

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés. Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard. Les exercices sont indépendants les uns des autres. Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.

Il sera grandement tenu compte de la présentation de la copie.

Les notations sont celles du cours.

%%%

**Exercice I SUPERPOSITION D'ÉTATS**

Soient  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  deux états propres orthonormés de l'opérateur hamiltonien d'un système correspondant respectivement aux énergies  $E_1$  et  $E_2$ , avec  $E_1 \neq E_2$ . Le système se trouve dans un état normé résultant de la superposition linéaire des deux états  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  et décrit

par le vecteur  $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ . On suppose que  $c_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}$ .

- 1) Quelles sont la ou les valeurs possibles pour  $c_2$  ?
- 2) Quels sont le ou les résultats possibles de la mesure de l'énergie du système dans l'état  $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$  et la probabilité de le(s) obtenir ?

**Exercice II SYSTÈME À DEUX NIVEAUX**

On considère un système à deux niveaux dont l'observable hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = E_0|1\rangle\langle 1| + \sqrt{2}E_0|1\rangle\langle 2| + \sqrt{2}E_0|2\rangle\langle 1|$$

où  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$  sont deux vecteurs orthonormés qui forment une base et  $E_0$  une constante réelle positive.

À l'instant initial, le système se trouve dans l'état  $|1\rangle$ .

- 1) Écrire la matrice correspondant à l'opérateur hamiltonien dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ .
- 2) Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Écrire les vecteurs  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$  dans la base des deux vecteurs propres de l'hamiltonien (on choisira la notation  $|E_1\rangle$  et  $|E_2\rangle$  pour indiquer les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres  $E_1$  et  $E_2$  respectivement, avec  $E_1 < E_2$ ).
- 3) En sachant qu'à l'instant initial  $t=0$  le système se trouve dans l'état  $|1\rangle$ , calculer le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  dans la base  $\{|E_1\rangle, |E_2\rangle\}$  pour  $t > 0$ .
- 4) Calculer les probabilités  $P_1$  et  $P_2$  de trouver le système dans l'état  $|1\rangle$  et dans l'état  $|2\rangle$  respectivement après un temps  $t$ .
- 5) Déterminer la période d'oscillation entre les états  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ .

**Exercice III OSCILLATEUR HARMONIQUE**

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, de fréquence propre  $\omega$  et on se place dans la base des vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien de cet oscillateur. On

rappelle qu'on note par  $|k\rangle$  et  $|j\rangle$  les vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien correspondant respectivement aux valeurs propres  $k$  et  $j$  de l'opérateur nombre.

- 1) Donner l'expression des opérateurs position  $\hat{x}$  et impulsion  $\hat{p}$  en fonction des opérateurs de création et d'annihilation  $\hat{a}^+$  et  $\hat{a}$ . Calculer les éléments de matrice de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  dans la base des vecteurs propres de l'hamiltonien. On rappelle que les éléments de matrices des opérateurs position et impulsion s'écrivent respectivement  $x_{j,k} = \langle j|\hat{x}|k\rangle$  et  $p_{j,k} = \langle j|\hat{p}|k\rangle$ .
- 2) Calculer la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{x}$  ainsi que la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{p}$  pour un état propre de l'opérateur hamiltonien.
- 3) Calculer les éléments de matrice des opérateurs  $\hat{x}^2$  et  $\hat{p}^2$  dans la base des vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien. Montrer que dans un état propre de l'opérateur hamiltonien, les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle sont égales.
- 4) Calculer l'écart quadratique moyen des opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  dans un état propre de l'opérateur hamiltonien. Que dit l'inégalité Heisenberg dans ce cas et, en quelques phrases, qu'est-ce que signifie cette inégalité pour vous ?
- 5) Calculer la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{x}^4$  pour un état propre de l'opérateur hamiltonien en utilisant la relation de fermeture.

#### Exercice IV PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL

Une particule de masse  $\mu$  est dans un potentiel  $V(\vec{r})$ , ou  $\vec{r}$  est la position de la particule dans un référentiel cartésien. Cette particule se trouve dans un état propre d'énergie correspondant à la valeur propre  $E$ . En coordonnées polaires, cet état est décrit par la fonction d'onde

$$\psi_E(r, \theta, \varphi) = A e^{-\frac{r}{a_0}}, \text{ avec } A \text{ et } a_0 \text{ des constantes réelles positives non nulles.}$$

- 1) Expliquer ce que sont le nombre quantique azimutal et le nombre quantique magnétique et donner leurs valeurs pour cet état.
- 2) En supposant que le potentiel s'annule à l'infini, c'est-à-dire  $r \rightarrow +\infty \Rightarrow V(r) \rightarrow 0$ , trouver la valeur propre de l'énergie en prenant l'équation radiale
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} \psi_E(r, \theta, \varphi) = E \psi_E(r, \theta, \varphi)$$
où  $\ell$  est le nombre quantique azimutal.
- 3) Toujours en prenant la même équation radiale, et en partant de la valeur propre de l'énergie  $E$ , déterminer le potentiel  $V(\vec{r})$ .
- 4) A quoi correspond le potentiel  $V(r)$  si  $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e_0^2}$ ,  $e_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$  où  $e$  est la charge de l'électron et  $\epsilon_0$  la permittivité du vide ?

## Exercice V ATOME D'HYDROGÈNE

La fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène est

$$\psi_{1,0,0}(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_0^3}} e^{-\frac{r}{r_0}}, \text{ où } r_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} \text{ est le rayon de Bohr avec } e_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \text{ où } e \text{ est la charge}$$

de l'électron et  $\epsilon_0$  la permittivité du vide.

On rappelle que la condition de normalisation en coordonnées polaires s'écrit

$$\int |\Psi_{n,k,\ell}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi = 1.$$

1) Calculer la densité de probabilité de présence  $P(r)$  de trouver l'électron entre  $r$  et  $r + dr$  et déterminer à quelle distance du noyau elle est maximale.

2) Calculer la valeur moyenne de la distance de l'électron à l'origine.

## Corrigé du Contrôle des Connaissances

### Exercice I SUPERPOSITION D'ÉTATS

1) Par la condition de normalisation on obtient

$$\langle \psi | \psi \rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \Rightarrow \frac{3}{4} + |c_2|^2 = 1 \Rightarrow |c_2|^2 = \frac{1}{4} \Rightarrow c_2 = \frac{e^{i\alpha}}{2}, \alpha \in \mathbf{R}$$

2) Pour la mesure de l'énergie du système dans cet état, on trouve soit  $E_1$  soit  $E_2$ , mais jamais les deux à la fois. La probabilité de trouver la valeur  $E_1$  est  $P_{E_1} = |c_1|^2 = \frac{3}{4}$ , celle de trouver  $E_2$  est  $P_{E_2} = |c_2|^2 = \frac{1}{4}$ .

### Exercice II SYSTÈME À DEUX NIVEAUX

$$1) \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & E_0\sqrt{2} \\ E_0\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

2) Valeurs propres  $E_1 = -E_0, E_2 = 2E_0$ , vecteur propres

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2\rangle, |E_2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|2\rangle. \text{ En inversant ces deux relations, on obtient}$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|E_2\rangle, |2\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}|E_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|E_2\rangle$$

3) À l'instant initial le système est dans l'état  $|1\rangle$ , donc

$$|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|E_2\rangle$$

À un instant  $t > 0$ , la propagation temporelle sur la fonction d'onde donne

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{i\frac{E_0 t}{\hbar}}}{\sqrt{3}}|E_1\rangle + e^{-i\frac{2E_0 t}{\hbar}}\sqrt{\frac{2}{3}}|E_2\rangle = \frac{1}{3}e^{i\frac{E_0 t}{\hbar}}\left[\left(1+2e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}}\right)|1\rangle - \sqrt{2}\left(1-e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}}\right)|2\rangle\right]$$

$$4) P_{|1\rangle}(t) = \frac{1}{9}\left|1+2e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{1}{9}\left[5+4\cos\left(\frac{3E_0 t}{\hbar}\right)\right]$$

$$P_{|2\rangle}(t) = \frac{2}{9}\left|1-e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{4}{9}\left[1-\cos\left(\frac{3E_0 t}{\hbar}\right)\right]$$

$$5) T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi\hbar}{3E_0} = \frac{h}{3E_0}$$

### Exercice III OSCILLATEUR HARMONIQUE

1) En sachant que

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$ ,  $\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$ ,  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ,  $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ , on a

$$x_{j,k} = \langle j|\hat{x}|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle j|(\hat{a} + \hat{a}^+)|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{k}\delta_{k,j+1} + \sqrt{k+1}\delta_{k,j-1}]$$

$$p_{j,k} = \langle j|\hat{p}|k\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\langle j|(\hat{a} - \hat{a}^+)|k\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}[\sqrt{k}\delta_{k,j+1} - \sqrt{k+1}\delta_{k,j-1}]$$

$$2) \langle \hat{x} \rangle_k = \langle k|\hat{x}|k\rangle = 0, \langle \hat{p} \rangle_k = \langle k|\hat{p}|k\rangle = 0$$

$$3) (\hat{x}^2)_{j,k} = \langle j|\hat{x}^2|k\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle j|(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})|k\rangle$$

$$(\hat{p}^2)_{j,k} = \langle j|\hat{p}^2|k\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2}\langle j|(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 - (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}))|k\rangle$$

En sachant que  $\langle j|\hat{a}^2|k\rangle = \sqrt{k}\langle j|\hat{a}^2|k-1\rangle = \sqrt{k(k-1)}\delta_{k,j+2}$ , que

$$\langle j|(\hat{a}^+)^2|k\rangle = \sqrt{k+1}\langle j|\hat{a}^+|k+1\rangle = \sqrt{(k+1)(k+2)}\delta_{k,j-2}$$

$$\text{et que } [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \Rightarrow \langle j|(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})|k\rangle = \langle j|(1 + 2\hat{a}^+\hat{a})|k\rangle = \frac{2}{\hbar\omega}\langle j|\hat{H}|k\rangle = (2k+1)\delta_{j,k}$$

on obtient donc

$$(\hat{x}^2)_{j,k} = \frac{\hbar}{2m\omega}[\sqrt{k(k-1)}\delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)}\delta_{k,j-2} + (2k+1)\delta_{j,k}]$$

$$(\hat{p}^2)_{j,k} = -\frac{\hbar m\omega}{2}[\sqrt{k(k-1)}\delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)}\delta_{k,j-2} - (2k+1)\delta_{j,k}]$$

Les valeurs moyennes dans l'état  $k$  sont

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_k = (\hat{x}^2)_{k,k} = \langle k|\hat{x}^2|k\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2k+1) = \frac{E_k}{m\omega^2}$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_k = (\hat{p}^2)_{k,k} = \langle k|\hat{p}^2|k\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2k+1) = mE_k$$

d'où on remarque que la valeur moyenne de l'énergie cinétique et potentielle sont égales à la moitié de l'énergie de l'état.

$$4) \Delta x_k = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle_k - \langle \hat{x} \rangle_k^2} = \sqrt{\langle k|\hat{x}^2|k\rangle - (\langle k|\hat{x}|k\rangle)^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(2k+1)$$

$$\Delta p_k = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle_k - \langle \hat{p} \rangle_k^2} = \sqrt{\langle k|\hat{p}^2|k\rangle - (\langle k|\hat{p}|k\rangle)^2} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(2k+1)$$

$$\text{donc } \Delta x_k \Delta p_k = \frac{\hbar}{2}(2k+1)$$

On remarque que l'inégalité d'Heisenberg est toujours satisfaite. Pour  $k=0$  on retrouve l'égalité  $\Delta x_0 \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$ , alors que pour tout état excité  $\Delta x_k \Delta p_k > \frac{\hbar}{2}$ . Cette inégalité signifie que

si on mesure l'impulsion ou la position un grand nombre de fois pour cet état quantique (toujours le même), les dispersions des résultats de mesure de position et d'impulsion vérifieront l'inégalité. Dit autrement on ne peut pas créer d'états quantiques dont les dispersions intrinsèques en position et en impulsion sont simultanément aussi petites que l'on veut. Dit autrement si on connaît parfaitement la position après une mesure alors l'impulsion est complètement indéterminée. Dit encore autrement la largeur quadratique de la fonction

d'onde en représentation  $x$  est inversement proportionnelle à la largeur quadratique en représentation  $p$ .

5) En utilisant la relation de fermeture on obtient

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^4 \rangle_j &= \langle j | \hat{x}^4 | j \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} \langle j | \hat{x}^2 | k \rangle \langle k | \hat{x}^2 | j \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} |\langle j | \hat{x}^2 | k \rangle|^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \sum_{k=0}^{+\infty} \left[ \sqrt{k(k-1)}\delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)}\delta_{k,j-2} + (2k+1)\delta_{j,k} \right]^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \left[ j(j-1) + (j+1)(j+2) + (2j+1)^2 \right] = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} [2j^2 + 2j + 1]\end{aligned}$$

#### Exercice IV PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL

1) Les nombres dont il est question sont associés au moment cinétique. Le nombre quantique azimutal  $\ell$  donne la valeur propre  $\ell(\ell+1)\hbar^2$  de l'état propre du carré du moment cinétique  $\hat{L}^2$ . Le nombre quantique magnétique  $m$  donne la valeur propre de l'état propre de la projection du moment cinétique  $\hat{L}_z$  le long de l'axe  $z$ . Donc on a  $\hat{L}^2$ , qui est opérateur agissant sur  $\theta$  et  $\varphi$  (voir le cours page 92) et  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ . La fonction d'onde donnée dans le texte, qui ne dépend ni de  $\theta$  ni de  $\varphi$ , est un état propre de chacune de ces observables avec la valeur propre  $\ell = 0$  pour  $\hat{L}^2$  et  $m = 0$  pour  $\hat{L}_z$ .

On peut aussi remarquer tout simplement que comme la fonction d'onde ne dépend pas des angles polaires, mais uniquement du module de la distance, on peut en déduire que  $\ell = m = 0$ .

$$2) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{r}{a_0}} = -\frac{1}{a_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} = -\frac{1}{a_0} \frac{1}{r^2} \left[ 2r - \frac{1}{a_0} r^2 \right] e^{-\frac{r}{a_0}} = \left[ -\frac{2}{a_0} \frac{1}{r} + \frac{1}{a_0^2} \right] e^{-\frac{r}{a_0}}$$

En insérant ce résultat dans l'équation radiale, on obtient

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2}{a_0} \frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{a_0^2} + V(r) = E$$

$$\text{Quand } r \rightarrow +\infty \Rightarrow V(r) \rightarrow 0, \text{ donc } E = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{a_0^2}$$

3) En introduisant la valeur de l'énergie propre dans l'équation radiale, nous trouvons

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0} \frac{1}{r}$$

4) Si  $a_0$  est le rayon de Bohr, alors le potentiel coïncide avec le potentiel de l'atome d'hydrogène

$$V(r) = -\frac{e_0^2}{r}$$

### Exercice V ATOME D'HYDROGÈNE

Pour obtenir la probabilité de trouver l'électron à une distance donnée, il faut intégrer sur tout l'angle solide, donc

$$1) P(r)dr = \int \sin\theta d\theta d\varphi |\psi_{1,0,0}|^2 r^2 dr = 4\pi |\psi_{1,0,0}|^2 r^2 dr = \frac{4r^2}{r_0^3} e^{-\frac{2r}{r_0}} dr$$

La probabilité maximale est donnée par  $\frac{dP(r)}{dr} = \frac{4}{r_0^3} \left[ 2r - 2\frac{r^2}{r_0} \right] e^{-\frac{2r}{r_0}} = 0 \Rightarrow r = r_0$

$$2) \langle r \rangle = \int_0^{+\infty} P(r) r dr = \frac{4}{r_0^3} \int_0^{+\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{r_0}} dr = \frac{r_0}{4} \int_0^{+\infty} \alpha^3 e^{-\alpha} d\alpha = \frac{3}{2} r_0$$

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

Les notations sont celles du cours.

%%

**Exercice I**

L'état quantique d'une particule à une dimension est décrit par la fonction d'onde suivante

$$\psi(x) = C \exp \left[ \frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right]$$

où les constantes  $x_0, a$  et  $p_0$  sont réelles et supposées connues. On rappelle que  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = \sqrt{\pi}a$

- a) Donner l'expression de la constante  $C$  en fonction de autres constantes.
- b) Déterminer la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{x}$  dans cet état.
- c) Déterminer la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{p}_x$  dans cet état.

**Exercice II**

On considère l'Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \hat{V}(x)$

Démontrer la relation suivante

$$\hat{p}_x = -i\frac{m}{\hbar} \left[ \hat{x}, \hat{H} \right]$$



### Exercice III

Considérons une molécule de carbone 60, dite  $C_{60}$ , qui a été la première molécule de fullerène à être découverte. Elle a une structure sphérique, analogue à celle d'un ballon de football (Figure 1). Cette molécule est modélisée par un puits carré avec des hauteurs de barrières infinies, à symétrie centrale, qui confine le mouvement des électrons dans une couche mince sphérique  $r_0 - a/2 < r < r_0 + a/2$ . Donc, le potentiel auquel est soumis chaque électron de masse  $m$  est  $V(r) = 0$  si  $r_0 - a/2 < r < r_0 + a/2$  et  $V(r) = \infty$  ailleurs.

a) En partant de la symétrie du problème, montrer que les trois observables  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$  et  $\hat{L}^2$  commutent. Commenter le résultat.

b) On rappelle que le Laplacien peut s'exprimer par:  $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$ . Trouver l'équation concernant la partie radiale de la fonction d'onde d'un état propre. Introduire le potentiel effectif  $V_{eff}(r)$  et donner son expression.

c) Calculer les valeurs propres de l'énergie en faisant l'approximation  $a \ll r_0$  (on peut alors faire l'approximation que  $V_{eff}(r)$  est un puits plat, et que  $V_{eff}(r) \simeq V_{eff}(r_0)$ ). Exprimer les valeurs propres de l'énergie en fonction des nombres quantiques  $n$  et  $l$  ainsi que de  $r_0$ ,  $a$ ,  $E_I = \frac{\hbar^2}{2ma_1^2}$  et  $a_1$ , où  $E_I$  est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène et  $a_1$  est le rayon de Bohr.



Figure 1: Molécule de  $C_{60}$ .

### Exercice IV

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, dont l'énergie potentielle s'écrit

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$$

À l'instant  $t = 0$ , cet oscillateur se trouve dans un état qui est déterminé par les conditions suivantes:

A) Chaque mesure de l'énergie  $E$ , donne des valeurs qui satisfont la relation  $\hbar\omega < E < 3\hbar\omega$

B) La valeur moyenne de l'énergie mesurée est  $\langle E \rangle = \frac{11}{6}\hbar\omega$

C) La valeur moyenne de la position est  $\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{4\hbar}{9m\omega}}$

Identifier l'état quantique de cet oscillateur harmonique, dans la base des vecteurs propres du Hamiltonien.

### Exercice V

On considère un oscillateur harmonique en deux dimensions dans le plan  $(x, y)$ , dont l'Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega (\hat{q}_x^2 + \hat{q}_y^2)$$

a) Ecrire les niveaux d'énergie ainsi que leur dégénérescence.

b) Ecrire l'Hamiltonien en utilisant les opérateurs.

$$\hat{\eta}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x + i\hat{a}_y) \text{ et } \hat{\eta}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x - i\hat{a}_y)$$

où les opérateurs  $\hat{a}_x$  et  $\hat{a}_y$  sont définis par

$$\hat{a}_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}_x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \text{ et } \hat{a}_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}_y + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y$$

c) Ecrire l'expression de l'opérateur moment orbital  $\hat{L}_z$  pour cet oscillateur harmonique bidimensionnel, en fonction des opérateurs  $\hat{a}_x$  et  $\hat{a}_y$  ainsi que de leurs adjoints.

d) Ecrire la matrice qui représente  $\hat{L}$  dans une base de vecteurs propres du Hamiltonien.

### Exercice VI

Considérons une particule de masse  $m$  et de charge  $q$  et sans spin dans un champ magnétique. On se place dans l'espace à trois dimensions, et on considère la particule confinée dans le plan  $(x, y)$ , donc  $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, 0)$ . Nous savons qu'un lagrangien possible dans ce cas est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 + q\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$$

où  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  est le potentiel vecteur.

a) Trouver l'expression des trois composantes suivant  $x, y$  et  $z$  de l'impulsion  $\vec{p}$  classique. Est-ce que l'impulsion  $\vec{p}$  classique coïncide avec la quantité de mouvement classique  $m\dot{\vec{r}}$ ?

b) Ecrire le Hamiltonien classique et en déduire le Hamiltonien quantique de la particule.

c) On travaille maintenant avec l'expression quantique du Hamiltonien. Nous choisissons ici la jauge de Coulomb, et on suppose que  $\vec{A}(\hat{r}, t)$  prend la forme

$$\vec{A}(\hat{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ B\hat{x} \\ 0 \end{pmatrix}$$

où  $B$  est un scalaire associé au champ magnétique. Calculer la valeur des trois commutateurs  $[\hat{p}_i, A_i], \forall i \in \{x, y, z\}$ . Expliquer pourquoi on peut chercher des états propres communs à  $H$  et  $\hat{p}_y$ .

d) Pour simplicité, on suppose qu'on connaît déjà les valeurs propres de  $\hat{p}_y$ . On posera donc les valeurs propres de  $\hat{p}_y$  égal à  $\hbar k_y$ . Calculer les valeurs propres du Hamiltonien.

**PHYSIQUE QUANTIQUE***Corrigé du contrôle des connaissances 2012***Exercice I**

L'état quantique d'une particule est décrit par la fonction d'onde suivante

$$\psi(x) = C \exp \left[ \frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} \right]$$

a) Trouver la valeur de la constante  $C$ .

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx = |C|^2 \sqrt{\pi} a = 1 \Rightarrow C = \pi^{-1/4} a^{-1/2} e^{i\phi}$$

b) Déterminer la valeur moyenne de l'opérateur position  $\hat{x}$ .

$$\langle \psi | x | \psi \rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx = x_0$$

c) Déterminer la valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{p}_x$ .

$$\langle \psi | p_x | \psi \rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ \frac{-ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} \right] \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \exp \left[ \frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} \right] dx = p_0$$

**Exercice II**

On considère l'Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + V(x)$

Démontrer la relation suivante

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -i\frac{m}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] \\ [\hat{x}, \hat{H}] &= [\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}] + [\hat{x}, V(x)] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}] = \frac{1}{2m} (\hat{x} \hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 \hat{x}) = \frac{1}{2m} (\hat{x} \hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 \hat{x} + \hat{p}_x \hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} \hat{p}_x) \\ &= \frac{1}{2m} ([\hat{x}, \hat{p}_x] \hat{p}_x + \hat{p}_x [\hat{x}, \hat{p}_x]) = \frac{i\hbar \hat{p}_x}{m} \end{aligned}$$

**Exercice III**

Considérons une molécule de carbone 60, dite C60, qui a été la première molécule de fullerène à être découverte. Elle a une structure sphérique, analogue à celle d'un ballon de football (Figure 1). Cette molécule est modélisée par un puits carré avec des hauteurs de barrières infinies, à symétrie centrale, qui confine le mouvement des électrons dans une couche mince sphérique  $r_0 - a/2 < r < r_0 + a/2$ . Donc, le potentiel

auquel est soumis chaque électron de masse  $m$  est  $V(r) = 0$  si  $r_0 - a/2 < r < r_0 + a/2$  et  $V(r) = \infty$  ailleurs.

a) En partant de la symétrie du problème, montrer que les trois observable  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$  et  $\hat{L}^2$  commutent. Commenter le résultat.

