\right)\cos\theta$$

$$\Rightarrow p_e^2 c^2 = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\theta \quad (5)$$

Les équations (2) et (5) impliquent :

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu') + 2(h\nu - h\nu')mc^2 = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\theta$$

$$\Rightarrow (h\nu - h\nu') = (h\nu')\frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta) \quad (1) \Rightarrow h\nu = h\nu' \left[1 + \frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta) \right]$$

D'où :

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta)}$$

La relation (1) permet d'écrire :

$$(h\nu - h\nu')mc^2 = (h\nu)(h\nu')(1 - \cos\theta) \Rightarrow \frac{(\nu - \nu')c}{\nu\nu'} = \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)$$

$$\Rightarrow \Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)$$

Partie B - Caractère ondulatoire de la matière

IV. Ondes de matière - Diffraction sur un cristal

1. Rayons X :

- **Ordre de grandeur de la longueur d'onde des rayons X à utiliser :**

Pour que le phénomène de diffraction soit observable, il faut que la longueur d'ondes des rayons X utilisés soit du même ordre de grandeur que la distance inter réticulaire d , soit de l'ordre de 1°A . Donc, $\lambda \approx 1^\circ\text{A}$.

- **Energie des photons correspondant :**

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

A. N. : $E = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{10^{-10}} = 1,98 \cdot 10^{-15} \text{ J}$ ou bien $E = \frac{1,98 \cdot 10^{-15}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 12,4 \text{ KeV}$.

2. Neutrons thermiques :

- **Longueur d'onde associée aux neutrons :**

$$E_c = \frac{3}{2}k_B T = \frac{p^2}{2m_n} \Rightarrow p = \sqrt{3m_n k_B T} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m_n k_B T}}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

A. N. :
$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{3,1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}} \Rightarrow \lambda = 1,45 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,45 \text{ \AA}$$

Pourrait-on observer une figure de diffraction ?

On constate que la longueur d'onde associée aux neutrons est de même ordre de grandeur que la distance séparant les atomes du cristal ($\lambda \approx d$), ces neutrons seront diffractés par le cristal et donnés des figures de diffraction sur un écran.

3. Electrons accélérés sous une tension U :

Calculons la tension U permettant de réaliser des figures de diffraction, c'est-à-dire pour que la longueur d'onde associée aux électrons accélérés soit de l'ordre de $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$.

L'énergie cinétique E_c des électrons accélérés sous la tension U est :

$$E_c = eU = \frac{p^2}{2m_e} \quad \text{or} \quad \lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow U = \frac{1}{2m_e \cdot e} \left(\frac{h}{\lambda} \right)^2$$

A. N. :

$$U = \frac{1}{2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \left(\frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-10}} \right)^2 \Rightarrow U = 152 \text{ V}.$$

V. L'atome d'hydrogène

La fonction d'onde décrivant l'état fondamental de l'électron de l'atome d'hydrogène s'écrit :

$$\psi(r) = C e^{-\frac{r}{a}}$$

où C est une constante réelle et positive et a est le rayon de l'orbite de Bohr : $a = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

1. La constante de normalisation C :

La condition de normalisation de $\psi(x, t)$ s'écrit : $\iiint |\psi(r)|^2 d\tau = 1$

Or, l'élément de volume $d\tau$ pour une sphère dont le rayon r varie est : $d\tau = 4\pi r^2 dr$, donc :

$$\begin{aligned} 1 &= \iiint |\psi(r)|^2 d\tau = 4\pi |C|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr = 4\pi |C|^2 \underbrace{\left[\frac{-a}{2} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} \right]_0^{+\infty}}_{=0} + 4\pi a |C|^2 \int_0^{+\infty} r e^{-\frac{2r}{a}} dr \\ &= 4\pi a |C|^2 \underbrace{\left[\frac{-a}{2} r e^{-\frac{2r}{a}} \right]_0^{+\infty}}_{=0} + 4\pi \frac{a^2}{2} |C|^2 \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} dr = 4\pi \frac{a^2}{2} |C|^2 \underbrace{\left[\frac{-a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} \right]_0^{+\infty}}_{=a/2} = 4\pi \frac{a^3}{4} |C|^2 \end{aligned}$$

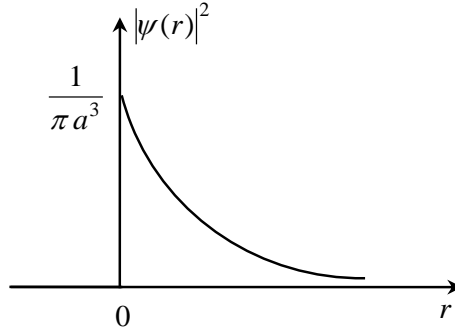
Comme la constante C est réelle et positive, alors :

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

2. Densité de probabilité de présence de l'électron :

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \quad \Rightarrow \quad |\psi(r)|^2 = \psi^*(r)\psi(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}$$

Allure de $|\psi(r)|^2$ en fonction de r :



La densité de probabilité est maximale pour $r = 0$, c'est-à-dire au centre de l'atome.

3. Probabilité de trouver l'électron entre les deux sphères de rayons r et $r + dr$:

$$d\wp = |\psi(r)|^2 dv = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} 4\pi r^2 dr \quad \Rightarrow \quad d\wp = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr$$

Pour quelle valeur de r , cette probabilité $d\wp$ est-elle maximale ?

Soit r_0 le rayon le plus probable, donc :

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{d\wp}{dr} \right)_{r_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{4}{a^3} \left(2r_0 - \frac{2r_0^2}{a} \right) e^{-\frac{2r_0}{a}} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_0 = a$$

Ainsi, le rayon le plus probable coïncide avec le rayon de l'orbite fondamentale (rayon de Bohr).

VI. Paquet d'ondes gaussien

Une particule libre de masse m , d'impulsion $p = \hbar k$ et d'énergie E décrite par le paquet d'ondes :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1)$$

1. Relation entre E et k :

La particule est libre, donc son énergie potentielle est une constante qu'on prendra égale à zéro.

La fonction d'onde $\psi(x, t)$ vérifie alors l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t)$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$$\begin{aligned} \circ \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) (-i\omega) e^{i(kx - \omega t)} dk \\ \circ \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) (-k^2) e^{i(kx - \omega t)} dk \end{aligned}$$

Donc :

$$i\hbar \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) (-i\omega) e^{i(kx - \omega t)} dk = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) (-k^2) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

D'où la relation de dispersion :

$$\hbar\omega = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

2. On considère le paquet d'ondes à l'instant initial :

$$\psi(x, t=0) = \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk \quad (2)$$

a. La transformée de Fourier de $\psi(x)$ est par définition :

$$f(k) = T F[\psi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x) e^{-ikx} dx$$

La transformée de Fourier inverse est :

$$\psi(x) = T F^{-1}[f(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(k) e^{ikx} dx$$

Par identification avec l'expression (2) de $\psi(x)$, on déduit que $g(k) = f(k) = T F[\psi(x)]$, ce qui montre que $g(k)$ est la transformée de Fourier de $\psi(x)$.

b. Egalité de Parseval Plancherel :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk \right) \psi^*(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi^*(x) e^{ikx} dx \right) g(k) dk \end{aligned}$$

Or :

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x) e^{-ikx} dx \Rightarrow g^*(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi^*(x) e^{ikx} dx$$

Donc :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) g^*(k) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

- $|\psi(x)|^2$ et $|g(k)|^2$ expriment la densité de probabilité de la particule respectivement dans l'espace des positions et l'espace des vecteurs d'onde (ou d'impulsions puisque $p = \hbar k$) ;
- $|\psi(x)|^2 dx$ est la probabilité de trouver la position de la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$;
- $|g(k)|^2 dk$ est la probabilité de trouver le vecteur d'onde dans l'intervalle $[k, k + dk]$;
- $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$ et $\int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$ représentent la probabilité totale de présence de la particule respectivement dans l'espace des positions et l'espace des impulsions.

On suppose par la suite que la fonction $g(k)$ est une gaussienne centrée en k_0 :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2\right)$$

où a est une constante ayant la dimension d'une longueur.

3. Paquet d'ondes à l'instant $t = 0$:

a. Expression de $\psi(x, 0)$:

Remplaçons $g(k)$ par son expression dans la relation (2) :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + i k x} dk$$

Posons : $y = k - k_0$, donc :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{i k_0 x} \int e^{-\frac{a^2}{4}y^2 + i y x} dy$$

Or :

$$\int e^{-\frac{a^2}{4}y^2 + i y x} dy = \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{\frac{(ix)^2}{a^2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{\frac{-x^2}{a^2}}$$

Donc :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{i k_0 x} e^{\frac{-x^2}{a^2}}$$

D'où l'expression du paquet d'onde à l'instant $t = 0$:

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{i k_0 x} \exp\left(\frac{-x^2}{a^2}\right)$$

b. Position x_M du centre du paquet d'ondes :

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Par définition le centre x_M du paquet d'ondes correspond au point où la densité de probabilité $|\psi(x, 0)|^2$ est maximale.

On a :

$$|\psi(x, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right)$$

Donc :

$$\frac{d}{dx} |\psi(x, 0)|^2 = -\frac{4}{a^2} x \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) = 0 \Rightarrow x_M = 0$$

Ainsi, à $t = 0$, le centre du paquet d'ondes est situé au point d'abscisse $x_M = 0$.

c. La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est définie par :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-2x^2}{a^2}} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi a^2}{2}} = 1$$

d. Détermination des largeurs $\Delta x(0)$ et $\Delta k(0)$:

Définition :

La largeur Δy d'une gaussienne $f(y) = \exp(-y^2/b^2)$ est donnée par $\Delta y = b/\sqrt{2}$.

Largeur $\Delta x(0)$ de $|\psi(x, 0)|^2$:

$$|\psi(x, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) \Rightarrow \Delta x(0) = \frac{a}{2}$$

Largeur $\Delta k(0)$ de $|g(k)|^2$:

$$|g(k)|^2 = \sqrt{\frac{a^2}{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}(k - k_0)^2\right) \Rightarrow \Delta k(0) = \frac{1}{a}$$

Relation de Heisenberg :

$$\Delta x(0) \cdot \Delta k(0) = \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta x(0) \cdot \Delta p(0) = \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation est conforme au principe d'indétermination de Heisenberg.