Il s'agit d'un potentiel central, donc invariant par rotation. Cette invariance implique que  $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$  ainsi que  $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$ . On peut donc trouver une base commune aux opérateurs  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$  et  $\hat{L}^2$ . Par analogie avec l'atome d'hydrogène, nous pouvons écrire  $|n, l, m\rangle = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$ .

b) On rappelle que le Laplacien peut s'exprimer par:  $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$ . Trouver l'équation concernant la partie radiale de la fonction d'onde d'un état propre. Introduire le potentiel effectif  $V_{eff}(r)$  et donner son expression.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(r) \psi = E \psi$$

$$\text{donc} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) \psi + V(r) \psi = E \psi$$

Dans la zone où  $V(r) = 0$ , on peut réécrire l'équation  $\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) \psi = E \psi$

Il s'agit d'un Hamiltonien qui peut être vu comme celui d'une particule soumise à un potentiel effective  $V_{eff} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$ . Dans la zone où  $V(r) = 0$ , nous pouvons remplacer l'opérateur  $\hat{L}^2$  par sa valeur propre  $\hbar^2 l(l+1)$ , donc  $\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R_{n,l}(r) = E R_{n,l}(r)$

c) Calculer les valeurs propres de l'énergie en faisant l'approximation  $a \ll r_0$  (on peut alors faire l'approximation que  $V_{eff}(r)$  est un puits plat). Exprimer les valeurs propres de l'énergie en fonction de  $r_0$ ,  $a$ ,  $E_I = \frac{\hbar^2}{2ma_1}$  et  $a_1$ , où  $E_I$  est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène et  $a_1$  est le rayon de Bohr.

La condition  $a \ll r_0$  implique que  $V_{eff} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \simeq \frac{\hat{L}^2}{2mr_0^2}$ . En posant, comme pour l'atome d'hydrogène,  $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ , l'équation se réécrit

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2} \right) \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r} \text{ et donc } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2} u(r) = E u(r)$$

que nous pouvons aussi écrire  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + V_{eff} u(r) = E u(r)$

et donc  $\frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{eff}) u(r) = 0$ . On peut introduire la fréquence spatiale

$k = \frac{\sqrt{2m(E-V_{eff})}}{\hbar}$  et la solution s'écrit  $u(r) = u_0 \sin(k(r - r_0 + a/2))$ . Les conditions limites donnent  $u(r_0 + a/2) = u_0 \sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$ . En combinant cette equation avec la définition de  $k$ , nous avons  $\frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{2m(E-V_{eff})}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{2n^2\pi^2}{2ma^2} + \frac{\hbar l(l+1)}{2mr_0^2} \Rightarrow E = E_I \left[ \frac{\pi^2 a_1^2}{a^2} + \frac{a_1^2}{r_0^2} l(l+1) \right]$ .



Figure 1: Molecule de  $C_{60}$ .

#### Exercice IV

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, dont l'énergie potentielle s'écrit

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$$

A l'instant  $t = 0$ , cette oscillateur se trouve dans un état qui est déterminé par les conditions suivantes:

A) Chaque mesure de l'énergie  $E$ , donne des valeurs qui satisfont la relation  $\hbar\omega < E < 3\hbar\omega$

B) La valeur moyenne de l'énergie mesurée est  $\langle E \rangle = \frac{11}{6} \hbar\omega$

C) La valeur moyenne de la position est  $\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{4\hbar}{9m\omega}}$

Identifier l'état quantique de cette oscillateur harmonique, dans la base des vecteurs propres du Hamiltonien.

{ En sachant que  $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ , les valeurs possibles d'énergie mesurées sont  $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$  et  $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ . Donc l'état du système doit être une combinaison linéaire de états  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ , et donc  $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$  avec la condition  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . L'énergie moyenne est donnée par  $\langle E \rangle_\psi = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = \frac{1}{2}\hbar\omega (3|c_1|^2 + 5|c_2|^2) = \frac{11}{6}\hbar\omega$ . Les deux dernières conditions impliquent que  $|c_1|^2 = 2/3$  et  $|c_2|^2 = 1/3$ , d'où  $c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}e^{i\alpha}$  et  $c_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}e^{i\delta}$ .

La valeur moyenne de la position dans cette état s'écrit  
 $\langle x \rangle_\psi = (c_1^*\langle 1| + c_2^*\langle 2|) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)(c_1|1\rangle + c_2|2\rangle) =$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{2}c_1^*c_2 + \sqrt{2}c_2^*c_1) = -\sqrt{\frac{4\hbar}{9m\omega}}$$

$$\text{mais } \sqrt{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(c_1^*c_2 + c_2^*c_1) = -\sqrt{\frac{4\hbar}{9m\omega}} \Rightarrow c_1^*c_2 + c_2^*c_1 = -\frac{2}{3}$$

En utilisant les expressions de  $c_1$  et  $c_2$ , on trouve  
 $c_1^*c_2 + c_2^*c_1 = \frac{2\sqrt{2}}{3} \cos(\delta - \alpha) = -\frac{2}{3} \Rightarrow \delta - \alpha = \pm\frac{3}{4}\pi$ . On peut donc choisir  $\alpha = 0$  et  $\delta = \frac{3}{4}\pi$  d'où  $c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}$  et  $c_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}e^{i\frac{3}{4}\pi}$

L'état cherché est donc  $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}e^{i\frac{3}{4}\pi}|2\rangle$

### Exercice V

On considère un oscillateur harmonique en deux dimensions dans le plan  $(x, y)$ , dont l'Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega (\hat{q}_x^2 + \hat{q}_y^2)$$

a) Ecrire les niveaux d'énergie ainsi que leur dégénérescence.

$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y = \hbar\omega(\hat{a}_x^+\hat{a}_x + \hat{a}_y^+\hat{a}_y + 1)$  Les valeurs propres sont donc  $E_n = (n+1)\hbar\omega$  avec  $n = 0, 1, 2, \dots$  auxquels correspondent les états propres  $|n_x, n_y\rangle$  avec  $n_x + n_y = n$ , que nous pouvons aussi réécrire dans la forme  $|k, n-k\rangle$  avec  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ . Donc,  $E_n$  est dégénéré  $n+1$  fois.

b) Ecrire l'Hamiltonien en utilisant les opérateurs.

$$\hat{\eta}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x + i\hat{a}_y) \text{ et } \hat{\eta}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - i\hat{a}_y)$$

où les opérateurs de création et d'annihilation sont définis par

$$\hat{a}_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}_x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \text{ et } \hat{a}_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}_y + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y$$

Par la définition de  $\hat{\eta}_+$  et  $\hat{\eta}_-$  on a

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\eta}_+ + \hat{\eta}_-) \text{ et } \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\eta}_+ - \hat{\eta}_-) \text{ et donc } \hat{H} = \hbar\omega(\hat{\eta}_+^\dagger\hat{\eta}_- + \hat{\eta}_-^\dagger\hat{\eta}_+ + 1)$$

c) Ecrire l'expression de l'opérateur moment orbital  $\hat{L}$  pour cette oscillateur harmonique bidimensionnel, en fonction des opérateurs  $\hat{a}_x$  et  $\hat{a}_y$  ainsi que de leurs adjoints.

Ce système a une seule composante non nulle du moment angulaire suivant l'axe  $z$ . On a donc  $\hat{L} = \hat{q}_x\hat{p}_y - \hat{q}_y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{2i} [(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y - \hat{a}_y^\dagger) - (\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)(\hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger)] = \frac{\hbar}{2i} [\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y - \hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger]$ .

d) Ecrire la matrice qui représente  $\hat{L}$  dans une base de vecteurs propres du Hamiltonien.

Dans la base des vecteurs propres de l'Hamiltonien, on a

$$\langle k', n - k' | \hat{L} | k, n - k \rangle = \delta_{k', k+1} \sqrt{(k+1)(n-k)} - \delta_{k', k+1} \sqrt{k(n-k+1)}$$



## Exercice VI

Considérons une particule de masse  $m$  et de charge  $q$  et sans spin dans un champ magnétique. On se place dans l'espace à trois dimensions, et on considère la particule confinée dans le plan  $(x, y)$ , donc  $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, 0)$ . Nous savons qu'un lagrangien possible dans ce cas est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 + q\vec{\dot{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$$

où  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  est le potentiel vecteur.

a) Trouver l'expression des trois composantes suivant  $x, y$  et  $z$  de l'impulsion  $\vec{p}$  classique. Est-ce que l'impulsion  $\vec{p}$  classique coïncide avec la quantité de mouvement classique  $m\vec{\dot{r}}$  ?

La définition de moment conjugué est

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}, p_y = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}}, p_z = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}} \quad (1)$$

En utilisant l'expression du Lagrangien dans les équations, nous trouvons

$$\vec{p} = m\vec{\dot{r}} + q\vec{A}(\vec{r}, t) \quad (2)$$

qui peut être inversé pour obtenir

$$\vec{\dot{r}} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t))}{m} \quad (3)$$

Il est important de remarquer ici que l'impulsion  $\vec{p}$  ne coïncide pas avec la quantité de mouvement  $m\vec{\dot{r}}$ .

b) Ecrire le Hamiltonien classique et quantique de la particule.

En partant de l'expression de la quantité de mouvement, l'Hamiltonien classique s'écrit donc

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 + q\phi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

Le passage à l'Hamiltonien quantique s'effectue en remplaçant les grandeurs classiques position et impulsion par les opérateurs position et impulsion. L'Hamiltonien quantique s'écrit donc

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - q\vec{A}(\hat{r}, t))^2 + q\phi(\hat{r}, t) \quad (5)$$

Il faut aussi remarquer que le potentiel vectoriel  $\vec{A}(\hat{r}, t)$  est une fonction de l'opérateur position.

c) Nous choisissons ici une jauge qui nous permet de simplifier les calculs, et on pose

$$\vec{A}(\hat{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ B\hat{x} \\ 0 \end{pmatrix}$$

où B est un scalaire associé au champ magnétique. Calculer la valeur des trois commutateurs  $[\hat{p}_i, A_i], \forall i \in \{x, y, z\}$ .

calculons  $[\hat{p}, \vec{A}]$ , en l'appliquant à une fonction d'onde quelconque  $\varphi(\vec{r})$ .

$$[\hat{p}, \vec{A}]\varphi(\vec{r}) = (\hat{p}\vec{A} - \vec{A}\hat{p})\varphi(\vec{r}) = -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\varphi(\vec{r})) - \vec{A}(\vec{\nabla} \cdot \varphi(\vec{r}))) = -i\hbar\varphi(\vec{r})\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$$

donc

$$[\hat{p}, \vec{A}] = -i\hbar\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$$

Il en suit que, comme dans notre cas la divergence de  $\vec{A}$  est nulle,

$$[\hat{p}_i, A_i] = 0, \forall i \in \{x, y, z\}$$

d) Pour simplicité, on suppose qu'on connaît déjà les valeurs propres de  $\hat{p}_x$ . On posera donc les valeurs propres de  $\hat{p}_x$  égal à  $\hbar k_y$ . Calculer les valeur propre du Hamiltonien.

Nous pouvons développer l'Hamiltonien en de la façon suivante

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - q\vec{A}(\hat{r}, t))^2 = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + q^2\vec{A}^2 - 2q\vec{A} \cdot \hat{p}) = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + q^2\vec{A}^2 - 2q\hat{p}_y\hat{x}) \quad (6)$$

En combinant les équations, nous trouvons

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m}(\hat{p}_y - qB\hat{x})^2 \quad (7)$$

Notre choix de jauge implique l'absence de l'opérateur  $\hat{y}$  dans l'Hamiltonien, donc  $[\hat{p}_y, \hat{H}] = 0$ . Il en suit que ces deux opérateurs auront une base commune de vecteurs propres. Donc, dans l'équation, nous pouvons remplacer  $\hat{p}_y$  par ses valeurs propres  $\hbar k_y$ .

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m}(\hbar k_y - qB\hat{x})^2 \quad (8)$$

En définissant la fréquence de cyclotron  $\omega_c = qB/m$ , nous pouvons réécrire l'Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(\hat{x} - \frac{\hbar k_y}{m\omega_c}\right)^2 \quad (9)$$

Nous reconnaissons ici l'Hamiltonien de oscillateur harmonique, avec les coordonnées spatiales décalé de la quantité  $x_0 = \frac{\hbar k_y}{m\omega_c}$ .

Les valeurs propres de l'énergie sont

$$E_n = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) \text{ avec } n \geq 0 \quad (10)$$

Donc, les valeurs propres de l'énergie d'une particule sans spin dans un champ magnétique sont équivalent à ceux d'un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega_c = qB/m$  et de décalé spatialement de  $x_0 = \frac{\hbar k_y}{m\omega_c}$ .

Comme  $\hat{p}_y$  commute avec l'Hamiltonien, les fonctions propres seront factorisées

$$\psi_n(x, y) = e^{ik_y y} \phi_n(x - x_0) \quad (11)$$

où  $\phi_n(x - x_0)$  sont les fonctions propres de l'oscillateur harmonique.

**PHYSIQUE QUANTIQUE***Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.**Les réponses à certaines questions sont très simples.**Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.**Les exercices sont indépendants les uns des autres.**Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.****Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

Les notations sont celles du cours.

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

*Rappels utiles :*

Dans le formalisme de l'oscillateur harmonique les opérateurs annihilation et création sont définis par :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x, \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x$$

On rappelle la valeurs de ces deux intégrales

$$\int_0^\pi \sin(x)\cos(2x)dx = -2/3, \quad \int_0^\pi \sin(2x)\cos(x)dx = 4/3$$

%%%

**Exercice I**

Un oscillateur harmonique unidimensionnel de fréquence fondamentale  $\omega$  se trouve dans son état fondamental d'énergie décrit par la fonction d'onde :

$$\psi_0(x, t) = \phi_0(x)e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2\frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}}$$

On indiquera par  $\hat{x}$  et  $\hat{p}_x$  les observables position et impulsion, respectivement.

A) Calculer la densité de probabilité de présence dans l'espace  $\rho_0(\vec{r}, t)$  lorsque l'oscillateur harmonique est dans cet état.

B) Donner l'expression de la position moyenne  $\langle \hat{x} \rangle$  de l'oscillateur dans cet état et calculer sa valeur.

C) Donner l'expression de l'impulsion moyenne  $\langle \hat{p} \rangle$  de l'oscillateur dans cet état et calculer sa valeur.

D) Rappeler quel est le hamiltonien  $\hat{H}$  du système et quelle est l'énergie de l'oscillateur harmonique dans cet état. Pourquoi physiquement cette énergie est-elle non nulle ?

L'oscillateur harmonique est maintenant dans un état d'énergie quelconque.

E) Pouvez-vous justifier que, dans un tel état, la position moyenne de l'oscillateur n'oscille pas dans le temps ?

### Exercice II

Le même oscillateur harmonique de l'exercice précédant se trouve maintenant dans un état qui est une superposition des deux premiers états d'énergie, décrit par la fonction d'onde :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t)$$

La fonction d'onde de l'état fondamental  $\psi_0(x, t)$  est donnée dans l'exercice précédent.

A) Calculer la fonction d'onde correspondante à l'état excité  $\psi_1(x, t)$ , en explicitant la dépendance en  $x$  et  $t$ .

B) Pour l'oscillateur représenté par la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  quelle est la probabilité de trouver, lors d'une mesure de l'énergie, la valeur  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$  ? Comme indiqué dans l'en-tête du sujet justifier les étapes de votre raisonnement.

C) Dans ce même état quantique quelle est la probabilité de trouver, lors d'une mesure de l'énergie, la valeur  $E = \hbar\omega$  ?

D) Dans ce même état quantique calculer la densité  $\rho(\vec{r}, t)$  de probabilité de présence dans l'espace.

E) Le système oscille-t-il dans le temps ? Comparer cette réponse avec la réponse E de l'exercice précédent et détailler en l'expliquant où est la différence.

### Exercice III

On considère un système quantique à deux niveaux d'énergie possibles  $E_1$  et  $E_2$ , qui sont donc valeurs propres de l'observable hamiltonien  $\widehat{H}_0$ . On indiquera les vecteurs propres correspondant par  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , respectivement. Autrement dit

$$\widehat{H}_0 |\psi_1\rangle = E_1 |\psi_1\rangle$$

$$\widehat{H}_0 |\psi_2\rangle = E_2 |\psi_2\rangle$$

$$\text{avec } \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \delta_{i,j}$$

A) Ecrire la représentation matricielle du hamiltonien  $\widehat{H}_0$  dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ .

On introduit une perturbation à ce système, dont l'effet est de modifier l'hamiltonien en  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}$ , avec dans cette même base :

$$\widehat{W} = \begin{pmatrix} 0 & w \\ w & 0 \end{pmatrix}$$

B) déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres du hamiltonien  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}$ .

C) On sait qu'à l'instant  $t = 0$ , le système se trouve dans l'état  $|\psi_1\rangle$ . Calculer la probabilité de trouver le système dans l'état  $|\psi_2\rangle$  après un temps arbitraire  $t$ .

### Exercice IV

Une particule est contrainte à se déplacer sur un segment de longueur  $L$ , autrement dit elle est dans un puits de potentiel quantique de longueur  $L$  et de hauteur infinie. A l'instant  $t = 0$ , la particule se trouve dans un état dont la mesure d'énergie ne donne toujours, avec la *même* probabilité, que *deux* valeurs : la valeur  $E_1$  correspondant au niveau fondamental et la valeur  $E_2$  correspondant au premier niveau excité.

A) Rappeler d'abord quelles sont les fonctions d'onde des états stationnaires et les énergies propres de ce puits quantique.

B) En déduire l'expression de la fonction d'onde normalisée de la particule à l'instant initial (qui va contenir deux phases arbitraires, dont une peut être mise égal

à zéro et l'autre sera à déterminer).

C) Déterminer le terme de phase en sachant qu'à l'instant  $t = 0$  la valeur moyenne de l'opérateur impulsion est  $\langle \hat{p} \rangle = \frac{4}{3} \frac{\hbar}{L}$ . (On rappelle que la valeur moyenne de l'opérateur impulsion dans un état propre de l'énergie est égal à zéro dans ce cas car il s'agit d'un potentiel symétrique)

D) Déterminer à quel instant  $t > 0$  la valeur moyenne de l'opérateur impulsion vaut pour la première fois zéro.

### Exercice V

On considère un système quantique avec spin entier  $s = 1$ , et on néglige tous les autres degrés de liberté du système.

A) Quelles sont les valeurs possibles pour la mesure de  $\hat{S}_z$ , projection du moment cinétique de spin le long de  $z$  (on notera ces valeurs  $m_s$ ) ?

B) Calculer les trois matrices  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base de vecteurs propres de la composante  $\hat{S}_z$  du spin.

C) On suppose que le système est dans un état propre de  $\hat{S}_z$ . Sans effectuer de calcul, donner en le justifiant le nombre de taches observées pour ce système lors d'une mesure du spin le long de l'axe  $y$  avec un appareil de Stern et Gerlach.

### Exercice VI

On effectue une mesure avec un appareil type Stern et Gerlach sur un système quantique inconnu. La mesure selon l'axe  $z$  donne 4 taches espacées symétriquement et de même intensité comme dans la figure 1. Que peut-on dire sur l'état de ce système quantique (rédiger en détaillant et justifiant) ?

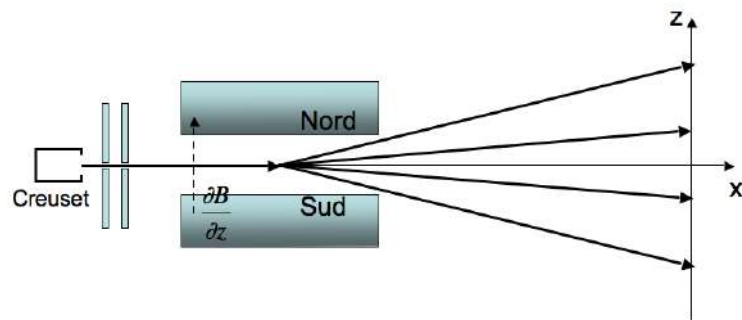


Figure 1: Expérience type Stern et Gerlach sur un système à déterminer.



**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

Les notations sont celles du cours.

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

*Rappels utiles :*

Dans le formalisme de l'oscillateur harmonique les opérateurs annihilation et création sont définis par :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x, \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x$$

On rappelle la valeurs de ces deux intégrales

$$\int_0^\pi \sin(x)\cos(2x)dx = -2/3, \quad \int_0^\pi \sin(2x)\cos(x)dx = 4/3$$

%%%

**Exercice I**

Un oscillateur harmonique unidimensionnel de fréquence fondamentale  $\omega$  se trouve dans son état fondamental d'énergie décrit par la fonction d'onde :

$$\psi_0(x, t) = \phi_0(x)e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}}$$

On indiquera par  $\hat{x}$  et  $\hat{p}_x$  les observables position et impulsion, respectivement.

A) Calculer la densité de probabilité de présence dans l'espace  $\rho_0(\vec{r}, t)$  lorsque l'oscillateur harmonique est dans cet état.

*Réponse* La densité de probabilité  $\rho_0(\vec{r}, t)$  est donnée par le module carré de la fonctions d'onde. Donc

$$\rho_0(\vec{r}, t) = |\psi_0(x, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-x^2 \frac{m\omega}{\hbar}}$$

B) Donner l'expression de la position moyenne  $\langle \hat{x} \rangle$  de l'oscillateur dans cet état et calculer sa valeur.

*Réponse* La position moyenne  $\langle \hat{x} \rangle$  de l'opérateur position est donnée par le produit scalaire

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x, t) \hat{x} \psi_0(x, t) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{\frac{iE_0 t}{\hbar}} x \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} dx = \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2 \frac{m\omega}{\hbar}} dx = 0 \end{aligned}$$

Pour le dernier passage nous avons utilisé le fait que l'intégrand est un produit d'une fonction paire avec une fonction impaire. Le produit étant une fonction impaire, l'intégrale entre  $-\infty$  et  $\infty$  vaut zéro.

C) Donner l'expression de l'impulsion moyenne  $\langle \hat{p} \rangle$  de l'oscillateur dans cet état et calculer sa valeur.

*Réponse* La position moyenne  $\langle \hat{p} \rangle$  de l'opérateur impulsion  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  est donnée par le produit scalaire

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{p} | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_0(x, t) dx = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{\frac{iE_0 t}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} dx = \\ &= -i\hbar \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{\frac{iE_0 t}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}}\right) dx = \\ &= -i\hbar \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} \left(-x \frac{m\omega}{\hbar} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}}\right) dx = \\ &= i\hbar \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{m\omega}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2 \frac{m\omega}{\hbar}} dx = 0 \end{aligned}$$

Pour le dernier passage nous avons utilisé le fait que l'intégrand est un produit d'une fonction paire avec une fonction impaire. Le produit étant une fonction impaire, l'intégrale entre  $-\infty$  et  $\infty$  vaut zéro.

D) Rappeler quel est le hamiltonien  $\hat{H}$  du système et quelle est l'énergie de l'oscillateur harmonique dans cet état. Pourquoi physiquement cette énergie est-elle non nulle ?

*Réponse* Le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

où  $\hat{N}$  est l'opérateur nombre. Les niveaux d'énergie sont donc

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \text{ avec } n \text{ entier positif}$$

Donc, comme dans ce cas l'oscillateur harmonique est dans l'état fondamental, l'énergie s'écrit

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Nous remarquons que l'état fondamental de l'oscillateur harmonique n'est pas égale à zéro. Cela peut être vu comme une conséquence des relations d'incertitudes de Heisenberg, qui impliquent une délocalisation dans l'espace des positions et des impulsions.

L'oscillateur harmonique est maintenant dans un état d'énergie quelconque.

*E)* Pouvez-vous justifier que, dans un tel état, la position moyenne de l'oscillateur n'oscille pas dans le temps ?

*Réponse* Nous avons déjà calculé la valeur moyenne de l'opérateur position dans cet état, et nous avons vu qu'elle vaut zéro. Donc, comme la valeur moyenne ne change pas en fonction du temps, l'oscillateur harmonique n'oscille pas. Cela est toujours vrai dans le cas d'un état stationnaire, où l'énergie est bien définie.

### Exercice II

Le même oscillateur harmonique de l'exercice précédant se trouve maintenant dans un état qui est une superposition des deux premiers états d'énergie, décrit par la fonction d'onde :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t)$$

La fonction d'onde de l'état fondamental  $\psi_0(x, t)$  est donnée dans l'exercice précédent.

*A)* Calculer la fonction d'onde correspondante à l'état excité  $\psi_1(x, t)$ , en explicitant la dépendance en  $x$  et  $t$ .

*Réponse* La fonction d'onde correspondante au premier état excité est

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}$$

où la partie spatiale se calcule facilement en appliquant l'opérateur de création à la partie spatiale de l'état fondamental, ce qui donne

$$|\phi_1\rangle = \hat{a}^+ |\phi_0\rangle = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right) |\phi_0\rangle$$

donc

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi_0(x) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi_0(x) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right] \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/4}}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} x e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \frac{\partial}{\partial x} e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/4}}} \left[ \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} x e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} + \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{-1/4} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right) x e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/4}}} \left[ \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} + \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \right] x e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} x e^{-x^2 \frac{m\omega}{2\hbar}} \end{aligned}$$

B) Pour l'oscillateur représenté par la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  quelle est la probabilité de trouver, lors d'une mesure de l'énergie, la valeur  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$  ? Comme indiqué dans l'en-tête du sujet justifier les étapes de votre raisonnement.

*Réponse* Pour qu'une mesure de l'énergie donne la valeur  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ , il faut que lors de la mesure le système soit projeté dans l'état  $n = 1$ , donc le premier état excité. La probabilité de trouver le système dans l'état  $n = 1$  est donnée par le module carré de la composante de décomposition correspondante à  $\psi_1(x, t)$ , qui dans ce cas vaut  $2/3$ . Donc, la probabilité de trouver la valeur  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$  lors d'une mesure de l'énergie est  $2/3$ .

C) Dans ce même état quantique quelle est la probabilité de trouver, lors d'une mesure de l'énergie, la valeur  $E = \hbar\omega$  ?

Il n'y a aucune valeur de  $n$  tel que l'énergie soit  $E = \hbar\omega$ . La probabilité demandée vaut donc zéro.

D) Dans ce même état quantique calculer la densité  $\rho(\vec{r}, t)$  de probabilité de présence dans l'espace.

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{r}, t) &= \left| \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t) \right|^2 = \\
&= \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t) \right)^* \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t) \right) = \\
&= \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0^*(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1^*(x, t) \right) \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0(x, t) + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x, t) \right) = \\
&= \frac{1}{3} |\psi_0(x, t)|^2 + \frac{2}{3} |\psi_1(x, t)|^2 + \frac{\sqrt{2}}{3} [\psi_0^*(x, t)\psi_1(x, t) + \psi_0(x, t)\psi_1^*(x, t)] = \\
&= \frac{1}{3}\phi_0^2(x) + \frac{2}{3}\phi_1^2(x) + \frac{\sqrt{2}}{3} \left[ \phi_0(x)\phi_1(x) \left( e^{\frac{i(E_1-E_0)t}{\hbar}} + e^{-\frac{i(E_1-E_0)t}{\hbar}} \right) \right] = \\
&= \frac{1}{3}\phi_0^2(x) + \frac{2}{3}\phi_1^2(x) + \frac{2\sqrt{2}}{3}\phi_0(x)\phi_1(x) \cos\left(\frac{(E_1-E_0)t}{\hbar}\right)
\end{aligned}$$

E) Le système oscille-t-il dans le temps ? Comparer cette réponse avec la réponse E de l'exercice précédent et détailler en l'expliquant où est la différence.

*Réponse* La distribution de probabilité de présence dans l'espace est modulée dans le temps à la fréquence  $\frac{(E_1-E_0)}{\hbar}$ . Cela est dû au fait que le système est dans une superposition linéaire des deux premiers états d'énergie. Dans la cas du point E de l'exercice précédent, le système était dans un état stationnaire, et donc la probabilité de présence dans l'espace était stationnaire aussi.

### Exercice III

On considère un système quantique à deux niveaux d'énergie possibles  $E_1$  et  $E_2$ , qui sont donc valeurs propres de l'observable hamiltonien  $\hat{H}_0$ . On indiquera les vecteurs propres correspondant par  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , respectivement. Autrement dit

$$\hat{H}_0 |\psi_1\rangle = E_1 |\psi_1\rangle$$

$$\hat{H}_0 |\psi_2\rangle = E_2 |\psi_2\rangle$$

$$\text{avec } \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \delta_{i,j}$$

A) Ecrire la représentation matricielle du hamiltonien  $\hat{H}_0$  dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ .

$$\text{Réponse } \hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

On introduit une perturbation à ce système, dont l'effet est de modifier l'hamiltonien en  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ , avec dans cette même base :

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & w \\ w & 0 \end{pmatrix}$$

B) déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres du hamiltonien  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ .

*Réponse* Le hamiltonien complet est  $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & W \\ W & E_2 \end{pmatrix}$   
dont les valeurs propres sont connues par l'équation

$$(E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - W^2 = 0 \rightarrow \lambda_{\pm} = \frac{E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2}}{2}$$

Les vecteurs propres  $|\lambda_{\pm}\rangle$  sont donnés par les équations  $\hat{H} |\lambda_{\pm}\rangle = \lambda_{\pm} |\lambda_{\pm}\rangle$  et donc

$$\begin{aligned} |\lambda_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(\lambda_+ - E_1)^2 + W^2}} \begin{pmatrix} W \\ \lambda_+ - E_1 \end{pmatrix} \\ |\lambda_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(\lambda_- - E_1)^2 + W^2}} \begin{pmatrix} W \\ \lambda_- - E_1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

C) On sait qu'à l'instant  $t = 0$ , le système se trouve dans l'état  $|\psi_1\rangle$ . Calculer la probabilité de trouver le système dans l'état  $|\psi_2\rangle$  après un temps arbitraire  $t$ .

*Réponse* La probabilité  $P$  que le système transite de l'état  $|\psi\rangle$  à l'état  $|\psi_2\rangle$  est donnée par le module carré du produit scalaire entre les deux vecteurs, donc  $P = |\langle\psi|\psi_2\rangle|^2$ . A partir de l'état initiale  $|\psi_1\rangle$ , il faut d'abord calculer l'état du système  $|\psi\rangle$  après un temps générique  $t$ , qui peut être calculé par l'équation de Schrödinger en prenant une décomposition sur les nouveaux vecteur propre  $\{|\lambda_+\rangle, |\lambda_-\rangle\}$ . A tout instant  $t > 0$  nous avons

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}|\psi_1\rangle = e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}|\lambda_+\rangle\langle\lambda_+|\psi_1\rangle + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}|\lambda_-\rangle\langle\lambda_-|\psi_1\rangle = \\ &= e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}\frac{W}{(\lambda_+-E_1)^2+W^2}\begin{pmatrix} W \\ \lambda_+-E_1 \end{pmatrix} + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\frac{W}{(\lambda_--E_1)^2+W^2}\begin{pmatrix} W \\ \lambda_--E_1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

En introduisant les quantités  $\Delta = \frac{E_2-E_1}{2}$  et  $\Sigma = \frac{E_1+E_2}{2}$ , on obtient

$$\lambda_{\pm} - E_1 = \Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + W^2}$$

donc

$$\lambda_{\pm} = \Sigma \pm \sqrt{\Delta^2 + W^2}$$

Nous pouvons donc calculer la projection de l'état  $|\psi\rangle$  sur l'état  $|\psi_2\rangle$  dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ , donnée par le produit scalaire

$$\begin{aligned} \langle\psi_2|\psi\rangle &= \\ e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}\frac{W}{(\lambda_+-E_1)^2+W^2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} W \\ \lambda_+-E_1 \end{pmatrix} + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\frac{W}{(\lambda_--E_1)^2+W^2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} W \\ \lambda_--E_1 \end{pmatrix} &= \\ = e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}\frac{W(\lambda_+-E_1)}{(\lambda_+-E_1)^2+W^2} + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\frac{W(\lambda_--E_1)}{(\lambda_--E_1)^2+W^2} &= \\ = e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}\frac{W(\Delta+\sqrt{\Delta^2+W^2})}{(\Delta+\sqrt{\Delta^2+W^2})^2+W^2} + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\frac{W(\Delta-\sqrt{\Delta^2+W^2})}{(\Delta-\sqrt{\Delta^2+W^2})^2+W^2} &= \\ = \frac{e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}(W\Delta+W\sqrt{\Delta^2+W^2})(\Delta^2+W^2-\Delta\sqrt{\Delta^2+W^2}) + e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}(W\Delta-W\sqrt{\Delta^2+W^2})(\Delta^2+W^2+\Delta\sqrt{\Delta^2+W^2})}{2(\Delta^2+W^2-\Delta\sqrt{\Delta^2+W^2})(\Delta^2+W^2+\Delta\sqrt{\Delta^2+W^2})} &= \\ = \frac{e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}}W^3\sqrt{\Delta^2+W^2} - e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}W^3\sqrt{\Delta^2+W^2}}{2W^2(\Delta^2+W^2)} = \frac{W}{2\sqrt{\Delta^2+W^2}}\left(e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}} - e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\right) \end{aligned}$$

Donc la probabilité demandée est

$$\begin{aligned} P(\psi(t) = \psi_2) &= |\langle\psi_2|\psi\rangle|^2 = \frac{W^2}{4(\Delta^2+W^2)}\left(e^{i\frac{\lambda_+t}{\hbar}} - e^{i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\right)\left(e^{-i\frac{\lambda_+t}{\hbar}} - e^{-i\frac{\lambda_-t}{\hbar}}\right) = \\ &= \frac{W^2}{4(\Delta^2+W^2)}\left(2 - e^{i\frac{(\lambda_+-\lambda_-)t}{\hbar}} - e^{-i\frac{(\lambda_+-\lambda_-)t}{\hbar}}\right) = \frac{W^2}{4(\Delta^2+W^2)}2\left(1 - \cos\left(\frac{(\lambda_+-\lambda_-)t}{\hbar}\right)\right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{W^2}{4(\Delta^2+W^2)} 2 \left( 1 - \cos \left( \frac{2\sqrt{\Delta^2+W^2}}{\hbar} t \right) \right) = \\
&= \frac{W^2}{4(\Delta^2+W^2)} 4 \sin^2 \left( \frac{\sqrt{\Delta^2+W^2}}{\hbar} t \right) = \frac{W^2}{\Delta^2+W^2} \sin^2 \left( \frac{\sqrt{\Delta^2+W^2}}{\hbar} t \right)
\end{aligned}$$

#### Exercice IV

Une particule est contrainte à se déplacer sur un segment de longueur  $L$ , autrement dit elle est dans un puits de potentiel quantique de longueur  $L$  et de hauteur infinie. A l'instant  $t = 0$ , la particule se trouve dans un état dont la mesure d'énergie ne donne toujours, avec la *même* probabilité, que *deux* valeurs : la valeur  $E_1$  correspondant au niveau fondamental et la valeur  $E_2$  correspondant au premier niveau excité.

A) Rappeler d'abord quelles sont les fonctions d'onde des états stationnaires et les énergies propres de ce puits quantique.

*Réponse* Il s'agit d'un puits de potentiel, dont nous connaissons déjà les fonctions propres  $\psi_n(x)$  et les valeurs propres  $E_n$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

avec  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

B) En déduire l'expression de la fonction d'onde normalisée de la particule à l'instant initial (qui va contenir deux phases arbitraires, dont une peut être mise égal à zéro et l'autre sera à déterminer).

*Réponse* Vu qu'une mesure de l'énergie de la particule ne donne que la valeur  $E_1$  et  $E_2$ , l'état initial  $\psi(x)$  est donc une superposition des deux états propres  $\psi_1(x)$  et  $\psi_2(x)$

$$\psi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x)$$

Etant donné qu'une mesure d'énergie peut donner  $E_1$  ou  $E_2$  avec la même probabilité, cela implique

$$|c_1|^2 = |c_2|^2 = \frac{1}{2} \rightarrow c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ et } c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha}$$

où nous avons pu poser arbitrairement une des deux phases à zéro, l'autre étant à déterminer.

La fonction d'onde s'écrit donc



$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + e^{i\alpha}\psi_2(x))$$

C) Déterminer le terme de phase en sachant qu'à l'instant  $t = 0$  la valeur moyenne de l'opérateur impulsion est  $\langle \hat{p} \rangle = \frac{4}{3} \frac{\hbar}{L}$ . (On rappelle que la valeur moyenne de l'opérateur impulsion dans un état propre de l'énergie est égal à zéro dans ce cas car il s'agit d'un potentiel symétrique)

*Réponse* Calculons la valeur moyenne de l'opérateur impulsion dans l'état  $\psi(x)$  à l'instant  $t = 0$

$$\langle p \rangle_{t=0} = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \frac{1}{2} [\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_2 \rangle + e^{i\alpha} \langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle + e^{-i\alpha} \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_1 \rangle]$$

Le potentiel étant symétrique, nous avons  $\langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_1 \rangle = 0$  et  $\langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_2 \rangle = 0$ . Il nous reste donc à calculer les deux quantités  $I_1 = \langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle$  et  $I_2 = \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_1 \rangle$ .

$$\begin{aligned} I_1 &= \langle \psi_1 | \hat{p} | \psi_2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \\ &= \frac{2}{L} \frac{\hbar}{i} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \frac{2\pi}{L} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{4\hbar}{iL} \int_0^\pi \sin(t) \cos(2t) dt = -\frac{8\hbar}{3iL} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \langle \psi_2 | \hat{p} | \psi_1 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \\ &= \frac{2}{L} \frac{\hbar}{i} \int_0^L \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{2\hbar}{iL} \int_0^\pi \sin(2t) \cos(t) dt = \frac{8\hbar}{3iL} \end{aligned}$$

donc

$$\langle p \rangle_{t=0} = \frac{1}{2} \frac{8\hbar}{3iL} [-e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}] = -\frac{8\hbar}{3L} \sin(\alpha)$$

En imposant la condition  $\langle \hat{p} \rangle = \frac{4}{3} \frac{\hbar}{L}$  on trouve

$$\sin(\alpha) = -\frac{1}{2} \rightarrow \alpha = \alpha_1 = -\frac{\pi}{6} \text{ et } \alpha = \alpha_2 = \pi + \frac{\pi}{6}$$

D) Déterminer à quel instant  $t > 0$  la valeur moyenne de l'opérateur impulsion vaut pour la première fois zéro.

*Réponse* A un instant de temps  $t > 0$  la valeur moyenne de l'opérateur impulsion se calcule

$$\langle p \rangle = \langle \psi | p | \psi \rangle$$

avec

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \psi_1(x) + e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \psi_2(x) \right)$$

donc

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{2} \left[ e^{i\alpha} e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} \langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle + e^{-i\alpha} e^{i\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}} \langle \psi_2 | p | \psi_1 \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{8\hbar}{3iL} \left[ -e^{i(\alpha+\omega t)} + -e^{-i(\alpha+\omega t)} \right] = -\frac{8\hbar}{3L} \sin(\alpha + \omega t) \end{aligned}$$

La valeur moyenne de l'impulsion vaudra zéro quand  $\omega t = -\alpha_1$  ou bien quand  $\omega t = -\alpha_2 + \pi$ , ce qui donne

$$t = \frac{\pi}{6\omega} \text{ ou } t = \frac{5\pi}{6\omega}$$

### Exercice V

On considère un système quantique avec spin entier  $s = 1$ , et on néglige tous les autres degrés de liberté du système.

A) Quelles sont les valeurs possibles pour la mesure de  $\hat{S}_z$ , projection du moment cinétique de spin le long de z (on notera ces valeurs  $m_s$ ) ?

*Réponse* On sait que  $-s \leq m_s \leq s$ , et que  $m_s$  est entier, donc il y aura que trois valeurs possibles

$$m_s = \hbar(-1, 0, 1)$$

B) Calculer les trois matrices  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base de vecteurs propres de la composante  $\hat{S}_z$  du spin.

*Réponse* Nous savons qu'en appliquant l'opérateur de création  $\hat{S}_+$  et annihilation  $\hat{S}_-$  à un état propre de spin on obtient

$$\hat{S}_+|m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} |m_s+1\rangle$$

$$\hat{S}_-|m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)} |m_s-1\rangle$$

Dans la base de vecteurs propres de  $\hat{S}_z$ , on a

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

avec vecteurs propres

$$|m_s = -1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |m_s = 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |m_s = 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

On cherche d'abord les matrices correspondants aux opérateurs de création et annihilation, pour l'instant inconnues

$$\hat{S}_+ = \begin{pmatrix} a_+ & b_+ & c_+ \\ d_+ & e_+ & f_+ \\ g_+ & h_+ & i_+ \end{pmatrix}, \hat{S}_- = \begin{pmatrix} a_- & b_- & c_- \\ d_- & e_- & f_- \\ g_- & h_- & i_- \end{pmatrix}$$

En appliquant  $\hat{S}_+$  et  $\hat{S}_-$  aux vecteur propres de  $\hat{S}_z$  et en connaissant leur action, par exemple

$$\hat{S}_+|1,0,0\rangle = \sqrt{2}\hbar|010\rangle$$

et ainsi de suite, on trouve

$$\hat{S}_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

On sait aussi que l'opérateur de création et de annihilation sot définis de la façon suivante

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

d'où

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i} \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2} = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

C) On suppose que le système est dans un état propre de  $\hat{S}_z$ . Sans effectuer de calcul, donner en le justifiant le nombre de tâches observées pour ce système lors d'une mesure du spin le long de l'axe  $y$  avec un appareil de Stern et Gerlach.

*Réponse* Si le système est dans un état propre de  $\hat{S}_z$ , les états seront mélangés selon la direction  $y$  dû au fait que  $[\hat{S}_z, \hat{S}_y] \neq 0$ . Donc, une mesure de  $\hat{S}_y$  donnera lieu à trois tâches.

### Exercice VI

On effectue une mesure avec un appareil type Stern et Gerlach sur un système quantique inconnu. La mesure selon l'axe  $z$  donne 4 tâches espacées symétriquement et de même intensité comme dans la figure 1. Que peut-on dire sur l'état de ce système quantique (rédiger en détaillant et justifiant) ?

*Réponse* Un appareil de type Stern et Gerlach mesure l'état de spin du système. Le spin peut être entier ou demi-entier. On sait aussi qu'à chaque valeur du spin  $s$  correspondent  $(2s + 1)$  valeur de  $m_s$ , selon n'importe quelle direction. Dans ce cas nous mesurons 4 tâches, donc l'état de spin du système mesuré est  $s = 3/2$ . Vu que les tâches ont toutes la même intensité, l'état initial du système sera une combinaison linéaire des quatre états possible, donc

$$|\psi\rangle = \frac{e^{i\theta_1}}{\sqrt{4}} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\theta_2}}{\sqrt{4}} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\theta_3}}{\sqrt{4}} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\theta_4}}{\sqrt{4}} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle$$

où les phases  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$  sont arbitraires.

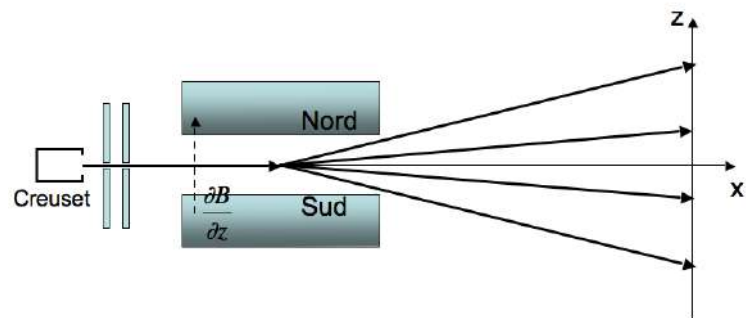


Figure 1: Expérience type Stern et Gerlach sur un système à déterminer.

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

**1 Exercice : Particule dans un potentiel**

On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel uni-dimensionnel défini par morceaux dans trois régions de l'espace (1), (2) et (3) par :

- (1)  $V(x) = \infty$  si  $x < 0$
- (2)  $V(x) = -V_0 < 0$ , si  $0 \leq x < a$
- (3)  $V(x) = 0$  si  $x \geq a$

On définit  $K = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$  et  $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ .

A) Ecrire les solutions générales  $\psi_i(x)$ ,  $i = 1, 2, 3$  pour l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les trois zones d'espace (1), (2) et (3). On pourra distinguer les états liés et non liés. Justifiez cette appellation.

B) On s'intéresse aux états liés. En utilisant les conditions de continuité précisez les solutions. Montrer que ces conditions mènent à une quantification des niveaux d'énergie et que les énergies propres sont solution de l'équation transcendente  $\tan(\theta) = -1/\sqrt{\theta_0^2/\theta^2 - 1}$  avec  $\theta = Ka$  et  $\theta_0 = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$ .

C) L'équation aux valeurs propres pour l'énergie peut se résoudre graphiquement. Tracez cette équation. Y a-t-il toujours des solutions quelque soit  $V_0$  ? Si  $\theta_0^2 = 2\pi^2$ , combien y a-t-il de solutions ?

D) Dans le cas  $\theta_0^2 = 2\pi^2$ , tracez l'allure de la fonction propre correspondante à l'état fondamental en signifiant clairement les conditions de raccordements (continuités, discontinuités) aux interfaces pour la fonction et sa dérivée.

## 2 Exercice : Règle de somme

L'objet de cette exercice est d'établir une loi très générale, dite règle de somme, indépendante du choix particulier du potentiel  $V(x)$  dans le Hamiltonien unidimensionnel  $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + V(\hat{x})$  et de la forme particulière de ses fonctions propres. On définit la force d'oscillateur d'une transition optique de l'état  $|\psi_i\rangle$  vers l'état  $|\psi_f\rangle$  par:

$$S_{i \rightarrow f} = \frac{2m}{\hbar^2} (Ef - Ei) |d|^2 \quad (1)$$

où  $d = \langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle$  est la longueur du dipôle de la transition,  $|\psi_i\rangle$  et  $|\psi_f\rangle$  sont le niveau initial et final respectivement, états propres normés de  $\hat{H}$ ,  $Ei$  et  $Ef$  les énergies correspondantes. À une constante près, cette quantité représente l'absorption optique d'un électron lors de la transition.

On cherche à montrer que la somme des forces d'oscillateur de l'état initial  $|\psi_i\rangle$  donné vers tous les états finaux possibles  $|\psi_f\rangle$  vaut 1 :

$$\sum_f S_{i \rightarrow f} = 1 \quad (2)$$

indiquant que la force d'oscillateur ou l'absorption se "distribuent" entre toutes les transitions possibles. On manipulera ici essentiellement des "bras", des "kets" et des opérateurs.

2.1.1 Que vaut  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  ? On se contentera ici de rappeler sans calcul le résultat démontré en cours.

2.1.2 En déduire par une manipulation très simple que  $[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = 2i\hbar\hat{p}_x$

2.1.3 Donner alors l'expression de l'observable  $\hat{p}_x$  en fonction du commutateur  $[\hat{H}, \hat{x}]$ .

2.1.4 Que vaut alors  $\langle \psi_f | \hat{p}_x | \psi_i \rangle$  en fonction du dipôle  $d = \langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle$  de la transition  $i \rightarrow f$  ?

2.1.5 Pour un état quelconque  $|\psi_i\rangle$ , calculer  $\langle \psi_i | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \psi_i \rangle$  en insérant la relation de fermeture  $\sum_f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| = 1$  entre  $\hat{x}$  et  $\hat{p}_x$  et ainsi démontrer la règle de somme (2). On notera que  $|\langle u | v \rangle|^2 = \langle u | v \rangle \langle v | u \rangle$ .

2.1.6 Application numérique : Que vaut la force d'oscillateur de la transition entre le niveau fondamental et le premier niveau excité d'un puits quantique avec des hauteurs de barrières infinies ? Comme l'absorption optique est proportionnelle à la force d'oscillateur, avec une constante de proportionnalité qui ne dépend pas de la transition, que peut-on dire de l'absorption optique d'un électron suite à cette transition par rapport à toutes les autres transitions ?



### 3 Exercice : Atome d'hydrogène

Un électron dans un atome d'hydrogène occupe un état décrit par la fonction d'onde

$$\psi(\vec{r}) = R_{2,1}(r) \left( \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0}(\theta, \phi) + i C Y_{1,1}(\theta, \phi) \right)$$

avec  $C$  constante réelle,  $R_{n,l}(r)$  la fonction d'amplitude de probabilité radiale pour l'électron de l'atome d'hydrogène et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  les harmoniques sphériques. On rappelle que les fonctions  $R_{n,l}(r)$  et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  sont normées. Dans cet exercice, on ne cherchera pas à expliciter les fonctions  $R_{n,l}(r)$  et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ .

A) Quelle est la valeur de la constante  $C$  ?

B) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable  $\hat{H}$  et les probabilités associées ?

C) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable carré du moment orbital  $\hat{L}^2$  et les probabilités associées ?

D) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable  $\hat{L}_z$  et les probabilités associées ?

On effectue maintenant concrètement une mesure de la composante du spin de l'électron dans le plan  $xOy$  le long de l'axe orienté à  $+30^\circ$  par rapport à l'axe des abscisses ( $Ox$ ), donc  $\theta = 90^\circ$  et  $\phi = +30^\circ$ .

E) Après cette première mesure, quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure de l'observable carré du moment cinétique de spin de l'électron  $\hat{S}^2$  et les probabilités associées ? Justifier la réponse.

F) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure de l'observable  $\hat{S}_z$  et les probabilités associées ?

G) Si maintenant on mesure la position de l'électron, quelle est la densité de probabilité de le trouver en  $\vec{r}(r, \theta, \phi)$  ?

H) Expliquer pourquoi la mesure de la position et du spin le long de  $z$  sont compatibles, et ce que cela signifie.

#### 4 Exercice : Etat stationnaire

Un système quantique unidimensionnel est décrit par l'observable Hamiltonien:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$$

Démontrer que, si le système est dans un état propre de l'observable Hamiltonien  $\hat{H}$ , alors la valeur moyenne de l'opérateur impulsion  $\hat{p}_x$  vaut zéro. Commenter ce résultat.

## 5 Problème : Photodétection infrarouge à boîtes quantiques

Les boîtes quantiques de semi-conducteurs sont des nanostructures qui forment des puits d'énergie potentielle tridimensionnels pour les électrons. Les boîtes quantiques constituent des "atomes artificiels" dans une matrice solide.

L'objet de ce problème est de mettre en évidence l'absorption infrarouge de ces boîtes quantiques à des longueurs d'onde  $\lambda$  qui correspondent au rayonnement thermique des objets à température ambiante (rayonnement de corps noir:  $\lambda \sim 10\text{-}30 \mu\text{m}$ ).

Cela ouvre la voie à une multitude d'applications professionnelles et domestiques. L'absorption infrarouge de ces nanostructures peut être notamment exploitée pour fabriquer des photodétecteurs infrarouges pour l'imagerie thermique médicale.

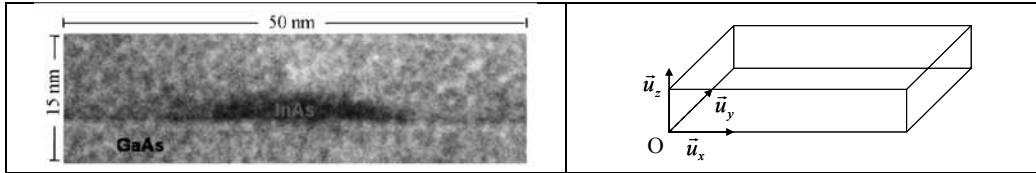


Figure 1: (A gauche) Coupe x0z d'une boîte quantique de semi-conducteurs obtenue par microscopie électronique en transmission. (A droite) Forme simplifiée du puits d'énergie potentielle formé par la boîte quantique.

Une boîte quantique "auto-assemblée" typique est représentée sur la Figure 1 (zone sombre en forme de lentille aplatie). On approximera sa forme aplatie par un parallélépipède rectangle de taille  $L_x$ ,  $L_y$  et  $L_z$  le long des axes du repère orthonormé  $(O, \vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ .

On admettra que l'effet de tous les atomes du cristal sur un électron revient à :

- donner à cet électron une masse *effective*  $m$  plus légère que la masse  $m_0$  dans le vide :  $m = 0,07m_0$
- considérer que cet électron évolue dans un champ de force dérivant d'une énergie potentielle *effective*  $V$  nulle dans la boîte quantique et suffisamment grande à l'extérieur pour être considérée comme infinie.

$$\begin{cases} V(x, y, z) = 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L_x \text{ et } 0 \leq y \leq L_y \text{ et } 0 \leq z \leq L_z \\ V(x, y, z) = \infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (1)$$

Le hamiltonien de l'électron s'écrit:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V, \quad \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (2)$$

Par souci de simplicité, on ne considèrera pas le spin des électrons, qui seront donc décrits uniquement au travers de leur fonction d'onde spatiale.

### 5.1 Puits quantique infini à une dimension

Avant de traiter le problème à trois dimensions, on considère d'abord le problème du puits quantique infini à une dimension, de largeur  $L$  le long de  $x$ .

- 5.1.1 Quelle équation différentielle vérifie la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  de l'électron ?
- 5.1.2 De façon générale que sont les états stationnaires  $\phi_n(x)$  ? Quelle équation vérifient-ils ? Pourquoi les appelle-t-on ainsi ?
- 5.1.3 Donner, sans les justifier, les expressions des fonctions d'onde  $\phi_n(x)$  et des énergies  $E_n$  des états stationnaires du puits quantique infini unidimensionnel.
- 5.1.4 Expliquer pourquoi, en mécanique quantique, on cherche à calculer les états stationnaires et donner la forme de la solution générale  $\psi(x, t)$ .

Dans la suite on ne considèrera donc que les états stationnaires, sans leur dépendance en temps.

### 5.2 Structure électronique d'une boîte quantique

On revient au cas tridimensionnel.

- 5.2.1 Écrire l'équation différentielle vérifiée par les états stationnaires  $\chi(x, y, z)$  de l'électron confiné dans une telle boîte quantique. Quelles sont les conditions aux limites sur le bord de la boîte pour la fonction  $\chi$  ?
- 5.2.2 Montrer que le produit des fonctions d'onde stationnaires du puits quantique infini à une dimension le long de  $x, y$  et  $z$  sont des états stationnaires pour la boîte quantique à trois dimensions. On donnera l'expression des énergies  $E_{n_x, n_y, n_z}$  et des fonctions d'onde *normées*  $\chi_{n_x, n_y, n_z}$  correspondantes, qu'on indexera par trois entiers  $n_x, n_y$  et  $n_z$ . Quelles valeurs prennent les trois entiers  $n_x, n_y$  et  $n_z$  ?
- 5.2.3 Représenter *qualitativement* sur un diagramme d'énergie l'énergie potentielle le long d'un des axes  $x, y$  ou  $z$  et l'énergie des 3 premiers niveaux discrets de la boîte quantique dans le cas où  $L_z \ll L_y < L_x$  avec  $L_y$  légèrement inférieur et différent de  $L_x$ . Dans l'ordre des énergies on note ces trois niveaux  $S, P_-$  et  $P_+$ . Quelles sont les énergies  $E_S, E_{P_-}$  et  $E_{P_+}$  de ces trois niveaux ? Donner l'expression des énergies  $E_{SP_-}$  et  $E_{SP_+}$  des deux transitions de l'électron de l'état fondamental  $S$  vers les états excités  $P_-$  et  $P_+$ .
- 5.2.4 Calculer, dans l'état fondamental, les moyennes de la position:  $\langle \hat{x} \rangle, \langle \hat{x}^2 \rangle$ . Donner l'expression de  $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$  pour cet état. Voir le formulaire à la partie 5.5.

- 5.2.5 Calculer dans l'état fondamental les moyennes :  $\langle \hat{p}_x \rangle$ ,  $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ . Donner l'expression de  $\Delta p_x = \sqrt{\langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2}$  pour cet état. Voir le formulaire à la partie 5.5.
- 5.2.6 Que représentent ces valeurs  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$ ? Que vaut la valeur du produit et quel commentaire cela vous inspire-t-il ?
- 5.2.7 Expliquer pourquoi, contrairement à la mécanique classique, l'énergie du niveau fondamental de la boîte quantique n'est pas nulle.

### 5.3 Transitions optiques

L'électron dans l'état fondamental S de la boîte quantique peut absorber des photons dont l'énergie  $\hbar\omega$  vaut  $\hbar\omega = E_{SP-}$  ou  $\hbar\omega = E_{SP+}$  et être promu sur le premier niveau P- ou le deuxième niveau excité P+ de la boîte quantique. On admettra que, lorsqu'elle est faible, l'absorption A d'un ensemble de boîtes quantiques modifie l'intensité I de la lumière d'une quantité  $\Delta I$  suivant la loi d'atténuation :

$$A = -\frac{\Delta I}{I} = K \Delta E (\vec{d} \cdot \vec{\varepsilon})^2 \quad (3)$$

où  $\vec{d} = \langle \psi_f | \hat{r} | \psi_i \rangle$  est associé au dipôle  $-e\vec{r}$  de l'électron et traduit l'oscillation de charge qui se produit sous illumination lors de sa transition d'un état initial  $|\psi_i\rangle$  vers un état final  $|\psi_f\rangle$ .  $\vec{\varepsilon}$  est la polarisation de la lumière que l'on considèrera dans la suite soit le long de  $\vec{u}_x$ , soit le long de  $\vec{u}_y$ .  $\Delta E = |E_f - E_i| = \hbar\omega$  est l'énergie de la transition, et K est une constante qui fait intervenir la densité surfacique de boîtes quantiques traversées par la lumière.

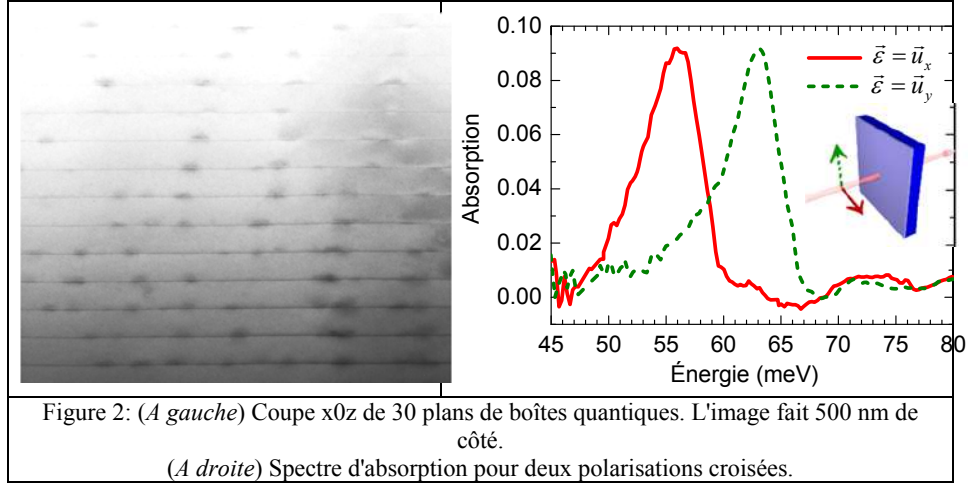
- 5.3.1 Que vaut  $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$  pour les deux transitions  $S \rightarrow P_-$  et  $S \rightarrow P_+$  ?
- 5.3.2 Quelle doit être la polarisation de la lumière pour que l'électron absorbe le plus photons lors de la transition  $S \rightarrow P_-$  ? Idem pour la transition  $S \rightarrow P_+$ .

### 5.4 Application numérique : absorption infrarouge expérimentale

On fait croître un ensemble de boîtes quantiques (Figure 2-Gauche). L'échantillon contient typiquement des milliards de telles nanostructures. Le spectre d'absorption optique de cet ensemble est mesuré par une expérience de transmission de lumière dans l'infrarouge comme illustré sur la Figure 2-Droite. Sur le spectre d'absorption, l'énergie  $\hbar\omega$  des photons incidents varie de 45 meV à 80 meV. L'absorption est mesurée pour deux polarisations incidentes dans le plan des couches  $\vec{\varepsilon} = \vec{u}_x$  et  $\vec{\varepsilon} = \vec{u}_y$ .

Sur le spectre, il faut imaginer que chaque boîte quantique contribue à l'absorption avec une raie d'absorption ultrafine à une énergie  $\hbar\omega$  qui lui est propre et qui dépend de sa taille. Il y a une variation de taille de boîte quantique à boîte quantique. L'absorption de l'ensemble présente donc une largeur spectrale plus importante. Comme on peut le voir sur le spectre, cette largeur est d'environ 6 meV à mi-hauteur.

On remarque que, suivant la polarisation sondée, l'absorption de l'ensemble présente un maximum à 56 meV ou 63 meV.



- 5.4.1 Application numérique (A. N.) : à quelles longueurs d'onde les deux résonances infrarouges maximum à 56 meV et 63 meV correspondent-elles ?
- 5.4.2 A. N. : quelles sont les tailles moyennes  $L_x$  et  $L_y$  déduites de ce spectre expérimental ? Sont-elles égales ? Comment se comparent-elles à la taille typique observée sur l'image de la Figure 1-Gauche (très inférieure, très supérieure, à peu près égale) ?
- 5.4.3 A. N. : quelles sont approximativement les variations de taille  $\delta L_x$  et  $\delta L_y$  de boîte quantique à boîte quantique que l'on peut déduire de tels spectres d'absorption d'ensemble ? Pour comparaison, la plus petite variation de longueur attendue correspond à l'épaisseur d'une monocouche atomique dans le matériau, soit approximativement de 0,28 nm.
- 5.4.4 L'amplitude maximale  $A_{\max}$  de l'absorption mesurée est 0,09. On donne:

$$K = N_{\text{plans}} n_0 \frac{e^2}{\hbar n_{\text{opt}} c \epsilon_0} \frac{2\sqrt{\pi \ln(2)}}{W}$$

$N_{\text{plans}} = 30$  est le nombre de plan de boîtes quantiques.

$n_0 = 4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  est la densité surfacique de boîtes quantiques sur un plan.

$n_{\text{opt}} = 3,3$  est l'indice optique du matériau.

$W = 6 \text{ meV}$  est la largeur à mi-hauteur de l'absorption

A. N. : quelle valeur de longueur de dipôle  $d_x$  (exprimé en nm) déduit-on expérimentalement pour la transition S→P- ? Comment cela se compare-t-il (très inférieure, très supérieure, à peu près égale) à la valeur calculée en 5.3.1 (on prendra  $L_x = 17 \text{ nm}$ ) ?

## 5.5 Constantes physiques et mathématiques

Attention: la masse effective  $m$  de l'électron dans un semi-conducteur est plus petite que la masse réelle  $m_0$  dans le vide :  $m = 0,07m_0$  (cf le début de l'énoncé).

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$m_0 = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$c = 299792458 \text{ m s}^{-1}$$

$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$$

$$k_B T = 25,85 \text{ meV pour } T = 300 \text{ K}$$

$$n_{opt} = 3,3$$

$$\int_0^\pi \sin^2(u) du = \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^\pi \cos^2(u) du = \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^\pi \sin(u) \cos(u) du = 0$$

$$\int_0^\pi u \sin^2(u) du = \frac{\pi^2}{4}$$

$$\int_0^\pi u \cos^2(u) du = \frac{\pi^2}{4},$$

$$\int_0^\pi u \sin(u) \cos(u) du = -\frac{\pi}{4}$$

$$\int_0^\pi u^2 \sin^2(u) du = \frac{\pi}{12} (2\pi^2 - 3) \quad \int_0^\pi u^2 \cos^2(u) du = \frac{\pi}{12} (2\pi^2 + 3) \quad \int_0^\pi u^2 \sin(u) \cos(u) du = -\frac{\pi^2}{4}$$

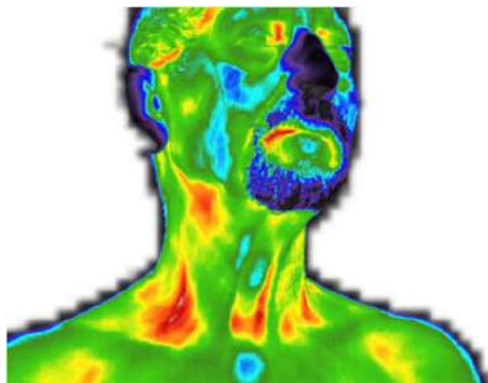
$$\int_0^\pi \sin(u) \sin(2u) du = 0$$

$$\int_0^\pi u \sin(u) \sin(2u) du = -\frac{8}{9}$$

$$2\sqrt{\pi \ln(2)} \approx 3$$

$$\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0,57$$

$$\frac{16}{9\pi^2} \approx 0,18$$



Imagerie infrarouge avec une caméra thermique pour la détection de l'inflammation de la carotide.

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

**1 Exercice : Particule dans un potentiel**

On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel uni-dimensionnel défini par morceaux dans trois régions de l'espace (1), (2) et (3) par :

- (1)  $V(x) = \infty$  si  $x < 0$
- (2)  $V(x) = -V_0 < 0$ , si  $0 \leq x < a$
- (3)  $V(x) = 0$  si  $x \geq a$

On définit  $K = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$  et  $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ .

A) Ecrire les solutions générales  $\psi_i(x)$ ,  $i = 1, 2, 3$  pour l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les trois zones d'espace (1), (2) et (3). On pourra distinguer les états liés et non liés. Justifiez cette appellation.

*Réponse:* L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit  $\hat{H}\psi = E\psi$  avec  $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + V$  le Hamiltonien. Il vient donc compte-tenu que  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$  en représentation  $x$  :

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

Dans la zone (1) le potentiel est infini. L'on sait dans ce cas que la fonction d'onde doit être nulle dans cette zone (cela se montre facilement comme dans la PC1). Dans la zone (2) l'équation s'écrit

$$\psi_2''(x) = \frac{-2m}{\hbar^2}(E + V_0)\psi_2(x)$$

et dans la zone (3)



$$\psi_3''(x) = \frac{-2m}{\hbar^2} E \psi_3(x)$$

Cette dernière équation donne lieu à deux types de solutions selon que  $E > 0$  ou  $E < 0$ . Notons tout d'abord que nous avons toujours  $E \geq V_0$  car le hamiltonien est la somme d'une énergie cinétique et potentielle et que l'énergie cinétique est positive ou nulle. Ainsi la solution générale dans la zone (2) est une somme de sinus et cosinus. Dans la zone (3) et si  $E > 0$ , la solution est aussi une somme de fonctions oscillantes de types sinus et cosinus. La solution est donc non normalisable et ne correspond pas à un état physique d'énergie fixée. En revanche, si  $E < 0$  la solution générale dans la zone (3) est une somme de fonctions exponentielles réelles. La partie exponentielle positive (qui diverge quand  $x$  tend vers l'infini) est alors nécessairement nulle sinon la solution ne pourrait être normalisable. Il reste une exponentielle décroissante qui donne une solution normalisable et qui correspond à une particule d'énergie  $E$  localisée dans le puits de potentiel semi-infini et dont une partie de la fonction d'onde s'étend dans la barrière droite. On appelle cette solution "état lié". La solution qui correspond à  $E > 0$  donne lieu à des états complètement délocalisés qui sont appelés "états non liés". En résumé on peut écrire :

Solutions générales :

États liés  $E < 0$

$$\psi_2(x) = A \cos(Kx) + B \sin(Kx) \text{ si } 0 \leq x < a.$$

$$\psi_3(x) = C e^{kx} + D e^{-kx} \text{ si } x \geq a.$$

$$\psi_1(x) = 0 \text{ si } x < 0$$

La condition de normalisation impose  $C = 0$ .

États non liés  $E > 0$

$$\psi_2(x) = A \cos(Kx) + B \sin(Kx) \text{ si } 0 \leq x < a.$$

$$\psi_3(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx) \text{ si } x \geq a.$$

$$\psi_1(x) = 0 \text{ si } x < 0$$

$A, B, C, D$  sont des constantes complexes.

B) On s'intéresse aux états liés. En utilisant les conditions de continuité précisez les solutions. Montrer que ces conditions mènent à une quantification des niveaux d'énergie et que les énergies propres sont solution de l'équation transcendente  $\tan(\theta) = -1/\sqrt{\theta_0^2/\theta^2 - 1}$  avec  $\theta = Ka$  et  $\theta_0 = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$ .

*Réponse:* On sait que la fonction d'onde est toujours continue alors que sa dérivée l'est seulement pour une discontinuité finie de potentiel. On utilise donc ici la continuité de la fonction d'onde en  $x = 0$  et  $x = a$  et la continuité de la dérivée en  $x = a$  seulement.

On trouve facilement que  $A = 0$  en utilisant  $\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0$ . De même, pour que la fonction d'onde soit normalisable, il faut que  $C = 0$ .

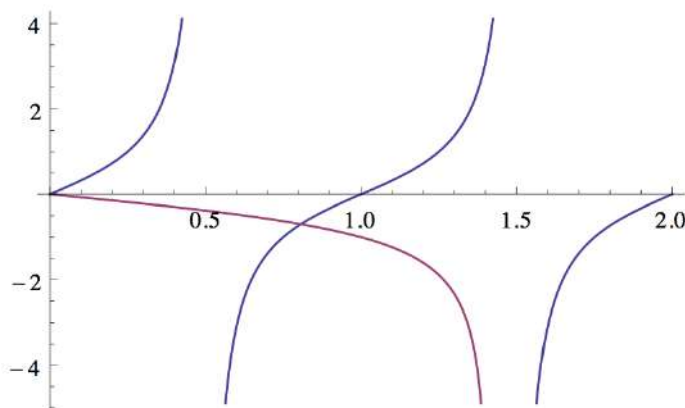


Figure 1: Fonctions  $\tan(\theta)$  et  $-1/\sqrt{\theta_0^2/\theta^2 - 1}$ . En abscisse  $\theta/\pi$ .

En  $x = a$  on obtient :  $B \sin(Ka) = De^{-ka}$  et  $KB \cos(Ka) = -kDe^{-ka}$ . En divisant la première par la seconde et en utilisant les définitions introduites on arrive à l'égalité demandée.

C) L'équation aux valeurs propres pour l'énergie peut se résoudre graphiquement. Tracez cette équation. Y a-t-il toujours des solutions quelque soit  $V_0$  ? Si  $\theta_0^2 = 2\pi^2$ , combien y a-t-il de solutions ?

*Réponse:* Cf Fig1. Il n'y a pas toujours de solutions liées. En effet si  $\theta_0 < \pi/2$ , il n'y a pas de solution normalisable (NB :  $\theta = 0$  correspond à  $K = 0$  qui ne donne pas une solution normalisable non nulle). Si  $\theta_0^2 = 2\pi^2$  il y a une seule solution liée. Remarquons que cette situation se rapproche de celle du puits de potentiel fini pour les solutions asymétriques (il y a en revanche toujours des solutions liées symétriques dans ce cas).

D) Dans le cas  $\theta_0^2 = 2\pi^2$ , tracez l'allure de la fonction propre correspondante à l'état fondamental en signifiant clairement les conditions de raccordements (continuités, discontinuités) aux interfaces pour la fonction et sa dérivée.

*Réponse:* Cf figure.

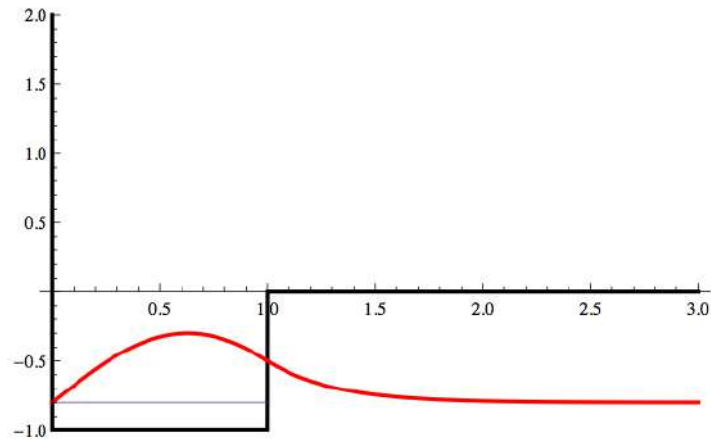


Figure 2: Représentation schématique de l'état fondamental (en rouge) et du potentiel (en noir). Le premier niveau lié est figuré en bleu. On a de plus  $\psi(x) = 0$  pour  $x < 0$ . Une particule dans un état lié a une probabilité non nulle de se trouver dans la barrière à droite. Cette probabilité décroît cependant exponentiellement vite.