4. Evolution du paquet d'ondes $\psi(x, t)$ dans le temps :

L'expression du paquet d'ondes $\psi(x, t)$ à l'instant $t > 0$ est :

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi} \cdot e^{ik_0 x}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 + 2i\frac{\hbar}{m} t}\right]$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

a. La densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$ associée à la particule à l'instant t :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}}{\left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{1/2}} \exp\left(-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_o}{m}t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right)$$

b. Position $x_M(t)$ du centre du paquet d'ondes à l'instant t :

$$\frac{\partial}{\partial x} |\psi(x, t)|^2 = \alpha \left(x - \frac{\hbar k_o}{m}t\right) \exp\left(-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_o}{m}t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad x_M(t) = \frac{\hbar k_o}{m}t$$

Ainsi, à l'instant $t = 0$, le centre du paquet d'ondes est situé au point d'abscisse $x_M(t) = \frac{\hbar k_o}{m}t$.

La vitesse de déplacement du centre du paquet est :

$$v = \frac{\hbar k_o}{m}$$

Le mouvement du centre du paquet d'ondes est uniforme.

Comparaison avec la vitesse de groupe associée au paquet :

Par définition, la vitesse de groupe associée au paquet est :

$$v_g = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0}$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

La vitesse de groupe associée au paquet d'ondes coïncide avec la vitesse du centre du paquet.

c. Détermination de la largeur $\Delta x(t)$ et de l'amplitude $A(t)$ de $|\psi(x, t)|^2$:

La densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$ associée à la particule à l'instant t est une gaussienne de la forme :

$$|\psi(x, t)|^2 = A(t) e^{-x^2/b^2}$$

où $A(t)$ est l'amplitude du paquet et le paramètre b sont :

$$A(t) = \frac{\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}}{\left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{1/2}} \quad ; \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}a} \sqrt{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

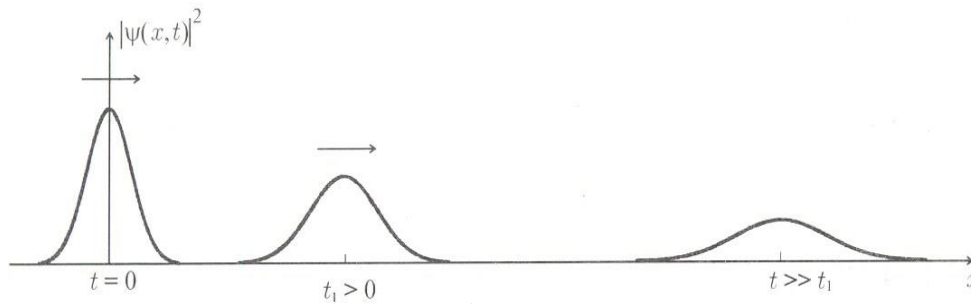
Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

La largeur du paquet est alors :

$$\Delta x(t) = \frac{b}{\sqrt{2}} = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

Evolution de la forme de la densité de probabilité au cours du temps :

Quand le temps t augmente, l'amplitude $A(t)$ diminue alors que la largeur $\Delta x(t)$ augmente, c'est l'étalement du paquet d'ondes.



Etalement du paquet d'ondes au cours du temps

PARTICULES DANS UN POTENTIEL CARRE

Problème 1 : Etats liés d'une particule dans un puits carré

On veut étudier les états liés d'une particule de masse m et d'énergie E se déplaçant dans une région de l'espace où règne le potentiel attractif suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -a & \text{(I)} \\ -V_0 & \text{si } -a < x < a & \text{(II)} \\ 0 & \text{si } x > a & \text{(III)} \end{cases}$$

V_0 et a sont des grandeurs positives.

1. a. Soit $\varphi(x)$ la fonction d'onde d'état stationnaire de la particule d'énergie E ($-V_0 < E < 0$). Ecrire l'équation de Schrödinger vérifiée par $\varphi(x)$ et déduire son expression dans chacune des trois régions de l'espace. On utilisera les paramètres suivants :

$$q^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

b. Le potentiel étant **symétrique**, donner les fonctions d'onde paires $\varphi_s(x)$ et impaires $\varphi_a(x)$.

2. a. Exprimer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première aux points de discontinuité du potentiel ($x \pm a$). En déduire les équations de quantification de l'énergie de la particule.

b. Montrer que ces équations sont équivalentes à :

$$|\cos(ka)| = \frac{k}{k_0} \quad \text{avec} \quad \text{tg}(ka) > 0$$

$$|\sin(ka)| = \frac{k}{k_0} \quad \text{avec} \quad \text{tg}(ka) < 0$$

c. Résoudre graphiquement ces deux relations qu'on représentera dans un même repère en fonction de k , et déduire la quantification de l'énergie de la particule.

Problème 2 : Modèle simplifié du noyau de deutérium

On se propose d'étudier les états stationnaires de fonction d'onde $\varphi(x)$ et d'énergie E d'un noyau de deutérium constitué d'un proton de masse m_p et d'un neutron de masse m_n . Soit Ox l'axe

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

passant par les deux nucléons. Du fait de l'interaction entre ces deux derniers, le problème revient à représenter le noyau de deutérium par sa masse réduite $m = \frac{m_p m_n}{m_p + m_n}$ évoluant dans le potentiel suivant :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ -V_0 & \text{si } 0 \leq x < a \\ 0 & \text{si } x \geq a \end{cases}$$

où V_0 et a sont des constantes positives.

Dans ce problème, on considérera **les états liés** d'énergie E telle que $-V_0 < E < 0$ et on introduira les constantes suivantes :

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

1. Représenter graphiquement l'allure du potentiel $V(x)$.
2.
 - a. Ecrire l'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction d'onde $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions de l'espace où le potentiel est constant.
 - b. Résoudre ces équations et établir l'expression de $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions de l'espace où le potentiel est constant.
 - c. Ecrire la continuité de $\varphi(x)$ au point $x=0$. En déduire la forme finale de la fonction d'onde $\varphi(x)$.
3.
 - a. Ecrire les équations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première au point $x=a$.
 - b. En déduire l'existence d'une condition de quantification de l'énergie.
 - c. Remplacer cette condition par une relation entre $|\sin(ka)|$ et $\frac{k}{k_0}$ où k_0 est une constante donnée par $k_0 = \sqrt{k^2 + q^2}$.

On donne :
$$1 + \cot g^2(x) = \frac{1}{\sin^2(x)}$$

4. Résoudre graphiquement l'équation obtenue et montrer que l'énergie des états liés du noyau est quantifiée.
5. Expérimentalement, on observe que le noyau de deutérium ne possède qu'un seul état lié. A quelle condition doit satisfaire la quantité $V_0 a^2$?
6. Tracer l'allure de la courbe de la fonction d'onde $\varphi(x)$ de cet état lié en fonction de x .

Problème 3 : Transmission par une barrière de potentiel – Effet tunnel

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Soit une particule de masse m et d'énergie E provenant de la région des x négatifs, arrivant sur une barrière de potentiel, de hauteur V_0 , définie comme suit :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

V_0 et a sont des grandeurs positives.

1. Etudier le comportement d'une particule classique d'énergie E arrivant sur cette barrière dans les deux cas où $E > V_0$ et $E < V_0$.

Nous étudierons par la suite une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger d'énergie E telle que $0 < E < V_0$.

2. Écrire l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde stationnaire $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions de l'espace. En déduire l'expression de la fonction d'onde $\varphi(x)$ dans chaque région.

On posera :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

3. Écrire les équations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première aux points $x = 0$ et $x = a$ et établir le rapport des amplitudes de l'onde transmise et incidente.
4. Le courant de probabilité qui caractérise le flux de particules est défini, à 1 dimension, par :

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

Établir les expressions des courants de probabilité incident \vec{j}_i et transmis \vec{j}_t par la barrière.

5. Déterminer le coefficient de transmission $T = \frac{|\vec{j}_t|}{|\vec{j}_i|}$ de la barrière défini par le rapport entre les courants transmis et incidents.

Problème 4 : Etats de diffusion d'une particule dans un puits carré

On considère un faisceau de particules de masse m et d'énergie $E > 0$, émis par une source située vers $-\infty$, se déplaçant vers une région de l'espace à une dimension où règne le potentiel attractif suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -a & \text{(I)} \\ -V_0 & \text{si } -a < x < a & \text{(II)} \\ 0 & \text{si } x > a & \text{(III)} \end{cases}$$

où V_0 et a sont des constantes positives.

On posera dans tout le problème :

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$$q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad k^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

1. Donner l'expression de la fonction d'onde stationnaire $\varphi(x)$ dans chaque région (I), (II) et (III).
2.
 - a. Exprimer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points $\pm a$.
 - b. Dédurre le rapport des amplitudes de l'onde incidente et de l'onde transmise dans (III).
 - c. Calculer les courants de probabilité incident \vec{j}_i et transmis \vec{j}_t par le puits carré.
 - d. Montrer que le facteur de transmission T , qui donne la probabilité pour que la particule arrivant de la région (I) avec l'énergie ($E > 0$) traverse le puits, s'exprime sous la forme suivante :

$$T = \frac{1}{1 + f(E) \sin^2 g(E)}$$

où $f(E)$ et $g(E)$ sont des fonctions de E que l'on explicitera.

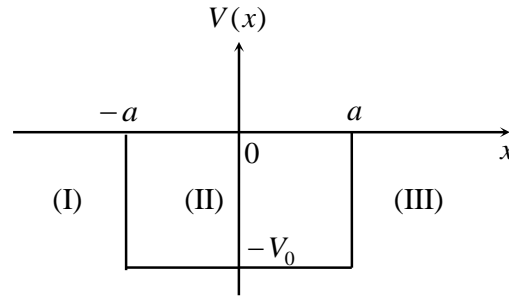
3. Le potentiel symétrique $V(x)$ représente de façon schématique le potentiel nucléaire ressenti par des neutrons arrivant sur un noyau lourd de diamètre $D = 2a = 20 \text{ fm}$.

Montrer que le noyau devient transparent aux neutrons ($T = 1$) pour certaines valeurs de leur énergie E . Calculer les trois premières valeurs de l'énergie telles que $T = 1$.

On donne : $V_0 = 45 \text{ MeV}$ et $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{32 m a^2} = 51,1 \text{ MeV}$.

Corrigé :

Problème 1 : Etats liés d'une particule dans un puits carré



Etats liés : $-V_0 < E < 0$

1. a. Dans les régions I et III :

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) - q^2 \varphi(x) = 0 \quad , \quad q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (E < 0)$$

Donc : $\varphi_1(x) = A e^{qx} + A' e^{-qx}$ et $\varphi_3(x) = G e^{-qx} + G' e^{qx}$

Or, $\varphi_1(x)$ et $\varphi_3(x)$ doivent tendre vers 0 quand x tend respectivement vers $-\infty$ et $+\infty$, car la fonction d'onde est bornée (états liés) : les coefficients A' et G' doivent alors être nuls.

Donc : $\varphi_1(x) = A e^{qx}$ et $\varphi_3(x) = G e^{-qx}$

Dans la région II : $\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad , \quad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$

Donc : $\varphi_2(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$

b. Symétrie du potentiel :

Le potentiel étant symétrique, alors les fonctions d'onde sont paires $\varphi_s(x)$ ou impaires $\varphi_a(x)$.

▪ Les fonctions d'onde paires $\varphi_s(x)$ sont telles que :

$$\begin{aligned} \varphi_1(-x) = \varphi_3(x) &\Rightarrow A = G \\ \varphi_2(-x) = \varphi_2(x) &\Rightarrow C = D \end{aligned}$$

Donc :

$$\varphi_s(x) = \begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{qx} \\ \varphi_2(x) = B \cos kx \\ \varphi_3(x) = A e^{-qx} \end{cases} \quad , \quad B = 2C$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

- Les fonctions d'onde impaires $\varphi_a(x)$ sont telles que :

$$\begin{aligned}\varphi_1(-x) &= -\varphi_3(x) &\Rightarrow & A = -G \\ \varphi_2(-x) &= -\varphi_2(x) &\Rightarrow & C = -D\end{aligned}$$

Donc :

$$\varphi_a(x) = \begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{qx} \\ \varphi_2(x) = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = -A e^{-qx} \end{cases}, \quad B = 2iC$$

2. a. Continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée :

Le potentiel étant symétrique, il suffit d'écrire la condition de continuité au point $x = a$.

- Cas des fonctions d'onde paires $\varphi_s(x)$:

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi'_2(a) = \varphi'_3(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B \cos(ka) = A e^{-qa} \\ -Bk \sin(ka) = -Aq e^{-qa} \end{cases} \Rightarrow \operatorname{tg}(ka) = \frac{q}{k} \quad (1)$$

- Cas des fonctions d'onde impaires $\varphi_a(x)$:

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi'_2(a) = \varphi'_3(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B \sin(ka) = -A e^{-qa} \\ Bk \cos(ka) = Aq e^{-qa} \end{cases} \Rightarrow \operatorname{tg}(ka) = -\frac{k}{q} \quad (2)$$

Les relations (1) et (2) sont les équations de quantification de l'énergie.

b. Relations de quantification équivalentes :

On a :

$$\cos^2 x + \sin^2 x = 1 \Rightarrow \begin{cases} |\cos x| = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 x}} \\ |\sin x| = \frac{1}{\sqrt{1 + \cot^2 x}} \end{cases}$$

On en déduit que les relations (1) et (2) sont respectivement équivalentes aux relations suivantes :

$$\begin{aligned}|\cos(ka)| &= \frac{k}{k_0} \quad ; \quad \text{avec} \quad \tan(ka) = \frac{q}{k} > 0 \\ |\sin(ka)| &= \frac{k}{k_0} \quad ; \quad \text{avec} \quad \tan(ka) = -\frac{q}{k} < 0\end{aligned}$$

Avec :

$$k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

c. Résolution graphique :

On reporte sur le même graphe les fonctions :

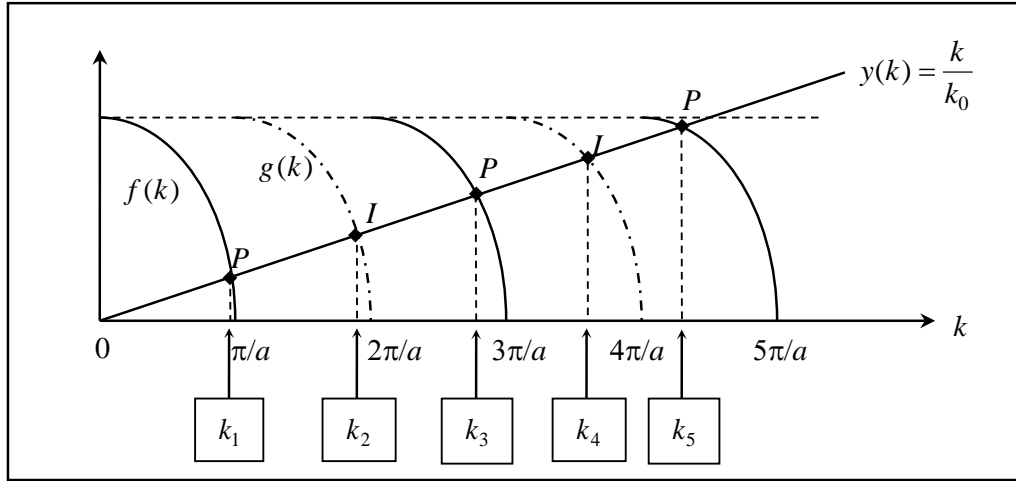
$$y(k) = \frac{k}{k_0}, \quad f(k) = |\cos(ka)| \quad \text{et} \quad g(k) = |\sin(ka)|$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

En respectant les conditions : $\tan(ka) > 0$ ou $\tan(ka) < 0$ selon le cas.

La projection des points d'intersection des courbes $f(k)$ et $g(k)$ avec la droite $y(k) = \frac{k}{k_0}$ sur

l'axe des abscisses k donne les valeurs possibles du vecteur d'onde k .

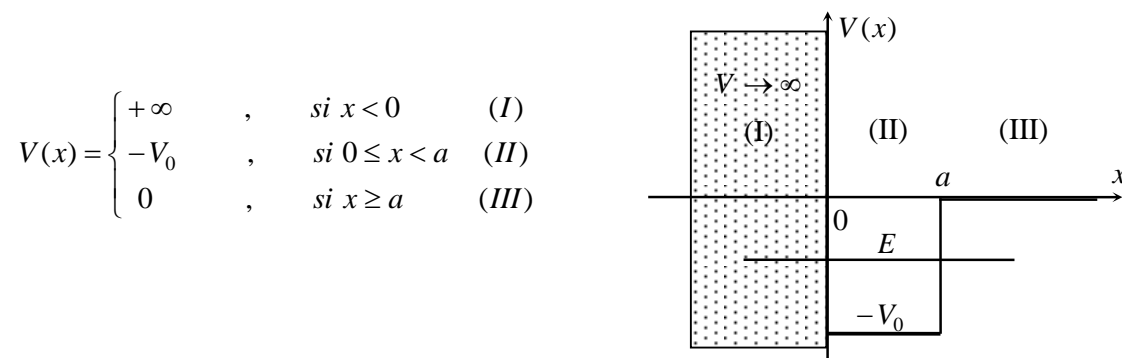


Ainsi, la résolution graphique montre que k est quantifié, il en est de même pour l'énergie de l'électron :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - V_0 \quad ; \quad n = 1, 2, \dots$$

Problème 2 : Modèle simplifié du noyau de deutérium

1. Représentation graphique du potentiel $V(x)$:



2. On considérera les états d'énergie E telle que $-V_0 < E < 0$

a. L'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction d'onde $\varphi(x)$ est :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(x) = 0$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

- Dans la région (I) le potentiel est infini alors la probabilité de présence de la particule est nulle dans cette région, par conséquent **la fonction d'onde est nulle**.
- Dans la région (II), $V(x) = -V_0$, donc :

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad , \quad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

- Dans la région (III), $V(x) = 0$, donc :

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) - q^2 \varphi(x) = 0 \quad , \quad q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

b. Expression de $\varphi(x)$ dans chaque région où le potentiel est constant :

La résolution de l'équation de Schrödinger dans chacune des trois régions donne :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = 0 & : & x < 0 \\ \varphi_2(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & : & 0 < x < a \\ \varphi_3(x) = C e^{-qx} + D e^{qx} & : & x > a \end{cases}$$

Or, $\varphi_3(x)$ doit tendre vers 0 quand x tend $+\infty$, car la fonction d'onde est bornée (états liés). Donc, le coefficient D doit être nul. Finalement, on a :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = 0 & : & x < 0 \\ \varphi_2(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & : & 0 < x < a \\ \varphi_3(x) = C e^{-qx} & : & x > a \end{cases}$$

c. La continuité de la fonction d'onde au point $x = 0$ s'écrit :

$$\varphi_2(0) = \varphi_1(0) \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow A = -B$$

Il s'ensuit que $\varphi_2(x) = 2i A \sin(kx)$. En notant la nouvelle constante égale à A , on a :

$$\boxed{\begin{cases} \varphi_1(x) = 0 & : & x < 0 \\ \varphi_2(x) = A \sin(kx) & : & 0 < x < a \\ \varphi_3(x) = C e^{-qx} & : & x > a \end{cases}}$$

3. a. Les équations de continuité au point $x = a$:

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A \sin(ka) = C e^{-qa} \\ Ak \cos(ka) = -Cq e^{-qa} \end{cases}$$

b. Le rapport de ces deux relations donne :

$$\operatorname{tg}(ka) = -\frac{k}{q} \quad \text{ou} \quad \cot g(ka) = -\frac{q}{k}$$

C'est la condition de quantification de l'énergie.

c. Comme : $1 + \cot^2(ka) = \frac{1}{\sin^2(ka)}$, donc : $\frac{1}{\sin^2(ka)} = 1 + \frac{q^2}{k^2} = \frac{k^2 + q^2}{k^2}$

Or $k^2 + q^2 = k_0^2$, alors :

$$\sin^2(ka) = \frac{k^2}{k_0^2}$$

D'où l'équation de quantification de l'énergie :

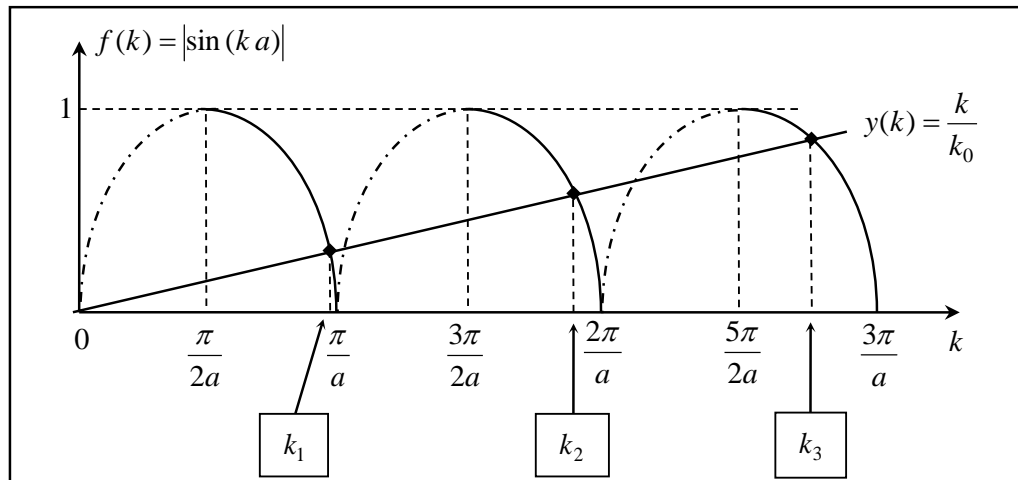
$$|\sin(ka)| = \frac{k}{k_0} \quad \text{avec} \quad \tan(ka) < 0$$