## 2 Exercice : Règle de somme

L'objet de cette exercice est d'établir une loi très générale, dite règle de somme, indépendante du choix particulier du potentiel  $V(x)$  dans le Hamiltonien unidimensionnel  $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + V(\hat{x})$  et de la forme particulière de ses fonctions propres. On définit la force d'oscillateur d'une transition optique de l'état  $|\psi_i\rangle$  vers l'état  $|\psi_f\rangle$  par:

$$S_{i \rightarrow f} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_f - E_i) |d_{if}|^2 \quad (1)$$

où  $d_{if} = \langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle$  est la longueur du dipôle de la transition,  $|\psi_i\rangle$  et  $|\psi_f\rangle$  sont le niveau initial et final respectivement, états propres normés de  $\hat{H}$ ,  $E_i$  et  $E_f$  les énergies correspondantes. À une constante près, cette quantité représente l'absorption optique d'un électron lors de la transition.

On cherche à montrer que la somme des forces d'oscillateur de l'état initial  $|\psi_i\rangle$  donné vers tous les états finaux possibles  $|\psi_f\rangle$  vaut 1 :

$$\sum_f S_{i \rightarrow f} = 1 \quad (2)$$

indiquant que la force d'oscillateur ou l'absorption se "distribuent" entre toutes les transitions possibles. On manipulera ici essentiellement des "bras", des "kets" et des opérateurs.

- 2.1.1 Que vaut  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  ? On se contentera ici de rappeler sans calcul le résultat démontré en cours.
- 2.1.2 En déduire par une manipulation très simple que  $[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = 2i\hbar\hat{p}_x$
- 2.1.3 Donner alors l'expression de l'observable  $\hat{p}_x$  en fonction du commutateur  $[\hat{H}, \hat{x}]$ .
- 2.1.4 Que vaut alors  $\langle \psi_f | \hat{p}_x | \psi_i \rangle$  en fonction du dipôle  $d_{if}$  de la transition  $i \rightarrow f$  ?
- 2.1.5 Pour un état quelconque  $|\psi_i\rangle$ , calculer  $\langle \psi_i | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \psi_i \rangle$  en insérant la relation de fermeture  $\sum_f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| = 1$  entre  $\hat{x}$  et  $\hat{p}_x$  et ainsi démontrer la règle de somme (2). On notera que  $|\langle u | v \rangle|^2 = \langle u | v \rangle \langle v | u \rangle$ .
- 2.1.6 Application numérique : Que vaut la force d'oscillateur de la transition entre le niveau fondamental et le premier niveau excité d'un puits quantique avec des hauteurs de barrières infinies ? Comme l'absorption optique est proportionnelle à la force d'oscillateur, avec une constante de proportionnalité qui ne dépend pas de la transition, que peut-on dire de l'absorption optique d'un électron suite à cette transition par rapport à toutes les autres transitions ?

## 2 CORRIGÉ : exercice Règle de somme

$$2.1.1 \quad [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

2.1.2

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x^2] &= \hat{x} \hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 \hat{x} \\ &= (\hat{x} \hat{p}_x) \hat{p}_x - \hat{p}_x (\hat{p}_x \hat{x}) \\ &= (i\hbar + \hat{p}_x \hat{x}) \hat{p}_x - \hat{p}_x (-i\hbar + \hat{x} \hat{p}_x) \\ &= 2i\hbar \hat{p}_x \end{aligned}$$

$$2.1.3 \quad \hat{p}_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

2.1.4

Il suffit d'utiliser la question précédente en se servant du fait que les états sont des états propres de  $H$  :  $\hat{H}|\psi_i\rangle = Ei|\psi_i\rangle$  et  $\langle\psi_f|\hat{H} = Ef\langle\psi_f|$

$$\langle\psi_f|\hat{p}_x|\psi_i\rangle = \frac{im}{\hbar} (Ef - Ei) \langle\psi_f|\hat{x}|\psi_i\rangle$$

2.1.5

$$\begin{aligned} \langle\psi_i|[\hat{x}, \hat{p}_x]|\psi_i\rangle &= \langle\psi_i|\hat{x} \hat{p}_x|\psi_i\rangle - \langle\psi_i|\hat{p}_x \hat{x}|\psi_i\rangle \\ &= \sum_{\chi_f} \langle\psi_i|\hat{x}|\psi_f\rangle \langle\psi_f|\hat{p}_x|\psi_i\rangle - \langle\psi_i|\hat{p}_x|\psi_f\rangle \langle\psi_f|\hat{x}|\psi_i\rangle \\ &= \sum_{\chi_f} \frac{im}{\hbar} (Ef - Ei) (\langle\psi_i|\hat{x}|\psi_f\rangle \langle\psi_f|\hat{x}|\psi_i\rangle + \langle\psi_i|\hat{x}|\psi_f\rangle \langle\psi_f|\hat{x}|\psi_i\rangle) \\ &= \sum_{\chi_f} \frac{2im}{\hbar} (Ef - Ei) |\langle\psi_f|\hat{x}|\psi_i\rangle|^2 \\ &= i\hbar \sum_{\chi_f} S_{i \rightarrow f} \end{aligned}$$

Comme  $\langle\psi_i|[\hat{x}, \hat{p}_x]|\psi_i\rangle = i\hbar$  la règle de somme, dite de Thomas-Reiche-Kuhn, est démontrée.

2.1.6 À partir de l'expression de la fonction d'onde pour une particule confinée dans un puits quantique unidimensionnel de largeur  $L$  et de hauteur de barrière infinie

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \quad \text{et de l'énergie correspondante} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n^2}{L^2} \quad \text{avec } n \text{ entier}$$

strictement positif on a :

$$\text{et } d_{12} = \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle = \int_0^L \phi_2^*(x) x \phi_1(x) dx = -\frac{16}{9\pi^2} L$$

$$\begin{aligned}
S_{1 \rightarrow 2} &= \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) d_{12}^2 \\
&= \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{3}{L^2} \right) \left( \frac{16}{9\pi^2} L \right)^2 \\
&= \frac{256}{27\pi^2} \approx 0,96
\end{aligned}$$

On remarque d'abord que cette valeur est indépendante de la valeur des paramètres du système : la masse de la particule, la largeur du puits. Cette valeur étant très proche de 1 (qui est la somme de toutes les forces d'oscillateur), les autres transitions qui absorbent, en polarisation  $x$ , seront relativement très faibles. Et c'est ce qu'on observe bien expérimentalement (non montré ici).

### 3 Exercice : Atome d'hydrogène

Un électron dans un atome d'hydrogène occupe un état décrit par la fonction d'onde

$$\psi(\vec{r}) = R_{2,1}(r) \left( \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0}(\theta, \phi) + iC Y_{1,1}(\theta, \phi) \right)$$

avec  $C$  constante réelle,  $R_{n,l}(r)$  la fonction d'amplitude de probabilité radiale pour l'électron de l'atome d'hydrogène et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  les harmoniques sphériques. On rappelle que les fonctions  $R_{n,l}(r)$  et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  sont normées. Dans cet exercice, on ne cherchera pas à expliciter les fonctions  $R_{n,l}(r)$  et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ .

A) Quelle est la valeur de la constante  $C$  ?

*Réponse:* La fonction  $\psi$  est normée ce qui implique que  $\iiint |\psi|^2 d^3\vec{r} = 1$ . En passant en coordonnées sphériques on obtient

$$1 = \int_0^\infty |R_{2,1}(r)|^2 r^2 dr \int_{\theta=0}^\pi \int_{\phi=0}^{2\pi} \left( \frac{1}{3} |Y_{1,0}(\theta, \phi)|^2 + C^2 |Y_{1,1}(\theta, \phi)|^2 + \frac{iC}{\sqrt{3}} Y_{1,0}^*(\theta, \phi) Y_{1,1}(\theta, \phi) - \frac{iC}{\sqrt{3}} Y_{1,0}(\theta, \phi) Y_{1,1}^*(\theta, \phi) \right) \sin(\theta) d\theta d\phi$$

Les fonctions radiales sont normées ainsi  $\int_0^\infty |R_{2,1}(r)|^2 r^2 dr = 1$ . Les harmoniques sphériques sont orthonormées ainsi

$$\iint |Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi = 1$$

et

$$\iint Y_{l,m}^*(\theta, \phi) Y_{l',m'}(\theta, \phi) \sin(\theta) d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Il vient donc  $C^2 = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$  d'où  $C = \pm\sqrt{\frac{2}{3}}$ . On peut choisir  $C = \sqrt{\frac{2}{3}}$ . Le choix  $C = -\sqrt{\frac{2}{3}}$  est aussi possible, et il donne une fonction d'onde différente, par contre le module carré est le même. Le problème ne donnant pas de contraintes supplémentaires, nous pouvons choisir arbitrairement l'un ou l'autre.

B) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable  $\hat{H}$  et les probabilités associées ?

*Réponse:* Les résultats possibles d'une mesure de  $\hat{H}$  dans le cas général sont les  $E_n = -E_0/n^2$ . Ici l'état  $\psi$  est un état avec  $n = 2$  donc le résultat est certain et vaut  $E_2 = -E_0/4$ .

Remarque: on pourrait écrire  $P(E_n) = \sum_{l,m} |\langle n, l, m | \psi \rangle|^2$  en introduisant le ket  $|\psi\rangle$  qui correspond en représentation  $\vec{r}$  à la fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$  et le ket  $|n, l, m\rangle$  qui correspond en représentation  $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$  à  $R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$ . La somme s'étend sur  $l = 0, \dots, n-1$  et  $|m| \leq l$ . Ainsi  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2, 1, 0\rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}}|2, 1, 1\rangle$ . Il suffit alors d'utiliser la condition d'ortho-normalisation des kets  $|n, l, m\rangle$  sachant  $\langle n, l, m | n', l', m' \rangle = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$ . On peut écrire une formule équivalente mais plus lourde pour  $P(E_n)$  avec les fonctions d'ondes en explicitant le produit scalaire sous forme d'intégrale triple.

C) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable carré du moment orbital  $\hat{L}^2$  et les probabilités associées ?

*Réponse:* Les résultats possibles d'une mesure de  $\hat{L}^2$  dans le cas général sont  $\hbar^2 l(l+1)$ . Ici l'électron occupe un état avec seulement  $l = 1$  donc la seule valeur possible est  $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$  avec probabilité 1.

Remarque: on pourrait écrire  $P(\hbar^2 l_0(l_0+1)) = \sum_{nm} |\langle n, l_0, m | \psi \rangle|^2$  en sommant sur tous les  $n, m$  compatibles avec  $l = l_0$ , i.e. ceux tels que  $\hat{L}^2 |n, l_0, m\rangle = \hbar^2 l_0(l_0+1) |n, l_0, m\rangle$ . Ici

$$\begin{aligned} P(\hbar^2 l_0(l_0+1)) &= \sum_{nm} \left| \langle n, l_0, m | \left( \frac{1}{\sqrt{3}}|2, 1, 0\rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}}|2, 1, 1\rangle \right) \right|^2 \\ &= \frac{1}{3}\delta_{l_0 1} + \frac{2}{3}\delta_{l_0 1} \\ &= \delta_{l_0 1} \end{aligned}$$

D) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure dans cet état de l'observable  $\hat{L}_z$  et les probabilités associées ?

*Réponse:*

Les résultats possibles d'une mesure de  $\hat{L}_z$  dans le cas général sont  $m\hbar$ . Ici l'électron occupe une combinaison linéaire d'états avec  $m = 0$  et  $m = 1$ . Les résultats possibles d'une mesure de  $L_z$  sont donc 0 avec probabilité  $1/3$  et  $\hbar$  avec probabilité  $2/3$ .

En formalisant on écrirait :  $P(m_0\hbar) = \sum_{nl} |\langle n, l, m_0 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m_0 0} + i\sqrt{\frac{2}{3}}\delta_{m_0 1} \right|^2$ .

On effectue maintenant concrètement une mesure de la composante du spin de l'électron dans le plan  $xOy$  le long de l'axe orienté à  $+30^\circ$  par rapport à l'axe des



abscisses ( $0x$ ), donc  $\theta = 90^\circ$  et  $\phi = +30^\circ$ .

E) Après cette première mesure, quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure de l'observable carré du moment cinétique de spin de l'électron  $\hat{S}^2$  et les probabilités associées ? Justifier la réponse.

*Réponse:* Le seul résultat possible est  $s(s+1)\hbar^2$ , donc avec une probabilité  $P = 1$ .

F) Quelles sont les valeurs possibles du résultat d'une mesure de l'observable  $\hat{S}_z$  et les probabilités associées ?

*Réponse:* Dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  des vecteurs propres de  $\hat{S}_z$  on a

$$\begin{aligned}\hat{S}_{30^\circ} &= \cos(30^\circ)\hat{S}_x + \sin(30^\circ)\hat{S}_y = \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{S}_x + \frac{1}{2}\hat{S}_y = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[ \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{i}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Les vecteurs propres de  $\hat{S}_{30^\circ}$  sont

$$\begin{aligned}|+\rangle_{30^\circ} &= \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}-i}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad \text{correspondant à la valeur propre } s_{30^\circ} = \frac{\hbar}{2} \\ |-\rangle_{30^\circ} &= \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}+i}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad \text{correspondant à la valeur propre } s_{30^\circ} = -\frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

Les deux résultats possibles pour la mesure de  $\hat{S}_z$  sont

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{2} : \quad \text{avec probabilité } P_{\frac{\hbar}{2}} &= \left| \frac{\sqrt{3}+i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \\ -\frac{\hbar}{2} : \quad \text{avec probabilité } P_{-\frac{\hbar}{2}} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Donc, le résultat de la mesure et la probabilité associée ne dépend pas de la mesure juste avant.

G) Si maintenant on mesure la position de l'électron, quelle est la densité de probabilité de le trouver en  $\vec{r}(r, \theta, \phi)$  ?

*Réponse:* La densité de probabilité  $dP$  est donnée par le module carré de la fonction d'onde, donc

$$dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2 \left( \left| \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0}(\theta, \phi) + i C Y_{1,1}(\theta, \phi) \right|^2 \right)$$

H) Expliquer pourquoi la mesure de la position et du spin le long de  $z$  sont compatibles, et ce que cela signifie.

*Réponse:* La mesure de la position et du spin le long de  $z$  sont compatibles parce que les observable  $\hat{r}$  et  $\hat{S}_z$  commutent, vu qu'ils agissent sur des variables différentes,  $[\hat{r}, \hat{S}_z] = 0$ . Le fait qu'ils commutent veut aussi dire que la mesure de l'une ne perturbe pas le résultat attendu de la mesure de l'autre.

#### 4 Exercice : Etat stationnaire

Un système quantique unidimensionnel est décrit par l'observable Hamiltonien:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$$

Démontrer que, si le système est dans un état propre de l'observable Hamiltonien  $\hat{H}$ , alors la valeur moyenne de l'opérateur impulsion  $\hat{p}_x$  vaut zéro. Commenter ce résultat.

*Réponse:* On sait que le système se trouve dans un état propre de l'observable Hamiltonien  $\hat{H}$ , ce qui veut dire que l'état, que nous indiquerons par  $|\psi_n\rangle$ , satisfait l'équation aux valeurs propres pour l'observable Hamiltonien  $\hat{H}$ . Ecrivons l'équation aux valeurs propres de l'observable Hamiltonien  $\hat{H}$  dans l'espace des *ket*

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

et dans l'espace dual, donc l'espace des *bra*, en se rappelant que l'observable Hamiltonien est autoadjoint

$$\langle\psi_n| \hat{H} = E_n \langle\psi_n|$$

On sait aussi que  $\hat{p}_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$ , voir réponse à la question 2.1.3. La valeur moyenne de l'observable  $\hat{p}_x$  s'écrit alors:

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}_x\rangle &= \langle\psi_n| \hat{p}_x |\psi_n\rangle = \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| [\hat{H}, \hat{x}] |\psi_n\rangle = \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) |\psi_n\rangle = \\ &= \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| \hat{H}\hat{x} |\psi_n\rangle - \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| \hat{x}\hat{H} |\psi_n\rangle = \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| E_n \hat{x} |\psi_n\rangle - \frac{im}{\hbar} \langle\psi_n| \hat{x} E_n |\psi_n\rangle = \\ &= \frac{im}{\hbar} E_n \langle\psi_n| \hat{x} |\psi_n\rangle - \frac{im}{\hbar} E_n \langle\psi_n| \hat{x} |\psi_n\rangle = \frac{imE_n}{\hbar} (\langle\psi_n| \hat{x} |\psi_n\rangle - \langle\psi_n| \hat{x} |\psi_n\rangle) = 0 \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'équation aux valeurs propres dans l'espace des *bra* et celle dans l'espace des *ket*.

Ce résultat nous montre que, dans un état stationnaire de l'énergie, la valeur moyenne de l'impulsion est nulle. En prenant les valeurs moyennes, on peut écrire

$$\langle\hat{p}_x\rangle = m \langle v_x \rangle \longrightarrow \langle v_x \rangle = \frac{\langle\hat{p}_x\rangle}{m} = 0$$

Donc, dans un état stationnaire de l'énergie, la valeur moyenne de la vitesse  $\langle v_x \rangle$  vaut zéro, donc cela implique qu'il n'y a pas de mouvement au sens classique. Ce résultat a une conséquence importante. Par exemple, un oscillateur harmonique dans un état stationnaire n'oscille pas. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, l'électron est dans un état stationnaire, ce qui veut dire que sa distribution de probabilité de présence est délocalisée autour du noyau. Donc l'électron "ne tourne pas" autour du noyau, et sa vitesse en moyenne vaut zéro aussi.

## 5 Problème : Photodétection infrarouge à boîtes quantiques

Les boîtes quantiques de semi-conducteurs sont des nanostructures qui forment des puits d'énergie potentielle tridimensionnels pour les électrons. Les boîtes quantiques constituent des "atomes artificiels" dans une matrice solide.

L'objet de ce problème est de mettre en évidence l'absorption infrarouge de ces boîtes quantiques à des longueurs d'onde  $\lambda$  qui correspondent au rayonnement thermique des objets à température ambiante (rayonnement de corps noir:  $\lambda \sim 10\text{-}30 \mu\text{m}$ ).

Cela ouvre la voie à une multitude d'applications professionnelles et domestiques. L'absorption infrarouge de ces nanostructures peut être notamment exploitée pour fabriquer des photodétecteurs infrarouges pour l'imagerie thermique médicale.

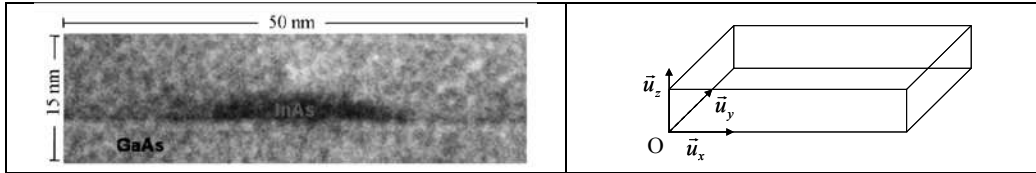


Figure 1: (A gauche) Coupe x0z d'une boîte quantique de semi-conducteurs obtenue par microscopie électronique en transmission. (A droite) Forme simplifiée du puits d'énergie potentielle formé par la boîte quantique.

Une boîte quantique "auto-assemblée" typique est représentée sur la Figure 1 (zone sombre en forme de lentille aplatie). On approximera sa forme aplatie par un parallélépipède rectangle de taille  $L_x$ ,  $L_y$  et  $L_z$  le long des axes du repère orthonormé  $(O, \vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ .

On admettra que l'effet de tous les atomes du cristal sur un électron *revient à* :

- donner à cet électron une masse *effective*  $m$  plus légère que la masse  $m_0$  dans le vide :  $m = 0,07m_0$
- considérer que cet électron évolue dans un champ de force dérivant d'une énergie potentielle *effective*  $V$  nulle dans la boîte quantique et suffisamment grande à l'extérieur pour être considérée comme infinie.

$$\begin{cases} V(x, y, z) = 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L_x \text{ et } 0 \leq y \leq L_y \text{ et } 0 \leq z \leq L_z \\ V(x, y, z) = \infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (1)$$

Le hamiltonien de l'électron s'écrit:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V, \quad \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (2)$$

Par souci de simplicité, on ne considèrera pas le spin des électrons, qui seront donc décrits uniquement au travers de leur fonction d'onde spatiale.

## 5.1 Puits quantique infini à une dimension

Avant de traiter le problème à trois dimensions, on considère d'abord le problème du puits quantique infini à une dimension, de largeur  $L$  le long de  $x$ .

- 5.1.1 Quelle équation différentielle vérifie la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  de l'électron ?
- 5.1.2 De façon générale que sont les états stationnaires ? Quelle équation vérifient-ils ? Pourquoi les appelle-t-on ainsi ?
- 5.1.3 Donner, sans les justifier, les expressions des fonctions d'onde  $\phi_n(x)$  et des énergies  $E_n$  des états stationnaires du puits quantique infini unidimensionnel.
- 5.1.4 Expliquer pourquoi, en mécanique quantique, on cherche à calculer les états stationnaires et donner la forme de la solution générale  $\psi(x, t)$ .

Dans la suite on ne considèrera donc que les états stationnaires, sans leur dépendance en temps.

## 5.2 Structure électronique d'une boîte quantique

On revient au cas tridimensionnel.

- 5.2.1 Écrire l'équation différentielle vérifiée par les états stationnaires  $\chi(x, y, z)$  de l'électron confiné dans une telle boîte quantique. Quelles sont les conditions aux limites sur le bord de la boîte pour la fonction  $\chi$  ?
- 5.2.2 Montrer que le produit des fonctions d'onde stationnaires du puits quantique infini à une dimension le long de  $x, y$  et  $z$  sont des états stationnaires pour la boîte quantique à trois dimensions. On donnera l'expression des énergies  $E_{n_x, n_y, n_z}$  et des fonctions d'onde *normées*  $\chi_{n_x, n_y, n_z}$  correspondantes, qu'on indexera par trois entiers  $n_x, n_y$  et  $n_z$ . Quelles valeurs prennent les trois entiers  $n_x, n_y$  et  $n_z$  ?
- 5.2.3 Représenter *qualitativement* sur un diagramme d'énergie l'énergie potentielle le long d'un des axes  $x, y$  ou  $z$  et l'énergie des 3 premiers niveaux discrets de la boîte quantique dans le cas où  $L_z \ll L_y < L_x$  avec  $L_y$  légèrement inférieur et différent de  $L_x$ . Dans l'ordre des énergies on note ces trois niveaux  $S, P_-$  et  $P_+$ . Quelles sont les énergies  $E_S, E_{P_-}$  et  $E_{P_+}$  de ces trois niveaux (ne pas faire d'approximation) ? Donner l'expression exacte des énergies  $E_{SP_-}$  et  $E_{SP_+}$  des deux transitions de l'électron de l'état fondamental  $S$  vers les états excités  $P_-$  et  $P_+$ .
- 5.2.4 Calculer, dans l'état fondamental, les moyennes de la position:  $\langle \hat{x} \rangle, \langle \hat{x}^2 \rangle$ . Donner l'expression de  $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$  pour cet état. Voir le formulaire à la partie 5.5.

- 5.2.5 Calculer dans l'état fondamental les moyennes :  $\langle \hat{p}_x \rangle$ ,  $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ . Donner l'expression de  $\Delta p_x = \sqrt{\langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2}$  pour cet état. Voir le formulaire à la partie 5.5.
- 5.2.6 Que représentent ces valeurs  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$ ? Que vaut la valeur du produit et quel commentaire cela vous inspire-t-il ?
- 5.2.7 Expliquer pourquoi, contrairement à la mécanique classique, l'énergie du niveau fondamental de la boîte quantique n'est pas nulle.

### 5.3 Transitions optiques

L'électron dans l'état fondamental S de la boîte quantique peut absorber des photons dont l'énergie  $\hbar\omega$  vaut  $\hbar\omega = E_{SP-}$  ou  $\hbar\omega = E_{SP+}$  et être promu sur le premier niveau P- ou le deuxième niveau excité P+ de la boîte quantique. On admettra que, lorsqu'elle est faible, l'absorption A d'un ensemble de boîtes quantiques modifie l'intensité I de la lumière d'une quantité  $\Delta I$  suivant la loi d'atténuation :

$$A = -\frac{\Delta I}{I} = K \Delta E |\vec{d} \cdot \vec{\epsilon}|^2 \quad (3)$$

où  $\vec{d} = \langle \psi_f | \hat{r} | \psi_i \rangle$  est associé au dipôle  $-e\vec{r}$  de l'électron et traduit l'oscillation de charge qui se produit sous illumination lors de sa transition d'un état initial  $|\psi_i\rangle$  vers un état final  $|\psi_f\rangle$ .  $\vec{\epsilon}$  est la polarisation de la lumière, vecteur unitaire que l'on considérera dans la suite soit le long de  $\vec{u}_x$ , soit le long de  $\vec{u}_y$ .  $\Delta E = |E_f - E_i| = \hbar\omega$  est l'énergie de la transition, et K est une constante qui fait intervenir la densité surfacique de boîtes quantiques traversées par la lumière.

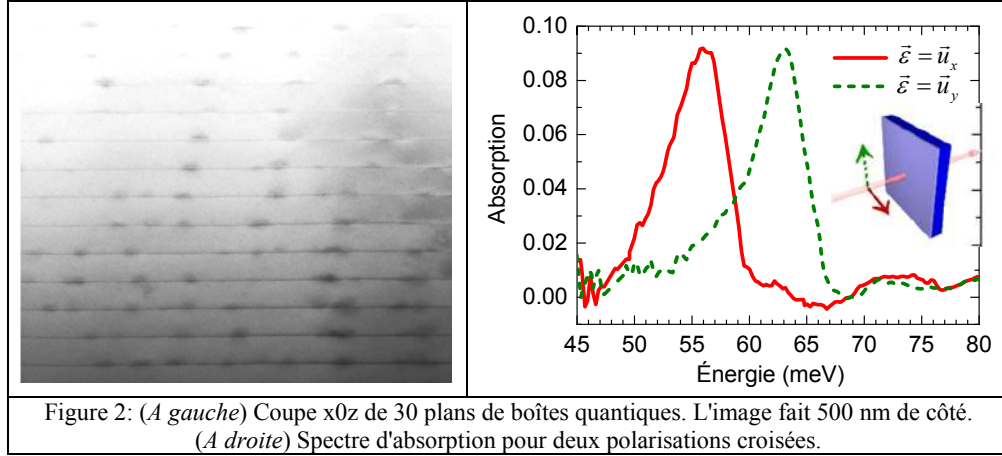
- 5.3.1 Que vaut  $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$  pour les deux transitions  $S \rightarrow P_-$  et  $S \rightarrow P_+$  ?
- 5.3.2 Quelle doit être la polarisation de la lumière pour que l'électron absorbe le plus de photons lors de la transition  $S \rightarrow P_-$  ? Idem pour la transition  $S \rightarrow P_+$ .

### 5.4 Application numérique : absorption infrarouge expérimentale

On fait croître un ensemble de boîtes quantiques (Figure 2-Gauche). L'échantillon contient typiquement des milliards de telles nanostructures. Le spectre d'absorption optique de cet ensemble est mesuré par une expérience de transmission de lumière dans l'infrarouge comme illustré sur la Figure 2-Droite. Sur le spectre d'absorption, l'énergie  $\hbar\omega$  des photons incidents varie de 45 meV à 80 meV. L'absorption est mesurée pour deux polarisations incidentes dans le plan des couches  $\vec{\epsilon} = \vec{u}_x$  et  $\vec{\epsilon} = \vec{u}_y$ .

Sur le spectre, il faut imaginer que chaque boîte quantique contribue à l'absorption avec une raie d'absorption ultrafine à une énergie  $\hbar\omega$  qui lui est propre et qui dépend de sa taille. Il y a une variation de taille de boîte quantique à boîte quantique. L'absorption de l'ensemble présente donc une largeur spectrale plus importante. Comme on peut le voir sur le spectre, cette largeur est d'environ 6 meV à mi-hauteur.

On remarque que, suivant la polarisation sondée, l'absorption de l'ensemble présente un maximum à 56 meV ou 63 meV.



- 5.4.1 Application numérique (A. N.) : à quelles longueurs d'onde les deux résonances infrarouges maximum à 56 meV et 63 meV correspondent-elles ?
- 5.4.2 A. N. : quelles sont les tailles moyennes  $L_x$  et  $L_y$  déduites de ce spectre expérimental ? Sont-elles égales ? Comment se comparent-elles à la taille typique observée sur l'image de la Figure 1-Gauche (très inférieure, très supérieure, à peu près égale) ?
- 5.4.3 A. N. : quelles sont approximativement les variations de taille  $\delta L_x$  et  $\delta L_y$  de boîte quantique à boîte quantique que l'on peut déduire de tels spectres d'absorption d'ensemble ? Pour comparaison, la plus petite variation de longueur attendue correspond à l'épaisseur d'une monocouche atomique dans le matériau, soit approximativement de 0,28 nm.
- 5.4.4 L'amplitude maximale  $A_{\max}$  de l'absorption mesurée est 0,09. On donne:

$$K = N_{\text{plans}} n_0 \frac{e^2}{\hbar n_{\text{opt}} c \epsilon_0} \frac{2\sqrt{\pi \ln(2)}}{W}$$

$N_{\text{plans}} = 30$  est le nombre de plan de boîtes quantiques.

$n_0 = 4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  est la densité surfacique de boîtes quantiques sur un plan.

$n_{\text{opt}} = 3,3$  est l'indice optique du matériau.

$W = 6 \text{ meV}$  est la largeur à mi-hauteur de l'absorption

A. N. : quelle valeur de longueur de dipôle  $d_x$  (exprimé en nm) déduit-on expérimentalement pour la transition S→P. ? Comment cela se compare-t-il (très inférieure, très supérieure, à peu près égale) à la valeur calculée en 5.3.1 (on prendra  $L_x = 17 \text{ nm}$ ) ?



## 5.5 Constantes physiques et mathématiques

Attention: la masse effective  $m$  de l'électron dans un semi-conducteur est plus petite que la masse réelle  $m_0$  dans le vide :  $m = 0,07m_0$  (cf le début de l'énoncé).

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$m_0 = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$c = 299792458 \text{ m s}^{-1}$$

$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$$

$$k_B T = 25,85 \text{ meV pour } T = 300 \text{ K}$$

$$n_{opt} = 3,3$$

$$\int_0^\pi \sin^2(u) du = \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^\pi \cos^2(u) du = \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^\pi \sin(u) \cos(u) du = 0$$

$$\int_0^\pi u \sin^2(u) du = \frac{\pi^2}{4}$$

$$\int_0^\pi u \cos^2(u) du = \frac{\pi^2}{4},$$

$$\int_0^\pi u \sin(u) \cos(u) du = -\frac{\pi}{4}$$

$$\int_0^\pi u^2 \sin^2(u) du = \frac{\pi}{12} (2\pi^2 - 3)$$

$$\int_0^\pi u^2 \cos^2(u) du = \frac{\pi}{12} (2\pi^2 + 3)$$

$$\int_0^\pi u^2 \sin(u) \cos(u) du = -\frac{\pi^2}{4}$$

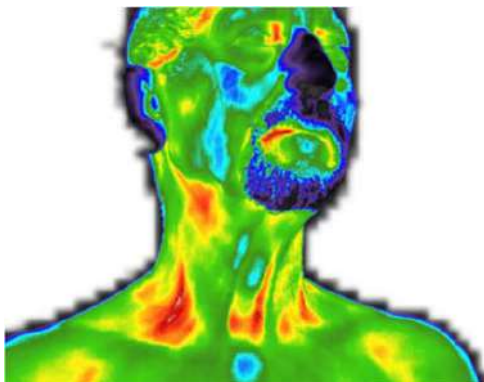
$$\int_0^\pi \sin(u) \sin(2u) du = 0$$

$$\int_0^\pi u \sin(u) \sin(2u) du = -\frac{8}{9}$$

$$2\sqrt{\pi \ln(2)} \approx 3$$

$$\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0,57$$

$$\frac{16}{9\pi^2} \approx 0,18$$



Imagerie infrarouge avec une caméra thermique pour la détection de l'inflammation de la carotide.

## 5 CORRIGÉ du problème : Photodétection infrarouge à boîtes quantiques

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi$$

Cette équation donne la fonction d'onde à tout instant si on la connaît à un instant à un instant initial. L'évolution temporelle est engendrée par le hamiltonien du système.

5.1.2 On note que le hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps. Par définition les états stationnaires sont alors les fonctions d'onde propres  $\phi(x)$  solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps  $H\phi = E\phi$ . On appelle ces états ainsi car ils évoluent dans le temps avec un simple facteur de phase :  $\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x)$  de sorte que la densité de probabilité de présence  $|\psi(x, t)|^2 = |\phi(x)|^2$  ne dépend pas du temps et que le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  représente toujours le même état physique.

5.1.3 Les fonctions d'onde stationnaires sont indicées par un entier  $n > 0$ . On a

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \text{ et } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n^2}{L^2}.$$

5.1.4 Les états stationnaires sont les vecteurs propres de l'observable  $H$ , opérateur hermitien orthogonalement diagonalisable. Par ce que  $H$  est une observable on suppose qu'ils forment une base de l'espace des états, même en dimension infinie, sur laquelle se décompose n'importe quel état quantique. En particulier il suffit de connaître la décomposition à l'instant initial  $t=0$ ,  $\psi(x, t=0) = \sum_n c_n \phi_n(x)$  avec  $c_n \in \mathbb{C}$ , pour la connaître à tout instant ultérieur par le principe de superposition :  $\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \phi_n(x)$ . Résoudre l'équation de Schrödinger, lorsque le hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, revient donc à calculer les états stationnaires.

5.2.1  $\chi$  vérifie  $\hat{H}\chi = E\chi$  soit  $-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2 \chi}{dx^2} + \frac{d^2 \chi}{dy^2} + \frac{d^2 \chi}{dz^2} \right) = E\chi$  dans le volume de la boîte quantique où l'énergie potentielle est nulle.  $\chi(x, y, z) = 0$  sur les bords de la boîte et à l'extérieur où l'énergie potentielle est infinie. La fonction d'onde est continue sur les bords, et la dérivée y est discontinue.

5.2.2 On constate que les fonctions d'onde :

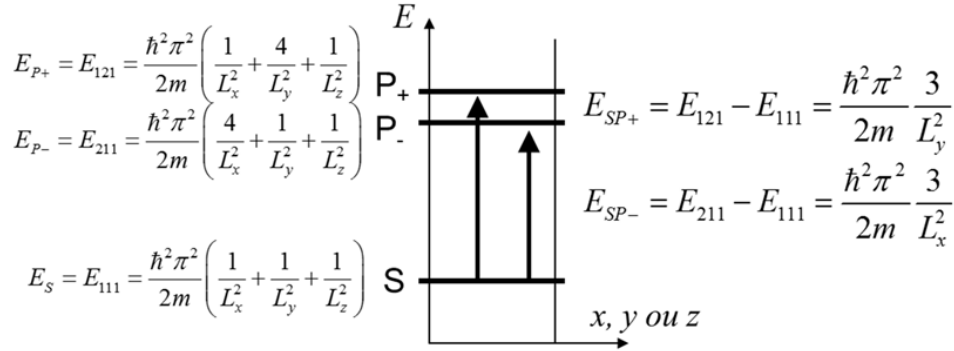
$$\chi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{L_x} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L_y} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L_z} z\right)$$

sont des états stationnaires pour les énergies :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$n_x, n_y, n_z \geq 1$  entiers. On peut montrer qu'on a toutes les solutions comme cela (voir TDs).

5.2.3



5.2.4  $\langle X \rangle = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \chi_{nx,ny,nz}^*(x,y,z) x \chi_{nx,ny,nz}(x,y,z) dx dy dz = \int_0^{L_x} x |\phi_{nx}(x)|^2 dx = \frac{L_x}{2}$   
 car les intégrales sur  $y$  et  $z$  sont normées par construction. En moyenne la particule est au milieu de la boîte quantique le long de  $x$ .  $\langle X^2 \rangle = \frac{L_x^2}{3} \left( 1 - \frac{3}{2\pi^2} \right)$ ,

$$\Delta x = L_x \sqrt{\left( \frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right)} \quad (\text{On peut écrire les mêmes équations en } y \text{ et } z.)$$

5.2.5

$$\langle P_x \rangle = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \chi_{nx,ny,nz}^*(x,y,z) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \chi_{nx,ny,nz}(x,y,z) dx dy dz = -i\hbar \int_0^{L_x} \phi_{nx}(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi_{nx}(x) dx = 0$$

,  $\langle P_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2 \pi^2}{L_x^2}$ ,  $\Delta p_x = \frac{\hbar \pi}{L_x}$  (On peut écrire les mêmes équations en  $y$  et  $z$ .)

5.2.6

$$\Delta x \Delta p_x = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \quad \text{avec } \Delta x \Delta p_x \approx 0.57\hbar. \quad \text{Avec ces définitions des dispersions } \Delta x \text{ et}$$

$\Delta p_x$ , l'inégalité de Heisenberg s'écrit  $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$  qui est donc heureusement vérifiée

ici. On se rappelle que le minimum  $\hbar/2$  n'est atteint que pour un paquet d'ondes gaussien en  $x$  et  $p$ . Il est donc normal ici que le produit  $\Delta x \Delta p_x$  ne vaille pas exactement le minimum puisque la fonction d'onde n'est pas gaussienne.

$\Delta x$  représente la variation (l'écart type) des résultats d'une mesure de position de l'électron toujours préparé dans l'état fondamental S et répétée un grand nombre de fois. De même si on effectue un grand nombre de fois une mesure d'impulsion sur l'électron toujours préparé à chaque fois dans l'état S, on trouve une dispersion du résultat donnée par  $\Delta p_x$ .

5.2.7 La localisation de l'électron sur une distance de  $\Delta x$  induit une dispersion fondamentalement minimale  $\Delta p_x$  sur  $p_x$  donc une valeur minimale pour la valeur de l'énergie  $E_S = \langle S | H | S \rangle = \Delta p_x^2 / 2m$ .

5.3.1 Après une petite intégrale du même type que les précédentes :

$$\vec{d} = \begin{pmatrix} d_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ avec } d_x = -\frac{16}{9\pi^2} L_x \approx -0,18L_x \text{ pour la transition } S \rightarrow P_-$$

$$\vec{d} = \begin{pmatrix} 0 \\ d_y \\ 0 \end{pmatrix} \text{ avec } d_y = -\frac{16}{9\pi^2} L_y \approx -0,18L_y \text{ pour la transition } S \rightarrow P_+$$

5.3.2

Pour la transition vers le premier niveau excité P-,  $\vec{d} = d_x \vec{u}_x$  et la polarisation doit être  $\vec{\varepsilon} = \vec{u}_x$  pour que l'absorption A soit maximale.

On peut faire le même raisonnement pour la transition vers le deuxième niveau excité P+, la polarisation de la lumière doit être le long de  $\vec{u}_y$ .

5.4.1 On a  $\lambda = \frac{hc}{E}$  donc  $\lambda = 22,1 \text{ } \mu\text{m}$  et  $\lambda = 19,7 \text{ } \mu\text{m}$ . Cette différence de longueur

d'onde, pour deux polarisations orthogonales dans le plan des couches, est uniquement due à la différence de taille le long de x et de y. On remarque que l'épaisseur  $L_z$  de la boîte quantique ne joue pas sur la longueur d'onde d'absorption. Enfin la longueur d'onde en jeu se situe dans la gamme spectrale de l'infrarouge moyen, caractéristique de l'émission thermique de corps noir.

5.4.2

On trouve  $L_x \approx 17 \text{ nm}$  et  $L_y \approx 16 \text{ nm}$ . Ça semble correspondre approximativement à ce qu'on peut voir sur la Figure 1. Le modèle n'est pas si faux que ça.

On est obligé de conclure que la boîte quantique est anisotrope dans le plan, un peu plus allongée le long de x, ce qui explique que l'on observe deux absorptions en polarisation croisée le long de x et y à des énergies sensiblement différentes. Cette anisotropie est beaucoup plus difficile à voir en microscopie à transmission électronique. Cette expérience d'absorption optique simple permet donc de remonter à des paramètres géométriques sur la boîte quantique (dans la limite de validité du modèle).

5.4.3

$$\text{Si } E_{SP_-} = E_{211} - E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{3}{L_x^2} \text{ alors } \frac{\delta E_{SP_-}}{E_{SP_-}} \approx 2 \frac{\delta L_x}{L_x} \text{ donc } \delta L_x \approx \frac{L_x}{2} \frac{\delta E_{SP_-}}{E_{SP_-}} \text{ soit}$$

numériquement  $\delta L_x \approx 0,9 \text{ nm}$ . On a de même  $\delta L_y \approx 0,8 \text{ nm}$  soit environ 2-3 monocouches de GaAs en latéral.

5.4.4

$$A_{\max} = N_{\text{plans}} n_0 \frac{e^2}{\hbar n_{\text{opt}} c \epsilon_0} \frac{2\sqrt{\pi \ln(2)}}{W} E d_x^2$$

L'amplitude d'absorption est une mesure de la force d'oscillateur ou de la longueur du dipôle comme on veut : l'application numérique donne expérimentalement  $d_x \approx 3,1 \text{ nm}$

Le calcul donne  $d_x \approx 0,18L_x \approx 3,1 \text{ nm}$ . Hourra, si l'on peut dire, le modèle brutal et grossier du puits quantique infini redonne quand même assez précisément la longueur de dipôle mesuré expérimentalement même si l'accord sur la deuxième décimale est un pur hasard. Bon il y a aussi un modèle ajusté derrière l'expérience (barrière de hauteur infinie) mais c'est quand même pas mal.

Remarque :

L'existence d'un dipôle optique, et donc d'absorption, dans la gamme spectrale de l'infrarouge moyen peut être exploitée pour réaliser des photodétecteurs infrarouges.

Ici on a montré qu'un dipôle non nul existait pour une transition sous illumination de l'électron entre son niveau fondamental S, et un état excité P-. En pratique ce sont aussi des transitions vers les états non-liés qui sont utilisées dans des structures contactées électriquement. Ces états non-liés apparaissent lorsque l'on considère que les barrières d'énergie potentielle ont une hauteur finie au lieu d'infinie. Les contacts métalliques se chargent alors de collecter plus facilement les électrons qui transitent vers ces états délocalisés en absorbant des photons.

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

On rappelle les relations

$$\sin(\alpha) \sin(\beta) = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$$

et

$$\int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha}(x) dx = \frac{\Gamma(\alpha + \frac{1}{2})}{\Gamma(\alpha + 1)} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

où  $\Gamma(\alpha)$  est la fonction d'Euler.

**Exercice 1 : Opérateurs autoadjoints**

On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel  $V(x)$  qui se propage en une seule dimension d'espace, disons  $x$ . On indiquera par  $\mathcal{H}$  l'espace de Hilbert des états du système.

On travaillera en représentation  $\{x\}$ . En utilisant la définition d'opérateur autoadjoint, où  $\hat{A}^+$  est opérateur adjoint de l'opérateur  $\hat{A}$

$$\langle \hat{A}^+ \varphi(x) | \psi \rangle = \langle \varphi(x) | \hat{A} \psi \rangle \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

qui en représentation  $\{x\}$  s'écrit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \hat{A}^+ \varphi(x) \right)^* \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

- A) Démontrer que l'opérateur position  $\hat{x}$  est autoadjoint.
- B) Démontrer que l'opérateur impulsion  $\hat{p}_x$  est autoadjoint.
- C) Démontrer que l'opérateur  $\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$  est autoadjoint.

- D) Démontrer que l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  est autoadjoint.
- E) A quoi correspond, physiquement, l'opérateur  $\hat{T}$  ?
- F) A quoi correspond, physiquement, l'opérateur Hamiltonien ?
- G) Que peut on dire sur les valeurs propres d'un opérateur autoadjoint ?
- H) A quoi correspondent, physiquement, les valeurs propres d'un opérateur autoadjoint ?
- I) A quoi correspondent, physiquement, les vecteurs propres d'un opérateur autoadjoint ?

## Exercice 2: Etallement du paquet d'onde

On considère une particule libre de masse  $m$  en une dimension, disons  $x$ . On indiquera le temps par  $t$ .

- A) A partir du commutateur  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ , déterminer les commutateurs suivants: (a)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}]$  ; (b)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}^2]$  ; (c)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}\hat{p}_x]$  ; (d)  $[\hat{p}_x^2, \hat{p}_x\hat{x}]$
- B) A partir du théorème d'Ehrenfest, déterminer ensuite les dérivées suivantes: (a)  $\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle$  ; (b)  $\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x} \rangle$  ; (c)  $\frac{d}{dt} \langle \hat{x}^2 \rangle$  ; (d)  $\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x}^2 \rangle$  ; (e)  $\frac{d^3}{dt^3} \langle \hat{x}^2 \rangle$  On rappelle ici que la particule étant libre, l'opérateur Hamiltonien, l'opérateur position et l'opérateur impulsion ne dépendent pas explicitement du temps.
- C) A partir du calcul de ces dérivées, en déduire que le mouvement  $\langle \hat{x} \rangle = f(t)$  est linéaire uniforme, comme il se doit, avec une vitesse telle que

$$\langle \hat{p}_x \rangle = mv_0 = \text{constante}$$

et que par un choix convenable de l'origine des  $x$ , on a simplement:

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = v_0 t$$

- D) En déduire aussi que la dispersion  $p_x$ , notée  $\Delta p_x$ , est indépendant du temps, alors que la dispersion en  $x$ , notée par  $\Delta x$ , est une fonction du temps, et que par un choix convenable de l'origine des temps on peut écrire:

$$(\Delta x(t))^2 = (\Delta x(0))^2 + \frac{(\Delta p)^2}{m^2} t^2$$

- E) On définit un temps caractéristique d'évolution de la particule, que nous indiquerons par  $\tau$ , par la relation:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\Delta x}{\tau}$$

En déduire l'inégalité énergie temps de Heinsberg correspondante:

$$\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}$$

où  $\Delta E$  est la dispersion en énergie  $E$  de la particule.

- F) Etudier le cas particulier d'un paquet d'onde gaussien, caractérisé à  $t = 0$  par l'égalité

$$\Delta x(0)\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

- G) Quelles sont les différences entre l'inégalité de Heisenberg position-impulsion et énergie-temps ?

### Exercice 3: Temps de "renaissance"

- A) Ecrire la forme la plus générale de la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  d'une particule de masse  $m$  dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur  $a$ .
- B) Montrer que la fonction d'onde  $\psi$  est périodique de période  $T = \frac{4ma^2}{\hbar\pi}$  (appelé temps de "renaissance" ou "revival" en anglais).
- C) Quel serait ce temps  $T_c$  pour une particule classique rebondissant sur les murs du puits de potentiel (suggestion: exprimer  $T_c$  en fonction de l'énergie  $E$  de la particule, et considérer que si la particule rebondit elle parcourt une distance égale à  $2a$ )?
- D) Pour quelle énergie ces temps sont égaux ?

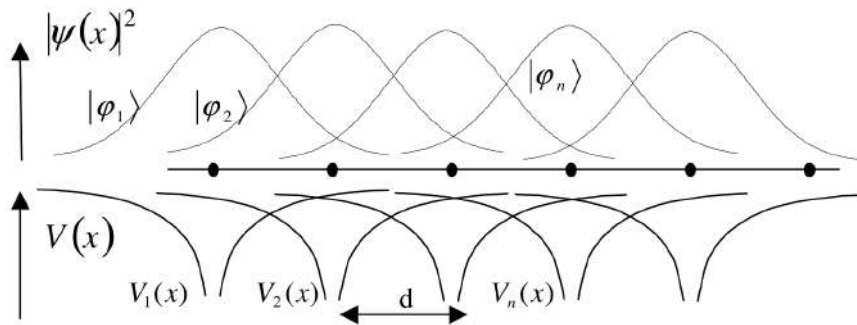
On suppose maintenant qu'une particule quantique est dans l'état fondamental pour ce puits. Par une translation quasi-instantanée à  $t = 0$ , le mur de droite du puits de potentiel est poussé de telle sorte que la largeur du puits est maintenant  $2a$ . On suppose que l'état de la particule à l'instant  $t = 0$  évolue dans le nouveau puits à partir de son état précédent jusqu'à un nouvel état final. On mesure maintenant l'énergie de la particule.