4. Résolution graphique :

On reporte sur le même graphe les fonctions :

$$y(k) = \frac{k}{k_0} \quad , \quad f(k) = |\sin(ka)|$$

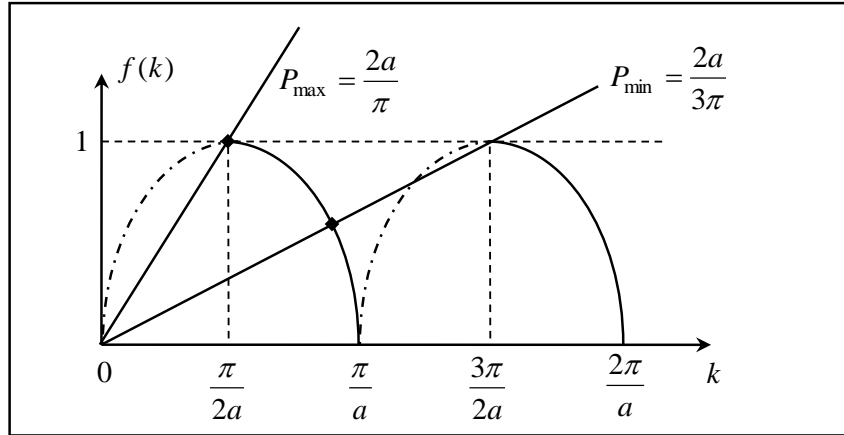
en respectant la condition $\tan(ka) < 0$.



La projection des points d'intersection de la courbe $f(k)$ avec la droite $y(k)$ sur l'axe des abscisses k donne les valeurs possibles du vecteur d'onde k . Ainsi, la résolution graphique montre que k est quantifié. L'énergie du noyau de deutérium est aussi quantifiée :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - V_0 \quad ; \quad n = 1, 2, \dots$$

5. Or, expérimentalement, le noyau de deutérium ne possède qu'un seul état lié. Donc, sur le graphe précédent, il y a un seul point d'intersection entre la courbe $f(k)$ avec la droite $y(k)$.



Il faut alors que la pente de la droite $y(k)$ soit comprise entre $P_{\max} = \frac{2a}{\pi}$ (inférieure ou égale)

et $P_{\min} = \frac{2a}{3\pi}$ (strictement supérieure). Soit :

$$\frac{2a}{3\pi} < \frac{1}{k_0} \leq \frac{2a}{\pi} \Rightarrow \frac{\pi}{2} \leq k_0 a < \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \frac{\pi^2}{4} \leq k_0^2 a^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} < \frac{9\pi^2}{4}$$

D'où la condition que doit satisfaire $V_0 a^2$:

$$\boxed{\frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \leq V_0 a^2 < \frac{9\pi^2 \hbar^2}{8m}}$$

6. Courbe de la fonction d'onde $\varphi(x)$ de cet état lié en fonction de x :

$$\boxed{\varphi(x) = \begin{cases} 0 & : x < 0 \\ A \sin(kx) & : 0 < x < a \\ C e^{-qx} & : x > a \end{cases}}$$

- On a, d'après la condition précédente, le point est tel que :

$$\frac{\pi}{2k} \leq a < \frac{\pi}{k}$$

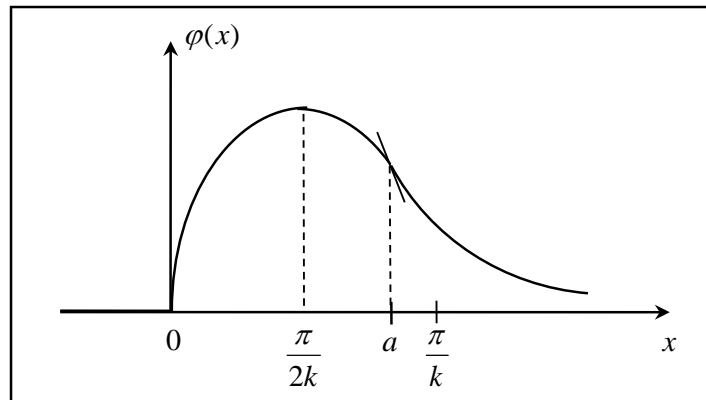
- au point $x = a$, il y a continuité de $\varphi(x)$ et de $\varphi'(x)$.

- le point $x = a$ est un point d'inflexion :

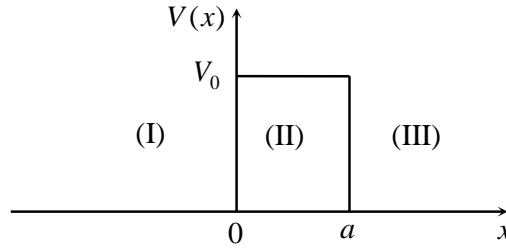
$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = -k^2 \varphi(x) < 0 \quad (0 < x < a) \quad : \text{concavité de la courbe vers la bas}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = q^2 \varphi(x) > 0 \quad (x > a) \quad : \text{concavité de la courbe vers le haut}$$

Ainsi, la courbe de $\varphi(x)$ présente un maximum au point $x = \frac{\pi}{2k}$ et un point d'inflexion en $x = a$, elle tend ensuite vers 0 en décroissance exponentielle.



Problème 3 : Transmission par une barrière de potentiel – Effet tunnel



1. Cas classique :

Le mouvement de la particule est tel que : $E = E_c + V(x) = \text{constante}$

Comme $E_c = \frac{p^2}{2m} \geq 0$, alors le mouvement de la particule n'est possible que si :

$$E_c = E - V(x) \geq 0 \quad (1)$$

1^{er} cas : si $E > V_0$ dans les trois régions de l'espace, alors la condition (1) est satisfaite et le mouvement de la particule est possible dans tout l'espace.

2^e cas : si $E < V_0$

- Dans la région (I), la condition (1) est satisfaite et le mouvement de la particule est possible dans cette région.
- Dans la région (II), on a $E < V_0$ et la condition (1) n'est pas satisfaite et le mouvement de la particule est impossible dans cette région.

Ainsi, au point $x = 0$, la particule rebrousse chemin : il y a réflexion totale.

Cas quantique :

2. Expressions de la fonction d'onde $\varphi(x)$ dans chaque région (I), (II) et (III) :

L'équation de Schrödinger vérifiée par $\varphi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Région I ($x < 0$) : $V = 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + q^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$A_1 e^{ikx}$: est l'onde incidente, $B_1 e^{-ikx}$: est l'onde réfléchi par la barrière située en $x = 0$.

Région II ($0 < x < a$) : $V = V_0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) - q^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_2(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$A_2 e^{qx}$ et $B_2 e^{-qx}$ sont des ondes transmises et réfléchies dans cette région

Région III ($x > a$) : $V = 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} + \underbrace{B_3 e^{-ikx}}_0 = A_3 e^{ikx}$$

$A_3 e^{ikx}$ est l'onde transmise dans la région (III) ; le coefficient $B_3 = 0$, car la particule incidente vient de $-\infty$.

3. Les équations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points $x = 0$ et $x = a$:

$$\begin{cases} \varphi_1(0) = \varphi_2(0) \\ \varphi'_1(0) = \varphi'_2(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi'_2(a) = \varphi'_3(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}) = ik A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi'_2(a) = \varphi'_3(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}) = ik A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi'_2(a) = \varphi'_3(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}) = ik A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (4)$$

Rapport des amplitudes de l'onde transmise et incidente :

On effectuera les opérations suivantes :

$$\begin{cases} ik \times (1) + (2) \\ q \times (3) + (4) \\ q \times (3) - (4) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2ik A_1 = (q + ik)A_2 - (q - ik)B_2 \\ 2q A_2 e^{qa} = (q + ik)A_3 e^{ika} \\ 2q B_2 e^{-qa} = (q - ik)A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} ik \times (1) + (2) \\ q \times (3) + (4) \\ q \times (3) - (4) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2ik A_1 = (q + ik)A_2 - (q - ik)B_2 \\ 2q A_2 e^{qa} = (q + ik)A_3 e^{ika} \\ 2q B_2 e^{-qa} = (q - ik)A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} ik \times (1) + (2) \\ q \times (3) + (4) \\ q \times (3) - (4) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2ik A_1 = (q + ik)A_2 - (q - ik)B_2 \\ 2q A_2 e^{qa} = (q + ik)A_3 e^{ika} \\ 2q B_2 e^{-qa} = (q - ik)A_3 e^{ika} \end{cases} \quad (7)$$

Ensuite, en remplaçant dans l'équation (5) les coefficients A_2 donné par l'équation (6) et B_2 donné par l'équation (7), on obtient la relation :

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4ikqe^{-ika}}{(q + ik)^2 e^{-qa} - (q - ik)^2 e^{qa}}$$

Soit :

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ikqe^{-ika}}{(k^2 - q^2) \sinh(qa) + 2ikq \cosh(qa)}$$

4. Courants de probabilité incident \vec{j}_i et transmis \vec{j}_t par la barrière de potentiel :

La fonction d'onde incidente est donnée par : $\varphi_i(x) = A_1 e^{ikx}$

Alors, le courant de probabilité incident est :

$$\vec{j}_i = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi_i^*(x) \frac{d\varphi_i(x)}{dx} - \varphi_i(x) \frac{d\varphi_i^*(x)}{dx} \right) \vec{e}_x \Rightarrow \vec{j}_i = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 \vec{e}_x$$

La fonction d'onde décrivant l'onde transmise dans la région III est :

$$\varphi_t(x) = \varphi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Le courant de probabilité correspondant à un électron transmis par la barrière est :

$$\vec{j}_t = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi_t^*(x) \frac{d\varphi_t(x)}{dx} - \varphi_t(x) \frac{d\varphi_t^*(x)}{dx} \right) \vec{e}_x \Rightarrow \vec{j}_t = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2 \vec{e}_x$$

5. Le coefficient de transmission de la barrière est :

$$T = \frac{|\vec{j}_t|}{|\vec{j}_i|} = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 + (k^2 + q^2)^2 \sinh^2(qa)}$$

En tenant compte des expressions de k et de q en fonction de E , il vient :

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left[\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right]}$$

Il y a une probabilité non nulle pour la particule de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet tunnel.