- E) Quel est le résultat le plus probable de la mesure ? Quelle est la probabilité d'obtenir cette valeur ?
- F) Quelle est la valeur moyenne de l'énergie dans l'état  $\psi(x, t)$  ?



## Exercice 4: Les électrons dans les solides

On considère un cristal unidimensionnel (figure) constitué d'atomes monoélectroniques. Pour l'atome numéro  $n$  isolé, l'électron est soumis à un potentiel  $V_n(x)$  et il s'ensuit un état stationnaire fondamental localisé  $|\varphi_n\rangle$  (le seul qu'on retiendra), d'énergie  $E_0$  identique pour tous les atomes (niveau dégénéré).

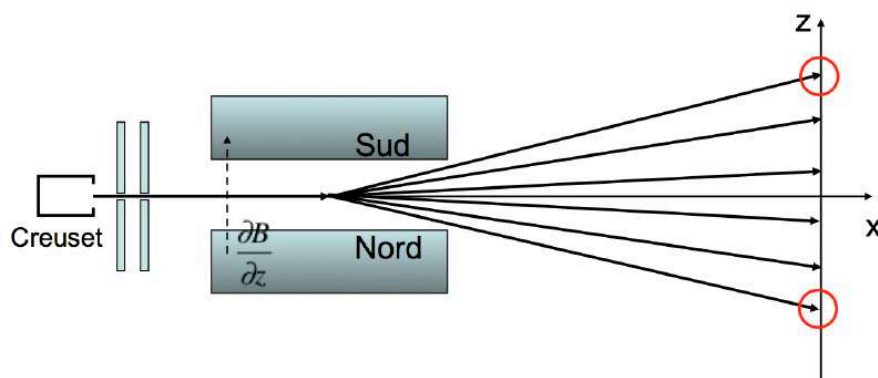


- A) Pour l'électron de l'atome  $n$ , on considère que le potentiel d'un atome immédiatement voisin est une perturbation, et que l'influence des atomes second voisins et plus est négligeable. Ecrire les éléments de matrice (de taille infinie) dans la base  $\{|\varphi_n\rangle\}$ , du hamiltonien total du cristal prenant en compte cette correction. On rappelle que la base  $\{|\varphi_n\rangle\}$  est orthonormée, et que le Hamiltonien, en absence de cette perturbation, serait représenté par une matrice diagonale.
- B) Projeter l'équation  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  sur une orbitale  $|\varphi_n\rangle$ , en déduire une relation de récurrence entre les composantes de  $|\psi\rangle$ . Ici, le ket  $|\psi\rangle$  représente un état quelconque du système.
- C) Montrer que cette relation admet une solution "propagative" pour ses composantes, de la forme  $c_n = C \cdot \exp(iknd)$ , où  $k$  est le vecteur d'onde. A quel intervalle peut-on restreindre  $k$  sans que cela restreigne les fonctions d'onde propagatives possibles ? Calculer la "relation de dispersion"  $E(k)$ . En déduire l'existence de bandes d'énergie permise dans les solides.
- D) Quelle approximation a-t-on pour l'énergie en bas de bande ? Par comparaison au cas d'une particule libre, peut-on en déduire l'existence d'une "masse effective" pour les électrons soumis au potentiel cristallin ?

## Exercice 5: Mesure de spin

On effectue une expérience de type Stern et Gerlach sur un système quantique dont l'état est à déterminer.

La mesure selon l'axe  $z$ , montrée sur la figure, donne 6 taches espacées symétriquement. L'intensité de chaque tache extrême, marquées par les cercles sur la figure, est deux fois plus intense que celle des quatre autres taches. Les quatre taches centrales ont la même intensité. A partir de ces résultats, écrire l'état de ce système quantique (rédiger en détaillant et justifiant).



## Exercice 6: Puits de pontentiel

Une particule de masse  $m$ , à une dimension, est soumise à une énergie potentielle donnée par:

$$V(x) = V_0 \tan^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad \text{si} \quad |x| < \frac{a}{2}$$

$$V(x) \rightarrow \infty \quad \text{si} \quad |x| > \frac{a}{2}$$

où  $V_0 > 0$ .

- A) Le spectre de l'opérateur hamiltonien correspondant, est-il continu, discret, ou les deux? Expliquer la réponse.
- B) Afin de résoudre l'équation de Schrödinger, on pose

$$x = \frac{a}{\pi} t \quad ; \quad V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} u \quad ; \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \epsilon$$

(attention, ici la variable  $t$  n'est pas le temps)

Quelle sont les dimensions des nouvelles variables  $t$ ,  $u$  et  $\epsilon$ ?

Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps en utilisant ces nouvelles variables.

- C)** On cherche une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sous la forme

$$\psi_0(t) = A \cos^\alpha(t)$$

correspondant à une valeur propre  $\epsilon_0$  à déterminer.

Déterminer la constante  $\alpha$ . On exprimera le résultat final en termes de  $m$ ,  $a$ ,  $V_0$ .

- D)** Déterminer la valeur propre  $\epsilon_0$ , correspondant à la solution  $\psi_0(t)$ , ainsi que le niveau d'énergie correspondant. On exprimera le résultat final en termes de  $m$ ,  $a$ ,  $V_0$ .
- E)** Déterminer la valeur de la constante  $A$ .

**PHYSIQUE QUANTIQUE - CORRIGÉ**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

**Exercice 1 : Opérateurs auto-adjoints**

On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel  $V(x)$  qui se propage le long d'une seule dimension d'espace, disons  $x$ . On indiquera par  $\mathcal{H}$  l'espace de Hilbert des états du système.

On travaillera en représentation  $\{x\}$ . En utilisant la définition de l'opérateur auto-adjoint  $\hat{A}^+$  de l'opérateur  $\hat{A}$  :

$$\langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

ce qui en représentation  $\{x\}$  s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}^+ \varphi(x))^* \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

**A)** Démontrer que l'opérateur position  $\hat{x}$  est auto-adjoint.

*Réponse :*

$$\langle \hat{x}^+ \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{x} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) (x \psi(x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x \varphi^*(x)) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x \varphi(x))^* \psi(x) dx = \langle \hat{x} \varphi | \psi \rangle$$

**B)** Démontrer que l'opérateur impulsion  $\hat{p}_x$  est auto-adjoint.

*Réponse :*

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_x^+ \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \hat{p}_x \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = -i\hbar \left( [\varphi^*(x) \psi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \varphi^*(x) \psi(x) dx \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \frac{d}{dx} \varphi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)^* \psi(x) dx = \langle \hat{p}_x \varphi | \psi \rangle \end{aligned}$$

où, dans l'intégration par partie, nous avons utilisé le fait que toute fonction d'onde de carré sommable s'annule à l'infini.

**C)** Démontrer que l'opérateur  $\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$  est autodjoint.

*Réponse :*

$$\langle \hat{T}^+ \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{T} \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \varphi | \hat{p}_x \hat{p}_x \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}_x \varphi | \hat{p}_x \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}_x \hat{p}_x \varphi | \psi \rangle = \langle \hat{T} \varphi | \psi \rangle$$

où nous avons utilisé le fait que l'opérateur  $\hat{p}_x$  est auto-adjoint.

**D)** Démontrer que l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  est auto-adjoint.

*Réponse :* L'opérateur énergie potentielle,  $V(\hat{x})$ , est auto-adjoint parce qu'il est fonction (e.g. polynôme) d'un opérateur auto-adjoint. Donc, l'opérateur hamiltonien  $\hat{H}$  est auto-adjoint parce qu'il donné par la somme de deux opérateurs auto-adjoints.

**E)** À quoi correspond, physiquement, l'opérateur  $\hat{T}_1$ ?

Réponses : C'est l'opérateur associé à l'observable énergie cinétique selon l'axe  $x$ .

F) À quoi correspond, physiquement, l'opérateur Hamiltonien ?

Réponses : C'est l'opérateur associé à l'observable énergie selon l'axe  $x$ .

G) Que peut-on dire des valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint ?

Réponses : Les valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint sont toujours réelles.

H) À quoi correspondent, physiquement, les valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint ?

Réponses : Les valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint correspondent aux résultats possibles de la mesure de la grandeur physique associée à cette observable.

I) À quoi correspondent, physiquement, les vecteurs propres d'un opérateur auto-adjoint ?

Réponses : Les vecteurs propres forment les sous-espaces propres sur lesquels se projettent les états quantiques du système lors de la mesure de l'observable correspondantes et de la réduction du paquet d'onde.

## Exercice 2 : Étalement du paquet d'onde

On considère une particule libre de masse  $m$  en une dimension, disons  $x$ . On indiquera le temps par  $t$ .

A) À partir du commutateur  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ , déterminer les commutateurs suivants :

(a)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}]$ ; (b)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}^2]$ ; (c)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}\hat{p}_x]$ ; (d)  $[\hat{p}_x^2, \hat{p}_x\hat{x}]$

Réponse : On part de la relation  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

(a)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = \hat{p}_x^2\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x = \hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] - [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x = -2i\hbar\hat{p}_x$

(b)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}^2] = \hat{p}_x^2\hat{x}^2 - \hat{x}^2\hat{p}_x^2 = (-2i\hbar\hat{p}_x + \hat{x}\hat{p}_x^2)\hat{x} - \hat{x}^2\hat{p}_x^2 = -2i\hbar\hat{p}_x\hat{x} + \hat{x}[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = -2i\hbar(\hat{p}_x\hat{x} + \hat{x}\hat{p}_x)$  ou encore  $-4i\hbar\hat{x}\hat{p}_x - 2\hbar^2$  ou  $-4i\hbar\hat{p}_x\hat{x} + 2\hbar^2$

(c)  $[\hat{p}_x^2, \hat{x}\hat{p}_x] = \hat{p}_x^2\hat{x}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x^2 = (\hat{p}_x^2\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^2)\hat{p}_x = [\hat{p}_x^2, \hat{x}]\hat{p}_x = -2i\hbar\hat{p}_x^2$

(d)  $[\hat{p}_x^2, \hat{p}_x\hat{x}] = \hat{p}_x^2\hat{p}_x\hat{x} - \hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = -2i\hbar\hat{p}_x^2$

B) À partir du théorème d'Ehrenfest, déterminer ensuite les dérivées suivantes :

(a)  $\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle$ ; (b)  $\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle$ ; (c)  $\frac{d}{dt}\langle\hat{x}^2\rangle$ ; (d)  $\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}^2\rangle$ ; (e)  $\frac{d^3}{dt^3}\langle\hat{x}^2\rangle$

On rappelle ici que la particule étant libre, l'opérateur Hamiltonien, l'opérateur position et l'opérateur impulsion ne dépendent pas explicitement du temps.

Réponse : Le théorème d'Ehrenfest donne l'évolution temporelle de la valeur moyenne d'une observable  $\hat{A}$  pour un état quantique donné :  $\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle$ . Pour une particule libre le Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$$

$$(a) \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\hat{x}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x}, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{2i\hbar m}\langle[\hat{x}, \hat{p}_x^2]\rangle = \frac{\langle\hat{p}_x\rangle}{m}$$

$$(b) \frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_x\rangle = \frac{1}{i\hbar m}\langle[\hat{p}_x, \hat{H}]\rangle = 0$$

$$(c) \frac{d}{dt}\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x}^2, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{2i\hbar m}\langle[\hat{x}^2, \hat{p}_x^2]\rangle = \frac{\langle\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}\rangle}{m} \text{ ou encore } \frac{2\langle\hat{x}\hat{p}_x\rangle - i\hbar}{m} \text{ ou } \frac{2\langle\hat{p}_x\hat{x}\rangle + i\hbar}{m}$$

$$(d) \frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{2}{m}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\hat{p}_x\rangle = \frac{2}{i\hbar m}\langle[\hat{x}\hat{p}_x, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar m^2}\langle[\hat{x}\hat{p}_x, \hat{p}_x^2]\rangle = \frac{2\langle\hat{p}_x^2\rangle}{m^2}$$

$$(e) \frac{d^3}{dt^3}\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{2}{m^2}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_x^2\rangle = \frac{2}{i\hbar m^2}\langle[\hat{p}_x^2, \hat{H}]\rangle = 0$$

C) À partir du calcul de ces dérivées, en déduire que le mouvement  $\langle\hat{x}\rangle = f(t)$  est linéaire uniforme, comme il se doit, avec une vitesse telle que

$$\langle\hat{p}_x\rangle = mv_0 = \text{constante}$$

et que par un choix convenable de l'origine des  $x$ , on a simplement :

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = v_0 t$$

Réponse : L'équation (b) de la question précédente montre que l'on a  $\langle\hat{x}\rangle(t) = v_0 t + x_0$  où  $v_0$  et  $x_0$  sont deux constantes réelles. À partir de l'équation (a) on en déduit  $\langle\hat{p}_x\rangle = mv_0$ . Si on pose  $\hat{x}' = \hat{x} - x_0$  avec  $x_0 = \langle\hat{x}\rangle(t=0)$ , on a  $\langle\hat{x}'\rangle(t) = v_0 t$  dans ce nouveau repère. Dans la suite on se placera dans ce nouveau repère et on notera la

position  $x$  (sans les primes).

**D)** En déduire aussi que la dispersion en  $p_x$ , notée  $\Delta p_x$ , est indépendante du temps, alors que la dispersion en  $x$ , notée par  $\Delta x$ , est une fonction du temps, et que par un choix convenable de l'origine des temps on peut écrire :

$$(\Delta x(t))^2 = (\Delta x(0))^2 + \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} t^2$$

*Réponse :*  $(\Delta p_x)^2 = \langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2 = \langle \hat{p}_x^2 \rangle - m^2 v_0^2$ . D'après le théorème d'Ehrenfest on a  $\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x^2 \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{p}_x^2 \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}_x^2, \hat{H}] \rangle = 0$  donc  $\langle \hat{p}_x^2 \rangle(t)$  est une constante du temps.  $\Delta p_x$  est donc aussi une constante du temps.

$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - v_0^2 t^2$ . D'après l'équation (d) on a  $\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{2 \langle \hat{p}_x^2 \rangle}{m^2} = \frac{2(m^2 v_0^2 + (\Delta p_x)^2)}{m^2} = 2v_0^2 + \frac{2(\Delta p_x)^2}{m^2}$  constant. On en déduit que  $\langle \hat{x}^2 \rangle = \left( v_0^2 + \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} \right) t^2 + at + b$  où  $a$  et  $b$  sont des constantes

d'intégration soit encore  $(\Delta x)^2 = \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} t^2 + at + b$  compte tenu que  $\langle \hat{x} \rangle = v_0 t$  dans le repère choisi. Avec un choix judicieux de l'origine des temps ( $t = t_0 + t'$ ) on peut s'affranchir du terme linéaire en  $t$  et ramener cette expression sous la forme  $(\Delta x(t'))^2 = \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} t'^2 + (\Delta x(t' = 0))^2$  avec pour l'anecdote  $t_0 = -\frac{a m^2}{2(\Delta p_x)^2}$  et

$$(\Delta x(t' = 0))^2 = \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} t_0^2 + at_0 + b.$$

**E)** On définit un temps caractéristique d'évolution de la particule, que nous indiquerons par  $\tau$ , par la relation :

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{\Delta x}{\tau}$$

En déduire l'inégalité énergie-temps de Heisenberg correspondante :

$$\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}$$

où  $\Delta E$  est la dispersion en énergie  $E$  de la particule.

*Réponse :* La définition de  $\tau$  correspond au temps nécessaire au paquet d'onde pour se déplacer en moyenne de son élargissement  $\Delta x$ . Pour relier cet élargissement à la dispersion en énergie il suffit d'appliquer l'inégalité généralisée de Heisenberg  $\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}{2}$  aux observables  $\hat{A} = \hat{x}$  et  $\hat{B} = \hat{H}$ . À partir de  $\Delta x \Delta E \geq \frac{|\langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle|}{2}$  et de (a) donnant  $\Delta x \Delta E \geq \frac{|i\hbar \frac{d \langle x \rangle}{dt}|}{2}$  on déduit de la définition du temps  $\tau : \Delta x \Delta E \geq \frac{\hbar \Delta x}{2\tau}$  soit  $\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}$ .

**F)** Étudier le cas particulier d'un paquet d'onde gaussien, caractérisé à  $t = 0$  par l'égalité

$$\Delta x(0) \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

*Réponse :* Le calcul précédent étant très général (pour une particule libre), il suffit de l'appliquer au cas d'un paquet d'onde gaussien sans faire aucun calcul. Nous allons d'abord étudier i. les composantes du paquet d'onde à l'instant initial, ii. au cours du temps, montrer que iii. la fonction d'onde  $\psi(x, t')$  est et reste gaussienne et iv. décrire son étalement au cours du temps.

i. La fonction d'onde à l'instant initial s'écrit comme un paquet d'onde par transformée de Fourier :  $\psi(x, t' = 0) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \int \Phi(p_x, t' = 0) \exp(i p_x x / \hbar) dp_x$ . Pour un paquet d'onde gaussien,  $\Phi(p_x, t' = 0)$  prend la forme d'une gaussienne. D'après C) l'impulsion moyenne  $\langle \hat{p}_x \rangle$  vaut  $mv_0$  donc la gaussienne est centrée en  $mv_0$ . Elle doit être normalisée en module au carré. Compte tenu de l'expression générique " $1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \int \exp(-u^2/2\sigma^2) du = 1$ " cela s'écrit  $\Phi(p_x, t' = 0) = 1/(\pi \Delta p_x^2)^{1/4} \exp(-(p_x - mv_0)^2 / 2\Delta p_x^2)$ .

ii. La composante  $\Phi(p_x, t' = 0) \exp(i p_x x / \hbar)$  du paquet d'onde est état propre de  $\hat{H} = \hat{p}_x^2 / 2m$  avec l'énergie  $E = p_x^2 / 2m$ . D'après l'équation de Schrödinger cette composante évolue dans le temps avec un simple facteur de phase  $\Phi(p_x, t') = \Phi(p_x, t' = 0) \exp(-i E t' / \hbar)$ . En représentation  $p_x$  la composante du paquet d'onde  $\Phi(p_x, t')$

reste donc gaussienne au cours du temps, de même valeur moyenne  $mv_0$  et d'élargissement constant  $\Delta p_x$  d'après D).

iii. La transformée de Fourier d'une gaussienne étant une gaussienne, la fonction d'onde  $\psi(x, t')$  est également et reste donc gaussienne au cours du temps. D'après C) la fonction d'onde est localisée en moyenne à l'abscisse  $\langle \hat{x} \rangle = v_0 t$  dans le nouveau repère c'est-à-dire que le centre de cette gaussienne se déplace à la vitesse  $v_0$  (vitesse de groupe) le long de l'axe  $x$ . La fonction d'onde s'écrit donc immédiatement sans calcul sous la forme :  $\psi(x, t') = 1/(\pi \Delta x^2)^{1/4} \exp\left(-(x - v_0 t)^2 / 2\Delta x^2\right) \exp(i\varphi(x, t'))$  avec  $\int |\psi(x, t')|^2 dx = 1$  à tout instant. Comme on doit avoir  $\langle \hat{p}_x \rangle = mv_0$  avec  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial_x$  on en déduit  $\varphi(x, t') = mv_0 x / \hbar + \phi(t')$ . L'énergie moyenne constante étant  $E_0 = (mv_0)^2 / 2m$  on a d'après l'équation de Schrödinger  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle : \langle H \rangle = E_0 = i\hbar \langle \psi | \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\hbar \frac{d}{dt} \phi(t')$  soit  $\phi(t') = -E_0 t' / \hbar$  à une constante près.

iv. On notera que pour les temps  $t' > 0$  le paquet d'onde s'étale avec un élargissement  $\Delta x(t')$  donné par D). Dans la limite des temps longs, cet élargissement varie linéairement avec le temps qui passe. Ce phénomène classique d' "étalement du paquet d'onde" aux temps positifs provient de la dispersion en énergie de la fonction d'onde initiale. Chaque onde plane composant le paquet d'onde évolue à sa propre vitesse  $p_x/m$ , d'autant plus grande que la composante est de grande énergie  $E = \frac{p_x^2}{2m}$ . Ce sont ces différences de vitesse de phase entre les composantes qui produisent l'étalement du paquet d'onde aux temps positifs et sa contraction aux temps négatifs.

**G)** Commenter les différences entre l'inégalité de Heisenberg position-impulsion et énergie-temps.

*Réponses :*

Réponse courte : Dans la théorie quantique, le temps n'est pas une observable mais un simple paramètre. La mesure du temps ne perturbe pas le système. L'inégalité énergie-temps est de nature physique différente de l'inégalité sur la position et l'impulsion faisant intervenir deux observables incompatibles, i.e. ne commutant pas, dans le cadre du postulat de la mesure.

Réponse détaillée : L'inégalité de Heisenberg  $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$  relie, pour un état quantique donné, les dispersions sur les résultats de mesures réinitialisées des deux observables  $\hat{x}$  et  $\hat{p}_x$ . L'inégalité de Heisenberg exprime l'impossibilité de construire un état quantique pour lequel les indéterminations (ou la dispersion ou l'élargissement) sur la position et l'impulsion sont aussi petites que l'on veut. On dit que la position et l'impulsion sont deux grandeurs physiques incompatibles. Formellement cela signifie que les observables correspondantes ne commutent pas entre elles :  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0$ . En général la mesure de l'une des observables changera les résultats attendus (probabilités) sur la mesure suivante de l'autre et vice-versa. En revanche le temps  $t$  n'est pas une observable, c'est un simple paramètre dans la théorie quantique. On peut mesurer le temps, en principe, avec une précision aussi grande que l'on veut sans perturber aucune autre quantité physique. L'inégalité de Heisenberg énergie-temps a donc une nature et une signification différente de celle sur la position et l'impulsion. Elle signifie qu'un système ne peut pas évoluer aussi vite que l'on veut ( $\tau$  petit) sans que l'énergie soit suffisamment dispersée pour l'état quantique considéré. Cette relation est intimement liée au fait que les seuls états "stationnaires" ( $\tau = \infty$ ) sont ceux dont l'énergie est parfaitement déterminée ( $\Delta E = 0$ ) c'est-à-dire ceux qui sont des états propres du Hamiltonien (supposé indépendant du temps pour un système isolé). En effet pour un état propre du Hamiltonien, le théorème d'Ehrenfest indique que la valeur moyenne de toute observable (ne dépendant pas explicitement du temps) est constante : l'état est effectivement "stationnaire".

## Exercice 3 : Temps de "renaissance"

**A)** Écrire la forme la plus générale de la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  d'une particule de masse  $m$  dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur  $a$ .

*Réponse :*

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i\hbar \pi^2 n^2 / (2ma^2) t}$$

avec  $\phi_n(x)$  les états stationnaires et  $E_n$  les énergies correspondantes et pour un puits limité entre  $x = 0$  et  $x = a$ . Pour la normalisation on a  $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$ .

**B)** Montrer que la fonction d'onde  $\psi$  est périodique de période  $T = \frac{4ma^2}{\hbar\pi}$  (appelé temps de "renaissance" ou "revival" en anglais).

*Réponse :* Pour que la fonction soit périodique, elle doit satisfaire la condition  $\psi(x, t + T) = \psi(x, t)$ , ce qui donne  $e^{-i\hbar \pi^2 n^2 / (2ma^2) t} = e^{-i\hbar \pi^2 n^2 / (2ma^2) (t+T)}$ . Cela implique

$$e^{-\frac{i\hbar \pi^2 n^2}{2ma^2} T} = e^{-i2\pi n^2}$$

où on utilise le fait que  $n$  est un entier, donc on aura toujours  $e^{-i2\pi n^2} = 1$ . Donc, on a bien

$$\frac{\hbar\pi^2 n^2}{2ma^2} T = 2\pi n^2 \longrightarrow T = \frac{4ma^2}{\hbar\pi}$$

C) Quel serait ce temps  $T_c$  pour une particule classique rebondissant sur les murs du puits de potentiel (suggestion : exprimer  $T_c$  en fonction de l'énergie  $E$  de la particule, et considérer que si la particule rebondit elle parcourt une distance égale à  $2a$ ) ?