Problème 4 : Etats de diffusion d'une particule dans un puits carré

On considère un faisceau de particules de masse m et d'énergie $E > 0$, émis par une source située vers $-\infty$, se déplaçant vers une région de l'espace à une dimension où règne le potentiel attractif suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -a & \text{(I)} \\ -V_0 & \text{si } -a < x < a & \text{(II)} \\ 0 & \text{si } x > a & \text{(III)} \end{cases} ; \quad (V_0 > 0)$$

On posera dans tout le problème :

$$q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

1. Expressions de la fonction d'onde $\varphi(x)$ dans les régions (I), (II) et (III) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Région I ($x < -a$) : $V = 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + q^2 \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx}$$

$A_1 e^{iqx}$ est l'onde incidente, $B_1 e^{-iqx}$ est l'onde réfléchiée par la barrière située en $-a$.

Région II : $V = -V_0$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

$A_2 e^{ikx}$ est l'onde transmise par la barrière située en $-a$, $B_2 e^{-ikx}$ est l'onde réfléchie par la barrière située en a

Région III ($x > a$) : $V = 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + q^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_3(x) = A_3 e^{iqx} + B_3 e^{-iqx} = A_3 e^{iqx}$$

$A_3 e^{iqx}$ est l'onde transmise dans la région (III) ; le coefficient $B_3 = 0$, car il n'y a pas de réflexion dans cette région.

2. a. Equations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points $\pm a$:

$$\begin{cases} \varphi_1(-a) = \varphi_2(-a) \\ \varphi_1'(-a) = \varphi_2'(-a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{-iq a} + B_1 e^{iq a} = A_2 e^{-ik a} + B_2 e^{ik a} \\ iq(A_1 e^{-iq a} - B_1 e^{iq a}) = ik(A_2 e^{-ik a} - B_2 e^{ik a}) \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 e^{ik a} + B_2 e^{-ik a} = A_3 e^{iq a} \\ ik(A_2 e^{ik a} - B_2 e^{-ik a}) = iq A_3 e^{iq a} \end{cases} \quad (3)$$

$$(4)$$

b. Rapport des amplitudes de l'onde incidente et de l'onde transmise dans (III) :

On effectuera les opérations suivantes :

$$\begin{cases} iq \times (1) + (2) \\ ik \times (3) + (4) \\ ik \times (3) - (4) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2iq A_1 e^{-iq a} = i(q+k) A_2 e^{-ik a} + i(q-k) B_2 e^{ik a} \\ 2ik A_2 e^{ik a} = i(q+k) A_3 e^{iq a} \\ 2ik B_2 e^{-ik a} = i(q-k) A_3 e^{iq a} \end{cases} \quad (5)$$

$$(6)$$

$$(7)$$

En remplaçant dans l'équation (5) les coefficients A_2 donné par l'équation (6) et B_2 donné par l'équation (7), on obtient la relation suivante :

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4kq e^{-2iq a}}{(q+k)^2 e^{-2ik a} - (q-k)^2 e^{2ik a}}$$

Soit :

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{e^{-2iq a}}{\cos(2k a) - i \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right) \sin(2k a)}$$

c. Courants de probabilité incident j_i et transmis j_t par le puits carré :

▪ La fonction d'onde incidente est :

$$\varphi_i(x) = A_1 e^{iqx}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Alors, le courant de probabilité incident est :

$$\vec{j}_i = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi_i^*(x) \frac{d\varphi_i(x)}{dx} - \varphi_i(x) \frac{d\varphi_i^*(x)}{dx} \right) \vec{e}_x \Rightarrow \vec{j}_i = \frac{\hbar q}{m} |A_1|^2 \vec{e}_x$$

- La fonction d'onde transmise dans la région III est : $\varphi_3(x) = A_3 e^{iqx}$

Alors, le courant de probabilité correspondant à un électron transmis par la barrière est :

$$\vec{j}_t = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi_3^*(x) \frac{d\varphi_3(x)}{dx} - \varphi_3(x) \frac{d\varphi_3^*(x)}{dx} \right) \vec{e}_x \Rightarrow \vec{j}_t = \frac{\hbar q}{m} |A_3|^2 \vec{e}_x$$

d. Le coefficient de transmission de la barrière est :

$$T = \frac{|\vec{j}_t|}{|\vec{j}_i|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{\cos^2(2ka) + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2ka)} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 \sin^2(2ka)}$$

En tenant compte des expressions de k et de q en fonction de E , il vient :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2 g(E)}$$

où :

$$g(E) = 2ka = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)}$$

3. Résonance de diffusion :

- Le noyau devient transparent aux neutrons ($T = 1$) si $g(E) = 0$. Donc :

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} = n\pi \Rightarrow E_n = n^2 \varepsilon - V_0 \text{ avec } \varepsilon = \frac{\hbar^2}{32ma^2}$$

- Les trois premières valeurs de l'énergie telles que $T = 1$:

Pour : $V_0 = 45 \text{ MeV}$ et $\varepsilon = 51,1 \text{ MeV}$, on a :

$$\begin{aligned} n=1 & \Rightarrow E_1 = 6,1 \text{ MeV} \\ n=2 & \Rightarrow E_2 = 159,4 \text{ MeV} \\ n=3 & \Rightarrow E_3 = 415 \text{ MeV} \end{aligned}$$

FORMALISME MATHEMATIQUE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

Exercice 1

Soient A, B et C trois opérateurs linéaires.

1. Montrer que : $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
2. Montrer que : $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.
3. En déduire que : $[A, B^n] = \sum_{i=0}^{n-1} B^i [A, B] B^{n-i-1}$, $n \in \mathbb{N}^*$.
4. Soient $F(A)$ et $G(B)$ deux fonctions des opérateurs linéaires A et B . Montrer que :

$$[A, B] = 0 \quad \Rightarrow \quad [F(A), G(B)] = 0$$
5. Montrer que si $[B, [A, B]] = 0$, alors $[A, G(B)] = [A, B] \frac{dG}{dB}$.

Exercice 2

On considère un système physique dont l'espace des états à trois dimensions est rapporté à la base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. Soient L_z et S deux opérateurs définis par :

$$\begin{aligned} L_z |u_1\rangle &= |u_1\rangle & , & & L_z |u_2\rangle &= 0 & , & & L_z |u_3\rangle &= -|u_3\rangle \\ S |u_1\rangle &= |u_3\rangle & , & & S |u_2\rangle &= |u_2\rangle & , & & S |u_3\rangle &= |u_1\rangle \end{aligned}$$

1. Ecrire les matrices représentant les opérateurs L_z , L_z^2 , S et S^2 dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$.

Ces opérateurs sont – ils des observables ?

2. Calculer les vecteurs propres et valeurs propres de L_z^2 et S .
3. Déterminer une base de l'espace des états formée des vecteurs propres communs à L_z^2 et S .

Ces deux observables forment-elles un E. C. O. C. ?

Exercice 3 (facultatif, à ne pas traiter)

Soit l'espace des états à deux dimensions rapporté à la base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$.

Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres des opérateurs suivants :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad C = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad D = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

T.D. de Mécanique Quantique – SMP4 – Série 3

Corrigé

Exercice 1

Soient A, B et C trois opérateurs linéaires.

$$1. \quad [A, B+C] = A(B+C) - (B+C)A = AB + AC - BA - CA = [A, B] + [A, C]$$

Généralisation :

$$\left[\sum_i A_i, \sum_k B_k \right] = \sum_{i,k} [A_i, B_k]$$

$$2. \quad \text{Montrons que : } [A, BC] = [A, B]C + B[A, C].$$

Développons le second membre de l'égalité :

$$\begin{aligned} [A, B]C + B[A, C] &= (AB - BA)C + B(AC - CA) \\ &= ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= ABC - BCA = A(BC) - (BC)A = [A, BC] \end{aligned}$$

$$3. \quad \text{Démontrons par récurrence de la relation : } [A, B^n] = \sum_{i=0}^{n-1} B^i [A, B] B^{n-i-1}.$$

$$\text{On a : } [A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

Si $B = C$, alors :

$$[A, B^2] = [A, B]B + B[A, B] = B^0[A, B]B^1 + B^1[A, B]B^0$$

Le développement est donc vérifié pour $n = 1$ et $n = 2$.

Supposons qu'il le soit pour $n-1$ ($n \geq 2$) :

$$[A, B^{n-1}] = \sum_{i=0}^{n-2} B^i [A, B] B^{n-i-2}$$

On a :

$$\begin{aligned} [A, B^n] &= [A, B B^{n-1}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] \\ &= [A, B]B^{n-1} + \sum_{i=0}^{n-2} B^{i+1} [A, B] B^{n-i-2} \\ &= [A, B]B^{n-1} + \sum_{i=0}^{n-2} B^{i+1} [A, B] B^{n-(i+1)-1} \\ &= [A, B]B^{n-1} + \sum_{j=1}^{n-1} B^j [A, B] B^{n-j-1} \quad ; \quad (j = i+1) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} B^j [A, B] B^{n-j-1} \end{aligned}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

4. F et G étant des fonctions respectives des opérateurs A et B , alors :

$$F(A) = \sum_i f_i A^i \quad \text{et} \quad G(B) = \sum_j g_j B^j$$

Donc :

$$[F(A), G(B)] = \sum_{i,j} f_i g_j A^i B^j - \sum_{i,j} f_i g_j B^j A^i = \sum_{i,j} f_i g_j [A^i, B^j]$$

Considérons le commutateur $[A^i, B^j]$; on a :

$$[A^i, B^j] = \sum_{r=0}^{j-1} B^r [A^i, B] B^{j-r-1} = \sum_{r=0}^{j-1} B^r \left(\sum_{s=0}^{i-1} A^s [A, B] A^{i-s-1} \right) B^{j-r-1}$$

Si $[A, B] = 0$ alors $[A^i, B^j] = 0$ et par la suite $[F(A), G(B)] = 0$.

En particulier, pour $A = B = F(A)$, on a : $[A, G(A)] = 0$ puisque $[A, A] = 0$.

5. Montrons que si $[B, [A, B]] = 0$, alors $[A, G(B)] = [A, B] \frac{dG}{dB}$.

On a :

$$[A, G(B)] = [A, \sum_j g_j B^j] = \sum_j g_j [A, B^j] = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} B^s [A, B] B^{j-s-1} \right)$$

Le commutateur $[A, B]$ commute avec B , il commute aussi avec B^s qui est fonction de B :

$$B^s [A, B] = [A, B] B^s$$

D'où :

$$[A, G(B)] = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} [A, B] B^s B^{j-s-1} \right) = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} [A, B] B^{j-1} \right) = [A, B] \sum_j g_j j B^{j-1}$$

Or :

$$\sum_j g_j j B^{j-1} = \sum_j g_j \frac{d(B^j)}{dB} = \frac{d}{dB} \left(\sum_j g_j B^j \right) = \frac{dG}{dB}$$

d'où :

$$[A, G(B)] = [A, B] \frac{dG(B)}{dB}$$

Exercice 2

1. Les matrices représentant les opérateurs L_z , L_z^2 , S et S^2 dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$:

$$L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

Ces matrices sont symétriques et réelles, donc **hermitiques**, car :

$$[A^T]^* = A$$

Comme l'espace est de dimension finie, elles sont diagonalisables et représentent donc des **observables**.

2. Vecteurs propres et valeurs propres de L_z^2 :

$$L_z^2 |u_1\rangle = |u_1\rangle, \quad L_z^2 |u_2\rangle = 0, \quad L_z^2 |u_3\rangle = |u_3\rangle$$

Donc, les valeurs propres de L_z^2 sont 1 et 0. A la valeur propre 1 sont associés les vecteurs propres $|u_1\rangle$ et $|u_3\rangle$. A la valeur propre 0 est associé le vecteur propre $|u_2\rangle$.

▪ Vecteurs propres et valeurs propres de S :

Les valeurs propres de S

$$\det(S - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1-\lambda & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (\lambda - 1)^2(\lambda + 1) = 0$$

Les valeurs propres de S sont $\lambda = 1$ (deux fois dégénérée) et $\lambda = -1$ (non dégénérée)

▪ Les vecteurs propres de S

- On constate que $S|u_2\rangle = |u_2\rangle$, donc $|v_2\rangle = |u_2\rangle$ est le premier vecteur propre associé à $\lambda = 1$.
- Pour les deux autres vecteurs propres, considérons la restriction de la matrice de S au sous espace \mathcal{E}_2 engendré par les vecteurs $|u_1\rangle$ et $|u_3\rangle$:

$$(S) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On vérifie facilement que les vecteurs propres de (S) s'écrivent en fonction de $|u_1\rangle$ et $|u_3\rangle$:

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle + |u_3\rangle] \text{ vecteur propre associé à la valeur propre 1,}$$

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle - |u_3\rangle] \text{ vecteur propre associé à la valeur propre -1.}$$

Conclusion :

Les vecteurs propres de S associés à la valeur propre $\lambda = 1$ sont $|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle + |u_3\rangle]$ et $|v_2\rangle = |u_2\rangle$;

Le vecteur propre de S associé à la valeur propre $\lambda = -1$ est $|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle - |u_3\rangle]$.

3. Base de l'espace des états formée des vecteurs propres communs à L_z^2 et S :

i. Les deux observables L_z^2 et S commutent :

$$L_z^2 S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad S L_z^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow [L_z^2, S] = L_z^2 S - S L_z^2 = 0$$

ii. Base de vecteurs propres communs à L_z^2 et S :

On vérifie facilement que les vecteurs $|v_1\rangle$ et $|v_3\rangle$ sont aussi vecteurs propres de L_z^2 :

$$L_z^2 |v_1\rangle = |v_1\rangle \quad , \quad L_z^2 |v_3\rangle = |v_3\rangle$$

Donc, l'ensemble des vecteurs $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$ sont des vecteurs propres communs à L_z^2 et S .

Vecteurs propres communs	Valeurs propres de L_z^2	Valeurs propres de S
$ v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1\rangle + u_3\rangle]$	1	1
$ v_2\rangle = u_2\rangle$	0	1
$ v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1\rangle - u_3\rangle]$	1	-1

A chaque couple de valeurs propres de L_z^2 et S correspond un seul vecteur propre commun.

On vérifie que l'ensemble $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$ vérifie les deux relations fondamentales (relation d'orthonormalisation et de fermeture) suivantes :

$$\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} \quad , \quad \sum_{i=1}^3 |v_i\rangle \langle v_i| = I$$

Par conséquent, l'ensemble $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$ forme une base de l'espace des états.

Les deux observables L_z^2 et S commutent et admettent une base de vecteurs propres communs, par conséquent elles forment un E. C. O. C.

POSTULATS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

Problème 1 : Application des 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 \mathbf{A} et \mathbf{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 :

$$\begin{aligned} H|u_1\rangle &= \hbar\omega_0|u_1\rangle & , & & H|u_2\rangle &= 2\hbar\omega_0|u_2\rangle & , & & H|u_3\rangle &= 2\hbar\omega_0|u_3\rangle \\ A|u_1\rangle &= a|u_1\rangle & , & & A|u_2\rangle &= a|u_3\rangle & , & & A|u_3\rangle &= a|u_2\rangle \\ B|u_1\rangle &= b|u_2\rangle & , & & B|u_2\rangle &= b|u_1\rangle & , & & B|u_3\rangle &= b|u_3\rangle \end{aligned}$$

où : ω_0 , a et b sont des constantes réelles positives.

A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état initial :

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

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

Problème 2 : Evolution d'un système dans un champ magnétique (Théorème d'Ehrenfest)

On considère un système physique S dont l'espace des états, à deux dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les deux kets $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$. Soient les observables S_x , S_y et S_z définies par leurs actions sur les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$:

$$\begin{aligned} S_x |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |-\rangle & ; & & S_x |-\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_y |+\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |-\rangle & ; & & S_y |-\rangle &= \frac{-i\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle & ; & & S_z |-\rangle &= \frac{-\hbar}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

1. a. Ecrire les matrices représentant S_x , S_y et S_z dans la base \mathcal{B} .
 b. Calculer les commutateurs $[S_x, S_y]$, $[S_y, S_z]$ et $[S_z, S_x]$.
2. Le système S supposé fixe (énergie cinétique nulle), est placé dans un champ magnétique constant parallèle à Oz , $\vec{B} = B\vec{e}_z$; l'hamiltonien d'interaction H du système avec le champ magnétique est alors $H = \omega S_z$, où ω est une constante réelle. A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état :

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

- a. Calculer les valeurs moyennes $\langle S_x \rangle_0$, $\langle S_y \rangle_0$ et $\langle S_z \rangle_0$ dans l'état $|\psi(0)\rangle$.
 - b. Déterminer l'état $|\psi(t)\rangle$ de la particule à tout instant ultérieur $t > 0$.
 - c. Calculer les valeurs moyennes $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ et $\langle S_z \rangle$ dans l'état $|\psi(t)\rangle$.
3. a. En utilisant le théorème d'Ehrenfest, calculer : $\frac{d}{dt}\langle S_x \rangle$, $\frac{d}{dt}\langle S_y \rangle$ et $\frac{d}{dt}\langle S_z \rangle$.
 b. Trouver les équations différentielles de second degré vérifiées par $\langle S_x \rangle$ et $\langle S_y \rangle$.
 Résoudre ces équations et retrouver le résultat de la question (2 - c). En donner une interprétation géométrique.

Problème 3 : Mesure d'observables sur un système physique

On considère un système physique S dont l'espace des états, à deux dimensions, est rapporté à la base orthonormée complète formée par les deux kets $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Soient les opérateurs S_x , S_y et S_z dont les actions sur les vecteurs de base $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont données par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} S_x |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |-\rangle & ; & & S_x |-\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_y |+\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |-\rangle & ; & & S_y |-\rangle &= \frac{-i\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle & ; & & S_z |-\rangle &= \frac{-\hbar}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

1. Ecrire les matrices représentant les opérateurs S_x , S_y et S_z dans la base \mathcal{B} .
2. Les opérateurs S_x , S_y et S_z sont-ils hermitiques ? Justifier votre réponse.
3. Quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur S_z .
4. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur S_y .

N. B. : On notera $|u\rangle$ le vecteur propre de S_y associé à la valeur propre positive et $|v\rangle$ le vecteur propre associé à la valeur propre négative.

5. Si le système se trouve dans l'état $|+\rangle$, calculer les valeurs moyennes $\langle S_x \rangle$, $\langle S_x^2 \rangle$ et l'écart quadratique moyen ΔS_x .

On rappelle que : $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

6. Le système se trouve maintenant dans l'état :

$$|\psi\rangle = \cos \theta |+\rangle + \sin \theta |-\rangle ; \theta \in \mathbb{R}$$

On mesure l'observable S_z^2 .

- a. Quels sont les résultats possibles et leurs probabilités ?
 - b. Quel est l'état du système immédiatement après la mesure ?
7. On mesure ensuite l'observable S_z .
Quels sont les résultats possibles et leurs probabilités ?
 8. Au lieu de mesurer S_z , on mesure S_y .
Quels sont les résultats possibles et leurs probabilités ?

Corrigé :

Problème 1 : Application des postulats de la mesure

1. Expression normalisée du vecteur $|\psi(t=0)\rangle$:

Calculons le carré de la norme du vecteur $|\psi(t=0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$:

$$\langle\psi(t=0)|\psi(t=0)\rangle = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 2$$

Donc l'expression normalisée du vecteur est :

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

2. Les matrices représentant les observables H , A et B dans la base \mathcal{B} sont :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} ; \quad A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} ; \quad B = \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

où : ω_0 , a et b sont des constantes réelles positives.

3. A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état initial :

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

On mesure, à l'instant $t = 0$, l'énergie du système.

a. Résultats possibles et leurs probabilités :

- Les résultats possibles sont les valeurs propres de l'hamiltonien H : $\hbar\omega_0$ et $2\hbar\omega_0$.
- Les probabilités associées :

$$P(\hbar\omega_0) = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(2\hbar\omega_0) = |\langle u_2 | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle u_3 | \psi(0) \rangle|^2 = \left(\frac{1}{2} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

b. La valeur moyenne de l'énergie $\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle$:

$$\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle = \sum_{i=1}^3 E_i P(E_i) = \hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{2} + 2\hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \hbar\omega_0$$

c. L'écart quadratique moyen ΔH :

- Moyenne de H^2 :

$$\langle H^2 \rangle_0 = (\hbar\omega_0)^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = (\hbar\omega_0)^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{5}{2} (\hbar\omega_0)^2$$

- L'écart quadratique moyen ΔH :

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{\frac{5}{2} (\hbar\omega_0)^2 - \frac{9}{4} (\hbar\omega_0)^2} \Rightarrow \Delta H = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

4. Au lieu de mesurer l'énergie du système à l'instant $t = 0$, on mesure la grandeur **A**.

a. Résultats possibles et leurs probabilités :

- Les valeurs propres de A

$$\text{Det}(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & a \\ 0 & a & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (a - \lambda)^2 (\lambda + a) = 0$$

Donc, les valeurs propres de **A** sont : $\lambda = a$ (valeur propre deux fois dégénérée) et $\lambda = -a$ (valeur propre simple).

- Les vecteurs propres de A

On constate que $A|u_1\rangle = a|u_1\rangle$, donc $|v_1\rangle = |u_1\rangle$ est le premier vecteur propre associé à **a**.

On cherche $|v_2\rangle = x|u_1\rangle + y|u_2\rangle + z|u_3\rangle$ vecteur propre de **A** associé à la valeur propre **a** tel que :

$$A|v_2\rangle = a|v_2\rangle \quad , \quad \langle v_1|v_2\rangle = 0 \quad , \quad \langle v_2|v_2\rangle = 1$$

$$\bullet \quad A|v_2\rangle = a|v_2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax \\ az \\ ay \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax \\ ay \\ az \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x \\ y = z \end{cases}$$

$$\bullet \quad \langle v_1|v_2\rangle = 0 \Rightarrow \langle u_1|v_2\rangle = x = 0$$

$$\bullet \quad \langle v_2|v_2\rangle = 1 = |x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 2|y|^2 \Rightarrow |y| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow y = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$$

$e^{i\theta}$ est un facteur de phase qu'on peut prendre égal à 1, donc :

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle + |u_3\rangle]$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

De même, on cherche le vecteur $|v_3\rangle = x|u_1\rangle + y|u_2\rangle + z|u_3\rangle$ associé à la valeur propre $-a$ tel que :

$$A|v_3\rangle = -a|v_3\rangle \quad , \quad \langle v_1|v_3\rangle = 0 \quad , \quad \langle v_3|v_3\rangle = 1$$

On obtient :

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle - |u_3\rangle]$$

Conclusion :

Les vecteurs propres associés à la valeur a sont :

$$|v_1\rangle = |u_1\rangle \text{ et } |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle + |u_3\rangle]$$

Le vecteur propre associé à la valeur propre $-a$ est :

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle - |u_3\rangle]$$

- Les résultats possibles sont les valeurs propres de l'observable A , c'est-à-dire : a et $-a$.
- Les probabilités associées :
- A la valeur propre a sont associés les vecteurs propres $|v_1\rangle = |u_1\rangle$ et $|v_2\rangle$, donc :

$$P(a,0) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle v_2|\psi(0)\rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 1$$

- A la valeur propre $-a$ est associé le vecteur propre $|v_3\rangle$, donc :

$$P(-a,0) = |\langle v_3|\psi(0)\rangle|^2 = 0$$

Ou bien :

$$P(a,0) + P(-a,0) = 1 \Rightarrow P(-a,0) = 0$$

b. Vecteur d'état immédiatement après la mesure :

La mesure la grandeur A dans l'état $|\psi(0)\rangle$ donne comme résultat la valeur a avec $P(a,0) = 1$.

1^{ère} méthode :

Avant la mesure, le système était dans l'état propre $|\psi(0)\rangle$ de A , donc, après la mesure le système restera dans cet état propre.

Ce qui implique que l'état du système immédiatement après la mesure est l'état $|\psi(0)\rangle$.

2^{ème} méthode :

On applique le postulat 5 (réduction du vecteur d'état) : L'état du système immédiatement après la mesure est donnée par la projection orthogonale sur le sous-espace engendré par les vecteurs propres associés à la valeur propre a . Soit :

$$|\psi'(0)\rangle = \frac{P_a |\psi(0)\rangle}{\sqrt{\langle \psi(0) | P_a | \psi(0) \rangle}}$$

Où :

$$\begin{aligned} P_a &= |u_1\rangle\langle u_1| + |v_2\rangle\langle v_2| = |u_1\rangle\langle u_1| + \frac{1}{2}(|u_2\rangle + |u_3\rangle)(\langle u_2| + \langle u_3|) \\ &= |u_1\rangle\langle u_1| + \frac{1}{2}|u_2\rangle\langle u_2| + \frac{1}{2}|u_2\rangle\langle u_3| + \frac{1}{2}|u_3\rangle\langle u_2| + \frac{1}{2}|u_3\rangle\langle u_3| \end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned} P_a |\psi(0)\rangle &= \left(|u_1\rangle\langle u_1| + \frac{1}{2}|u_2\rangle\langle u_2| + \frac{1}{2}|u_2\rangle\langle u_3| + \frac{1}{2}|u_3\rangle\langle u_2| + \frac{1}{2}|u_3\rangle\langle u_3| \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle \\ \Rightarrow P_a |\psi(0)\rangle &= |\psi(0)\rangle \Rightarrow P_a = I \end{aligned}$$

D'où :

$$|\psi'(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$$

5. Vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant t :

Le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est obtenu en appliquant l'opérateur d'évolution à l'état $|\psi(0)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t,0) |\psi(0)\rangle$$

L'hamiltonien H étant indépendant du temps, donc :

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

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot t} |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot t} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle \right)$$

Donc :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle$$

6. Valeur moyenne $\langle A \rangle_t$ de l'observable A à l'instant t :

D'après le théorème d'Ehrenfest, l'évolution de la valeur moyenne d'une observable A dans le temps est donnée par :

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

On peut vérifier facilement que l'observable A ne dépend pas explicitement du temps, et qu'elle commute avec l'hamiltonien H :

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \text{ et } [A, H] = 0$$

L'observable A est une constante du mouvement. Donc :

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt}\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = 0$$

Ainsi :

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_t &= \langle A \rangle_{t=0} = \text{constante} \\ \langle A \rangle_0 &= \langle \psi(0) | A | \psi(0) \rangle = a \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = a\end{aligned}$$

Car $|\psi(0)\rangle$ est un état propre de l'observable A associé à la valeur propre a .

▪ **Valeur moyenne $\langle B \rangle_t$ de l'observable B à l'instant t :**

On peut vérifier facilement que l'observable B ne commute pas avec l'hamiltonien H : $[B, H] \neq 0$

L'observable B n'est pas une constante du mouvement. Donc :

$$\frac{d}{dt}\langle B \rangle \neq 0 \Rightarrow \langle B \rangle_t \neq \langle B \rangle_{t=0}$$

Calcul de $\langle B \rangle_t = \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle B \rangle_t &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ \langle B \rangle_t &= b \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\sqrt{2}}(e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t}) + \frac{b}{4}\end{aligned}$$

Donc :

$$\langle B \rangle_t = b \left(\frac{\cos \omega_0 t}{\sqrt{2}} + \frac{1}{4} \right)$$

Conclusion :

- la valeur moyenne $\langle A \rangle_t$ est constante dans le temps, car l'observable A est une constante du mouvement ;
- la valeur moyenne $\langle B \rangle_t$ est une fonction périodique du temps, sa période est $T = 2\pi / \omega_0$.

7. a. A l'instant t , on mesure l'observable A .

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Résultats possibles et probabilités correspondantes :

- Les résultats possibles sont les valeurs propres de l'observable A , c'est-à-dire : a et $-a$.

- La probabilité de trouver la valeur a :

$$P(a) = \left| \langle u_1 | \psi(t) \rangle \right|^2 + \left| \langle v_2 | \psi(t) \rangle \right|^2 = 1$$

- La probabilité de trouver la valeur $-a$:

$$P(-a) = \left| \langle v_3 | \psi(t) \rangle \right|^2 = 1 - P(a) = 0$$

Puisque l'observable A est une constante du mouvement, alors les probabilités de mesure se conservent dans le temps.

b. A l'instant t , on mesure l'observable B .

- les valeurs propres de B sont : $\lambda_1 = b$ (valeur propre deux fois dégénérée) et $\lambda_2 = -b$ (valeur propre simple).

- les vecteurs propres associés à la valeur propre $\lambda_1 = b$ sont :

$$|q_1\rangle = |u_3\rangle \text{ et } |q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle + |u_2\rangle]$$

- le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_2 = -b$ est :

$$|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle - |u_2\rangle]$$

Donc, les résultats possibles sont alors b et $-b$.

- La probabilité de trouver la valeur b :

$$P(b) = \left| \langle u_3 | \psi(t) \rangle \right|^2 + \left| \langle q_2 | \psi(t) \rangle \right|^2 = \frac{5}{8} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos(\omega_0 t)$$

- La probabilité de trouver la valeur $-b$:

$$P(-b) = 1 - P(b) = \left| \langle q_3 | \psi(t) \rangle \right|^2 = \frac{3}{8} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos(\omega_0 t)$$

On constate que les probabilités de mesure de l'observable B sont des fonctions périodiques du temps, puisque l'observable B n'est pas une constante du mouvement.

Problème 2 : Evolution d'un système dans un champ magnétique (Théorème d'Ehrenfest)

1. a. Les matrices représentants S_x , S_y et S_z dans la base \mathcal{B} :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

b. Calcul des commutateurs $[S_x, S_y]$, $[S_y, S_z]$ et $[S_z, S_x]$:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad ; \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x \quad ; \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

2. L'hamiltonien d'interaction H de la particule avec le champ magnétique est :

$$H = \omega S_z, \text{ où } \omega \in \mathbb{R}.$$

A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état :

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

a. Valeurs moyennes $\langle S_x \rangle_0$, $\langle S_y \rangle_0$ et $\langle S_z \rangle_0$ dans l'état $|\psi(0)\rangle$:

$$\langle S_x \rangle_0 = \frac{\hbar}{2} \quad ; \quad \langle S_y \rangle_0 = 0 \quad ; \quad \langle S_z \rangle_0 = 0$$

b. Le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est obtenu en appliquant l'opérateur d'évolution à l'état $|\psi(0)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi(0)\rangle$$

L'hamiltonien H étant indépendant du temps, donc :

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot t} = e^{-i \frac{\omega t}{\hbar} S_z}$$

Donc :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i \frac{\omega t}{\hbar} S_z} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{\omega t}{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{\omega t}{2}} |-\rangle \end{aligned}$$

c. Valeurs moyennes $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ et $\langle S_z \rangle$ dans l'état $|\psi(t)\rangle$:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t) \quad ; \quad \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t) \quad ; \quad \langle S_z \rangle = 0$$

3. a. Calcul de : $\frac{d}{dt} \langle S_x \rangle$, $\frac{d}{dt} \langle S_y \rangle$ et $\frac{d}{dt} \langle S_z \rangle$:

D'après le théorème d'Ehrenfest, l'évolution de la valeur moyenne de l'observable S_u dans le temps est donnée par :

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

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Les observables S_x , S_y et S_z ne dépendent pas explicitement du temps, alors :

$$\frac{d}{dt}\langle S_u \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [S_u, H] \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} \langle [S_u, S_z] \rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle S_x \rangle = -\omega \langle S_y \rangle \quad (1)}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle S_y \rangle = \omega \langle S_x \rangle \quad (2)}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle S_z \rangle = 0 \quad (3)}$$

L'équation (3) montre que la composante S_z reste en moyenne constante :

$$\frac{d}{dt}\langle S_z \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle S_z \rangle = \text{const} = \langle S_z \rangle_0 \quad \Rightarrow \quad \langle S_z \rangle = 0$$

b. Equations différentielles de second ordre vérifiées par $\langle S_x \rangle$ et $\langle S_y \rangle$:

▪ Dérivons, par rapport au temps, les équations (1) et (2) :

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dt^2}\langle S_x \rangle = -\omega \frac{d}{dt}\langle S_y \rangle = -\omega^2 \langle S_x \rangle \\ \frac{d^2}{dt^2}\langle S_y \rangle = \omega \frac{d}{dt}\langle S_x \rangle = -\omega^2 \langle S_y \rangle \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2}\langle S_x \rangle + \omega^2 \langle S_x \rangle = 0 \\ \frac{d^2}{dt^2}\langle S_y \rangle + \omega^2 \langle S_y \rangle = 0 \end{cases}$$

▪ Les solutions de ces deux équations différentielles de second ordre sont de la forme :

$$\langle S_x \rangle = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \quad ; \quad \langle S_y \rangle = C \cos(\omega t) + D \sin(\omega t)$$

A, B, C et D sont des paramètres complexes déterminés à partir des conditions initiales :

$$\langle S_x \rangle(t=0) = \langle S_x \rangle_0 = A = \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \langle S_y \rangle(t=0) = \langle S_y \rangle_0 = C = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle S_x \rangle = -A\omega \sin(\omega t) + B\omega \cos(\omega t) = -\omega \langle S_y \rangle \Rightarrow B = \langle S_y \rangle_0 = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle S_y \rangle = -C\omega \sin(\omega t) + D\omega \cos(\omega t) = \omega \langle S_x \rangle \Rightarrow D = \langle S_x \rangle_0 = \frac{\hbar}{2}$$

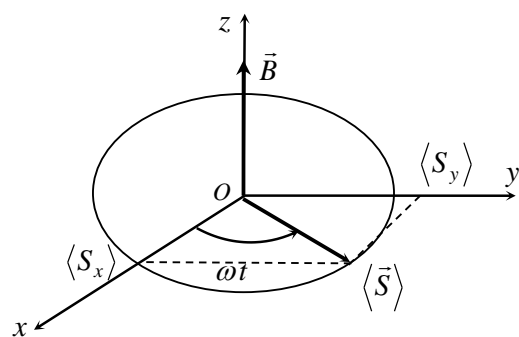
D'où :

$$\boxed{\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t) \quad , \quad \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t) \quad , \quad \langle S_z \rangle = 0}$$

▪ Interprétation géométrique :

Ces équations décrivent un mouvement de précession du vecteur $\langle \vec{S} \rangle$ de composantes $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ et $\langle S_z \rangle = 0$ autour du champ magnétique \vec{B} à la vitesse angulaire ω :

$$\boxed{\langle \vec{S} \rangle = \langle S_x \rangle \vec{e}_x + \langle S_y \rangle \vec{e}_y = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t) \vec{e}_x + \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t) \vec{e}_y}$$



Ce mouvement de précession d'un moment cinétique autour d'un champ magnétique constant est appelé **précession de Larmor**.

Problème 3 : Mesure d'observables sur un système physique

1. Les matrices représentant S_x , S_y et S_z dans la base \mathcal{B} :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

2. Les opérateurs S_x , S_y et S_z sont hermitiques car on vérifie bien que :

- les éléments de la diagonale principale sont des nombres réels,
- les éléments de matrice symétriques par rapport à la diagonale principale sont complexes conjugués les uns des autres.

Ainsi, la matrice d'un opérateur hermitique A vérifie la relation suivante :

$$\boxed{[A^T]^* = A}$$

On montre que cette propriété est vérifiée par les trois matrices S_x , S_y et S_z :

$$\boxed{[S_x^T]^* = S_x \quad , \quad [S_y^T]^* = S_y \quad , \quad [S_z^T]^* = S_z}$$

3. Valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur S_z :

La matrice représentant l'opérateur S_z dans la base $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ est diagonale, donc :

- Les valeurs propres de S_z sont les éléments de la diagonale, c'est-à-dire : $\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$.
- Les vecteurs propres associés sont respectivement les vecteurs de la base \mathcal{B} : $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

$$\boxed{\lambda_1 = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

$$\boxed{\lambda_2 = -\frac{\hbar}{2} \Rightarrow |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

4. Valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur S_y :

▪ Les valeurs propres de S_y :

$$Det(S_y - \lambda I) = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{-i\hbar}{2} \\ \frac{i\hbar}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Donc les valeurs propres de S_y sont :

$$\boxed{\lambda_1 = \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}}$$

▪ Le vecteur propre $|u\rangle$ associé à $\lambda_1 = \frac{\hbar}{2}$:

Polycopié Problèmes et Exercices résolus : Mécanique Quantique SMP-S4

Soit $|u\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$; $x, y \in \mathbb{C}$ tel que : $S_y |u\rangle = \frac{\hbar}{2} |u\rangle$ et $\langle u|u\rangle = 1$

$$\langle u|u\rangle = 1 \Rightarrow |x|^2 + |y|^2 = 1$$

$$S_y |u\rangle = \frac{\hbar}{2} |u\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i y \\ i x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow y = i x$$

La relation d'orthonormalisation devient alors :

$$|x|^2 + |y|^2 = 2|x|^2 = 1, \text{ il vient } |x| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow x = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$$

$e^{i\theta}$ est un facteur de phase qu'on prendra arbitrairement égal à 1, donc :

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad y = \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \Rightarrow \boxed{|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}}$$

▪ Le vecteur propre $|v\rangle$ associé à $\lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}$:

Soit $|v\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$; $x, y \in \mathbb{C}$ tel que : $S_y |v\rangle = -\frac{\hbar}{2} |v\rangle$ et $\langle v|v\rangle = 1$

$$\langle v|v\rangle = 1 \Rightarrow |x|^2 + |y|^2 = 1$$

$$S_y |v\rangle = -\frac{\hbar}{2} |v\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i y \\ i x \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow y = -i x$$

La relation d'orthonormalisation devient alors :

$$|x|^2 + |y|^2 = 2|x|^2 = 1, \text{ il vient } |x| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow x = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$$

$e^{i\theta}$ est un facteur de phase qu'on prendra arbitrairement égal à 1, donc :

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad y = \frac{-i}{\sqrt{2}} \\ \Rightarrow \boxed{|v\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}}$$

5. Le système est dans l'état $|+\rangle$.

▪ Valeur moyenne $\langle S_x \rangle$:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \boxed{\langle S_x \rangle = 0}$$

- Valeur moyenne $\langle S_x^2 \rangle$:

$$\langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\boxed{\langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}}$$

- Ecart quadratique moyen ΔS_x :

$$\Delta S_x = \sqrt{\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2} = \sqrt{\langle S_x^2 \rangle} \Rightarrow \boxed{\Delta S_x = \frac{\hbar}{2}}$$

6. Le système se trouve maintenant dans l'état :

$$|\psi\rangle = \cos \theta |+\rangle + \sin \theta |-\rangle ; \theta \in \mathbb{R}$$

On mesure l'observable S_z^2 .

a. Les résultats possibles et leurs probabilités :

La matrice représentant S_z^2 dans la base \mathcal{B} est :

$$S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

L'observable S_z^2 possède une seule valeur propre doublement dégénérée $\frac{\hbar^2}{4}$ dont les vecteurs propres associés sont les kets $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Donc :

- Le seul résultat possible de cette mesure est la valeur $\frac{\hbar^2}{4}$
- Sa probabilité est :

$$P(\hbar^2/4) = |\langle +|\psi\rangle|^2 + |\langle -|\psi\rangle|^2 = \cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$$

b. L'état du système immédiatement après la mesure :

On accepte les deux méthodes suivantes :

La mesure de S_z^2 effectuée sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ donne avec certitude la valeur $\frac{\hbar^2}{4}$, ce qui implique que :

L'état $|\psi\rangle$ est un état propre de S_z^2 , donc, après la mesure le système reste dans cet état propre.

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

$$|\psi\rangle = \cos \theta |+\rangle + \sin \theta |-\rangle$$

7. On mesure ensuite l'observable S_z .

- Les résultats possibles sont les valeurs propres de S_z : $\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$.
- Leurs probabilités :

$$P(\hbar/2) = |\langle + | \psi \rangle|^2 = \cos^2 \theta, \quad P(-\hbar/2) = |\langle - | \psi \rangle|^2 = \sin^2 \theta$$

8. Au lieu de mesurer S_z , on mesure S_y .

- Les résultats possibles sont les valeurs propres de S_y : $\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$.
- Leurs probabilités :

$$P(\hbar/2) = |\langle u | \psi \rangle|^2, \quad P(-\hbar/2) = |\langle v | \psi \rangle|^2$$

Or :

$$\langle u | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos \theta - i \sin \theta)$$

Donc :

$$\begin{aligned} P(\hbar/2) &= |\langle u | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\cos \theta - i \sin \theta|^2 = \frac{1}{2} (\cos \theta + i \sin \theta)(\cos \theta - i \sin \theta) \\ &= \frac{1}{2} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$P(-\hbar/2) = |\langle v | \psi \rangle|^2 = 1 - P(\hbar/2) = \frac{1}{2}$$

D'où :

$$P(\hbar/2) = P(-\hbar/2) = \frac{1}{2}$$