Réponse : La distance à parcourir est  $2a$  et la vitesse est  $\frac{1}{2}mv^2 = E$  d'où  $T_c = a\sqrt{\frac{2m}{E}}$ .

D) Pour quelle énergie ces temps sont égaux ?

Réponse :  $\frac{4ma^2}{\hbar\pi} = a\sqrt{\frac{2m}{E}}$  donc  $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = \frac{E_1}{4}$ .

L'énergie qui réalise l'égalité est non triviale et constitue un paradoxe discuté récemment dans e.g. D. Styer, Am. J. Phys. vol 69, 56 (2001).

On suppose maintenant qu'une particule quantique est dans l'état fondamental pour ce puits. Par une translation quasi-instantanée à  $t = 0$ , le mur de droite du puits de potentiel est poussé de telle sorte que la largeur du puits est maintenant  $2a$ . On suppose que l'état de la particule à l'instant  $t = 0$  évolue dans le nouveau puits à partir de son état précédent jusqu'à un nouvel état final. On mesure maintenant l'énergie de la particule.

E) Quel est le résultat le plus probable de la mesure ? Quelle est la probabilité d'obtenir cette valeur ?

On rappelle ici la relation  $\sin(\alpha)\sin(\beta) = \frac{1}{2}[\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$

Réponse : L'état de la particule à  $t = 0$  est donc  $\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$  (à un facteur de phase près pris égal à 1) pour  $0 \leq x \leq a$  et vaut 0 sinon.

Les nouveaux états stationnaires sont les  $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right)$  avec les énergies  $E'_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2a)^2} n^2$ ,  $n$  entier positif non nul.

Il faut donc décomposer  $\psi(x, 0)$  sur la base des nouveaux états propres, c'est-à-dire trouver les  $c_n$  tels que :

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$

En notation de Dirac on a  $|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\phi_n\rangle$  d'où  $\langle \phi_p | \psi(t=0) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \langle \phi_p | \phi_n \rangle = c_p$  en utilisant le fait que les  $\{|\phi_n\rangle\}$  forment une base orthonormée et donc  $\langle \phi_p | \phi_n \rangle = \delta_{n,p}$ . Les coefficients s'expriment donc, en utilisant la représentation 'x' et pour  $p \neq 2$

$$\begin{aligned} c_p &= \int_0^{2a} \phi_p^*(x) \psi(x, 0) dx = \int_0^a \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{p\pi}{2a}x\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ &= \int_0^a \frac{\sqrt{2}}{a} \sin\left(\frac{p\pi}{2a}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ &= \int_0^a \frac{1}{\sqrt{2}a} \left[ \cos\left(\frac{(p-2)\pi}{2a}x\right) - \cos\left(\frac{(p+2)\pi}{2a}x\right) \right] dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \left[ \frac{2a}{(p-2)\pi} \sin\left(\frac{(p-2)\pi}{2a}x\right) - \frac{2a}{(p+2)\pi} \sin\left(\frac{(p+2)\pi}{2a}x\right) \right]_0^a \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sin\left(\frac{p\pi}{2}\right) \left[ \frac{-1}{(p-2)} + \frac{1}{(p+2)} \right] \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{p\pi}{2}\right)}{(4-p^2)} \end{aligned}$$

Si  $p = 2$  on trouve  $c_2 = \int_0^a \frac{\sqrt{2}}{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .

La probabilité  $P(E'_n)$  de trouver la mesure  $E'_n$  est donc donnée par  $P(E'_n) = |c_n|^2$  :



$$\begin{aligned}
P(E'_n) &= 0 \text{ si } n \text{ pair et } n \neq 2 \\
P(E'_n) &= \frac{32}{\pi^2(4-n^2)^2} \text{ si } n \text{ impair} \\
P(E'_2) &= \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Sachant que  $P(E'_n)$  pour  $n$  impair est décroissante et que  $P(E'_1) < P(E'_2)$  le résultat le plus probable de la mesure de l'énergie est  $E'_2$  avec la probabilité  $1/2$ .

**F)** Quelle est la valeur moyenne de l'énergie dans l'état  $\psi(x, t)$  ?

*Réponse :* La méthode la plus directe consiste à écrire

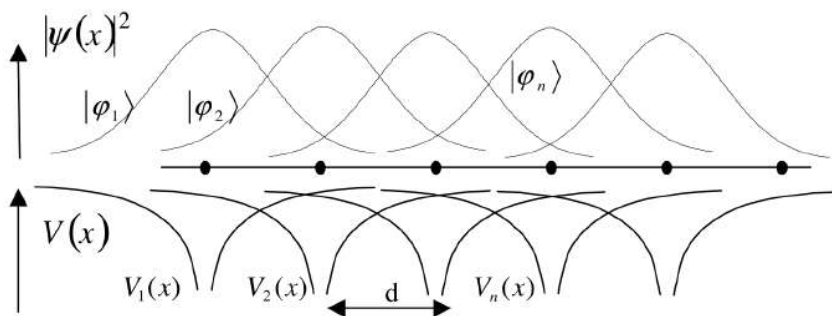
$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle_\psi &= \int \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t) dx \\
&= \int_0^a \psi^*(x, 0) \hat{H} \psi(x, 0) dx \\
&= \int_0^a \psi^*(x, 0) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x, 0) dx
\end{aligned}$$

en notant que  $\hat{H}$  ne dépend pas explicitement du temps donc sa valeur moyenne non plus. On trouve alors

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle_\psi &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}
\end{aligned}$$

## Exercice 4 : Les électrons dans les solides

On considère un cristal unidimensionnel (voir la figure) constitué d'atomes monoélectroniques identiques. Pour l'atome numéro  $n$  isolé, l'électron est soumis à un potentiel  $V_n(x)$  et il s'ensuit un état stationnaire fondamental  $|\varphi_n\rangle$  localisé autour de l'atome (le seul qu'on retiendra), d'énergie  $E_0$  identique pour tous les atomes (niveau d'énergie dégénéré).



**A)** Pour l'électron de l'atome  $n$ , on considère que le potentiel d'un atome immédiatement voisin est une perturbation, et que l'influence des atomes second voisins et plus est négligeable. Écrire les éléments de matrice (de taille infinie) dans la base  $\{|\varphi_n\rangle\}$ , du hamiltonien total de l'électron dans ce cristal prenant en compte cette correction. On rappelle que la base  $\{|\varphi_n\rangle\}$  est orthonormée, et que le Hamiltonien, en absence de cette perturbation, serait représenté par une matrice diagonale.

*Réponse :* Le Hamiltonien de l'électron dans le cristal s'écrit  $\hat{H} = \hat{H}_n + \sum_{n' \neq n} \hat{V}_{n'}$ .  $\hat{H}_n = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_n$  est le hamiltonien de l'électron ne subissant que le potentiel  $V_n(x)$  ( $n$  fixé quelconque). On a donc  $\langle \varphi_p | \hat{H}_n | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_p | E_0 | \varphi_n \rangle = E_0 \delta_{p,n}$  car la base des  $\{|\varphi_n\rangle\}$  est orthonormée et tous les atomes sont identiques. Selon les

approximations suggérées, cet électron dans l'état  $|\varphi_n\rangle$  ne subit en plus que l'énergie potentielle des atomes immédiatement adjacents donc  $\langle\varphi_p|\sum_{n'\neq n}\widehat{V}_{n'}|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_p|\widehat{V}_{n+1} + \widehat{V}_{n-1}|\varphi_n\rangle = 2\delta_{p,n}E_1 + (\delta_{p,n+1} + \delta_{p,n-1})A$  avec  $E_1 = \langle\varphi_n|\widehat{V}_{n\pm 1}|\varphi_n\rangle$  et  $A = \langle\varphi_{n+1}|\widehat{V}_{n+1}|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_{n-1}|\widehat{V}_{n-1}|\varphi_n\rangle$ . En notation de Dirac le Hamiltonien s'écrit donc  $\widehat{H} = \sum_n E'_0 |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n| + A(|\varphi_n\rangle \langle\varphi_{n+1}| + |\varphi_n\rangle \langle\varphi_{n-1}|)$  avec  $E'_0 = E_0 + 2E_1$ . En notation matricielle on a :

$$\widehat{H} = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & E'_0 & A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & E'_0 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & E'_0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A & E'_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

**B)** Projeter l'équation  $\widehat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  sur la direction  $|\varphi_n\rangle$ , en déduire une relation de récurrence entre les composantes de  $|\psi\rangle$ . Ici, le ket  $|\psi\rangle$  représente un état quelconque du système.

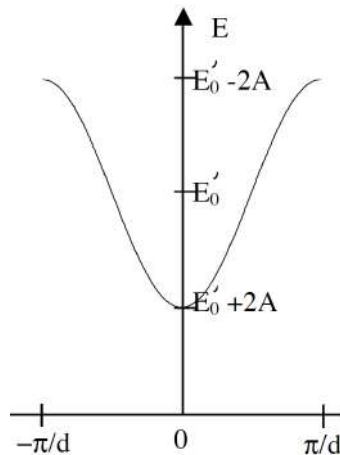
*Réponse :* On pose  $|\psi\rangle = \sum_q c_q |\varphi_q\rangle$  avec  $c_q \in \mathbb{C}$ . On a donc sur la ligne  $n$  de la matrice :  $\langle\varphi_n|\widehat{H}|\psi\rangle = \sum_q c_q \langle\varphi_n|\widehat{H}|\varphi_q\rangle = E'_0 c_n + A(c_{n+1} + c_{n-1}) = E c_n$

**C)** Montrer que cette relation admet une solution "propagative" pour ses composantes, de la forme  $c_n = C \cdot \exp(iknd)$ , où  $k$  est le vecteur d'onde. À quel intervalle peut-on restreindre  $k$  sans que cela restreigne les fonctions d'onde propagatives possibles? Calculer la "relation de dispersion"  $E(k)$ . En déduire l'existence de bandes d'énergie permise dans les solides.

*Réponse :* Des coordonnées de la forme  $c_n = C \cdot \exp(iknd)$  sont solutions si :

$$E'_0 C \exp(iknd) + A(C \exp(ik(n+1)d) + C \exp(ik(n-1)d)) = E C \exp(iknd)$$

soit  $E(k) = E'_0 + A(\exp(ikd) + \exp(-ikd)) = E'_0 + 2A \cos(kd)$ . Les coordonnées  $c_n$  correspondent à des composantes complexes dont l'amplitude est constante et dont la phase varie linéairement avec le numéro de l'atome, c'est-à-dire avec sa position. Combiné avec la dépendance temporelle en  $\exp(-iEt/\hbar)$  due à l'équation de Schrödinger, on a  $c_n(t) = C \cdot \exp(i(knd - \omega t))$  avec  $\omega = E/\hbar$  ce qui correspond à l'échantillonnage sur la position des atomes d'une onde progressive  $\exp(i(kx - \omega t))$ . Parce que  $n$  est entier deux valeurs de  $k$  séparées de  $2\pi/d$  correspondent à la même solution. On peut donc se restreindre à considérer les valeurs de  $k$  par exemple dans l'intervalle  $[-\pi/d, \pi/d]$ . On appelle cet intervalle pour les valeurs de  $k$  la "première zone de Brillouin".  $E(k) = E'_0 + 2A \cos(kd)$  est la "relation de dispersion" qui donne les énergies propres du cristal (infini) repérées par  $k$ . Cette relation définit une bande de niveaux d'énergie ou "bande d'énergies" permises de largeur finie. Ces énergies sont comprises continument entre  $E'_0 - 2A$  et  $E'_0 + 2A$  traduisant la levée de dégénérescence induite par le couplage.



**D)** Quelle approximation a-t-on pour l'énergie en bas de bande? Par comparaison au cas d'une particule libre, peut-on en déduire l'existence d'une "masse effective" pour les électrons soumis au potentiel cristallin?

*Réponses :* On notera que  $A < 0$  pour un potentiel coulombien  $V_n$  négatif. Autour de l'origine on peut donc écrire  $E(k) = E'_0 + 2A \cos(kd) \approx E'_0 - 2|A| + |A|d^2k^2$ . À une constante arbitraire près, on reconnaît l'énergie

cinétique  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$  d'une particule libre de fonction d'onde  $\exp(ikx)$  et de masse "effective"  $m^* = \frac{\hbar^2}{2|A|d^2}$ .

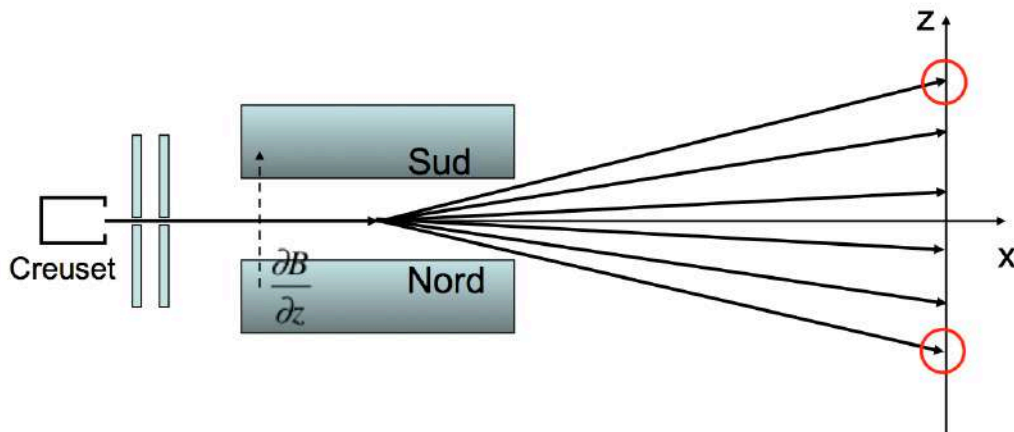
Pour des énergies proches du "bas de bande" tout se passe donc comme si le mouvement de l'électron était libre dans le champ de force des atomes, ce qui est assez remarquable. On notera que la masse effective qui traduit ce mouvement diffère de celle d'un électron libre dans le vide. Cette masse effective synthétise l'interaction de l'électron avec le potentiel des atomes du cristal. En pratique cette masse peut être plus grande ou plus petite (de plus d'un ordre de grandeur) que la masse de l'électron dans le vide. Il s'agit d'un effet analogue à l'effet d'indice sur la vitesse de la lumière dans les milieux matériels où l'effet de l'ensemble des dipôles interagissant avec le champ électromagnétique se ramène au final à une propagation linéaire de la lumière mais avec une vitesse abaissée de la valeur de l'indice optique.

La masse effective représente un paramètre clef dans les phénomènes de conduction, en particulier dans les matériaux pour lesquels cette masse effective est plus "légère". Plus la constante de couplage interatomique  $A$  est élevée, plus grande sera la probabilité de transfert spatial d'un site atomique à l'autre, favorisant ainsi la conduction.

## Exercice 5 : Mesure de spin

On effectue une expérience de type Stern et Gerlach sur un système quantique dont l'état est à déterminer.

La mesure selon l'axe  $z$ , montrée sur la figure, donne 6 taches espacées symétriquement. L'intensité de chaque tache extrême, marquées par les cercles sur la figure, est deux fois plus intense que celle des quatre autres taches. Les quatre taches centrales ont la même intensité. À partir de ces résultats, écrire l'état de ce système quantique (rédiger en détaillant et justifiant).



*Réponse :* Un appareil de type Stern et Gerlach mesure la projection du spin  $\hat{S}_z$  du système le long de l'axe  $z$  de l'appareil. Le spin  $s$  peut être entier ou demi-entier. On sait aussi qu'à chaque valeur du spin  $s$  correspond  $(2s + 1)$  valeurs de  $m_s$ , quelque soit la direction considérée. Dans ce cas nous mesurons 6 taches, donc l'état de spin du système mesuré est  $s = 5/2$ . L'état initial du système sera une combinaison linéaire des six états  $m_s$  possibles, donc :

$$|\psi\rangle = c_1 \left| \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \right\rangle + c_2 \left| \frac{5}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle + c_3 \left| \frac{5}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + c_4 \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + c_5 \left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + c_6 \left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle$$

L'intensité de chaque tache est liée à la probabilité de mesure sur chaque état propre  $|s, m_s\rangle$  de  $\hat{S}_z$ . Supposons que l'intensité de chaque tache centrale soit  $I_0$ , et que celle des deux taches extrêmes soit  $2I_0$ . Donc

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^6 |c_i|^2 = 1, & |c_1|^2 = |c_6|^2, \\ |c_1|^2 = 2|c_2|^2 & \text{et } |c_2|^2 = |c_3|^2 = |c_4|^2 = |c_5|^2 \end{cases}$$

$$2|c_1|^2 + 4|c_2|^2 = 1 \longrightarrow 4|c_2|^2 + 4|c_2|^2 = 1 \longrightarrow 8|c_2|^2 = 1 \longrightarrow |c_2|^2 = \frac{1}{8} \longrightarrow |c_1|^2 = \frac{1}{4}$$

$$c_1 = \frac{e^{i\varphi_1}}{2} \text{ et } c_2 = \frac{e^{i\varphi_2}}{2\sqrt{2}}$$

L'état du système s'écrit donc

$$|\psi\rangle = \frac{e^{i\varphi_1}}{2} \left| \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\varphi_2}}{2\sqrt{2}} \left| \frac{5}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\varphi_3}}{2\sqrt{2}} \left| \frac{5}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\varphi_4}}{2\sqrt{2}} \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\varphi_5}}{2\sqrt{2}} \left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + \frac{e^{i\varphi_6}}{2} \left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle$$

## Exercice 6 : Puits de pontentiel

Une particule de masse  $m$ , à une dimension, est soumise à une énergie potentielle donnée par :

$$V(x) = V_0 \tan^2 \left( \frac{\pi x}{a} \right) \quad \text{si} \quad |x| < \frac{a}{2}$$

$$V(x) \rightarrow \infty \quad \text{si} \quad |x| > \frac{a}{2}$$

où  $V_0 > 0$ .

**A)** Le spectre de l'observable hamiltonienne correspondante est-il continu, discret, ou les deux ? Expliquer la réponse.

*Réponse :* Il s'agit d'un puits dont la hauteur est infinie. Le mouvement de la particule est strictement confiné à l'intérieur du puits quantique. Du fait des conditions aux limites sur les bords (annulation de la fonction d'onde) pour l'équation ondulatoire de Schrodinger, le spectre en énergie est donc entièrement discrétisé.

**B)** Afin de résoudre l'équation de Schrödinger, on pose :

$$x = \frac{a}{\pi} t \quad ; \quad V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} u \quad ; \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \epsilon$$

(attention, ici la variable  $t$  n'est pas le temps)

Quelle sont les dimensions des nouvelles variables  $t$ ,  $u$  et  $\epsilon$  ?

Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps en utilisant ces nouvelles variables.

*Réponse :* L'analyse dimensionnelle montre facilement que les trois nouvelles variables sont sans dimension. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V_0 \tan^2 \left( \frac{\pi x}{a} \right) \right] \psi(x) = 0 \quad \text{pour} \quad |x| < \frac{a}{2}$$

$\psi(x) = 0$  pour  $|x| > \frac{a}{2}$ , car l'énergie potentielle est infinie dans cette région. La fonction d'onde étant continue partout, on aura  $\psi(\pm a/2) = 0$ .

Sachant que  $x = \frac{a}{\pi} t$ , on a  $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{\pi^2}{a^2} \frac{d^2}{dt^2}$ . En posant  $\chi(t) = \psi(x)$

$$\frac{d^2}{dt^2} \chi(t) + \frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2} [E - V_0 \tan^2(t)] \chi(t) = 0 \quad \text{pour} \quad |t| < \frac{\pi}{2}$$

avec la condition  $\chi(t) = 0$  pour  $|t| > \frac{\pi}{2}$

En utilisant les relations  $\epsilon = \frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2} E$  et  $u = \frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2} V_0$ , l'équation de Schrödinger s'écrit

$$\frac{d^2}{dt^2} \chi(t) - u \tan^2(t) \chi(t) + \epsilon \chi(t) = 0 \quad \text{pour} \quad |t| < \frac{\pi}{2}$$

**C)** On cherche une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sous la forme :

$$\chi_0(t) = A \cos^\alpha(t)$$

correspondant à une valeur propre  $\epsilon_0$  à déterminer.

Déterminer la constante  $\alpha$ . On exprimera le résultat final en termes de  $m$ ,  $a$ ,  $V_0$ .

*Réponse :* On insère la solution donnée  $\chi_0(t) = A \cos^\alpha(t)$  dans l'équation de Schrödinger. On calcule en premier

$$\frac{d}{dt} \chi_0(t) = -A\alpha \sin(t) \cos^{\alpha-1}(t)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \chi_0(t) = -A\alpha [\cos^\alpha(t) - (\alpha - 1) \sin^2(t) \cos^{\alpha-2}(t)] =$$

$$\begin{aligned}
&= -A\alpha \cos^\alpha(t) \left[ 1 - (\alpha - 1) \frac{\sin^2(t)}{\cos^2(t)} \right] = -A\alpha \cos^\alpha(t) [1 - (\alpha - 1) \tan^2(t)] = \\
&= -\chi_0(t) [\alpha - \alpha(\alpha - 1) \tan^2(t)] = \chi_0(t) [\alpha(\alpha - 1) \tan^2(t) - \alpha]
\end{aligned}$$

Donc l'équation de Schrödinger indépendante du temps impose :

$$\begin{aligned}
&\alpha(\alpha - 1) \tan^2(t) - \alpha - u \tan^2(t) + \epsilon_0 = 0 \\
&[\alpha(\alpha - 1) - u] \tan^2(t) + \epsilon_0 - \alpha = 0 \quad \longrightarrow \quad u = \alpha(\alpha - 1) \text{ et } \alpha = \epsilon_0
\end{aligned}$$

L'équation pour  $\alpha$  est

$$u = \alpha(\alpha - 1) \quad \longrightarrow \quad \alpha = \frac{1 \pm \sqrt{1 + 4u}}{2}$$

La condition  $\chi_0(\pm \frac{\pi}{2}) = 0$  impose que la seule solution physiquement acceptable est

$$\alpha = \frac{1 + \sqrt{1 + 4u}}{2} = \frac{1 + \sqrt{1 + \frac{8ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}}}{2}$$

**D)** Déterminer la valeur propre  $\epsilon_0$ , correspondant à la solution  $\psi_0(t)$ , ainsi que le niveau d'énergie correspondant. On exprimera le résultat final en termes de  $m$ ,  $a$ ,  $V_0$ .

*Réponse :* À partir de la condition  $\alpha = \epsilon_0$  établie précédemment, nous trouvons

$$\epsilon_0 = \frac{1 + \sqrt{1 + 4u}}{2} = \frac{1 + \sqrt{1 + \frac{8ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}}}{2}$$

et donc

$$E_0 = \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{8ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}} \right) \frac{\pi^2\hbar^2}{4ma^2}$$

**E)** Déterminer la valeur de la constante  $A$ .

On rappelle ici que  $\int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha}(t) dt = \frac{\Gamma(\alpha + \frac{1}{2})}{\Gamma(\alpha + 1)} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , où  $\Gamma(\alpha)$  est la fonction d'Euler.

*Réponse :* La condition de normalisation impose que

$$\int_{-a/2}^{a/2} |A|^2 \cos^{2\alpha}\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 1$$

donc

$$|A|^2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha}(t) dt = \frac{\pi}{2a}$$

Sachant que  $\int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha}(t) dt = \frac{\Gamma(\alpha + \frac{1}{2})}{\Gamma(\alpha + 1)} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , on peut écrire

$$A = \left[ \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + \frac{1}{2})} \frac{\sqrt{\pi}}{a} \right]^{\frac{1}{2}} e^{i\varphi}$$

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

On rappelle que

$$\sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2}$$

**Constantes utiles :**

constante de Planck réduite :  $\hbar = 1,06 \times 10^{-34}$  J s

Nombre d'Avogadro :  $\mathcal{N} = 6,02 \times 10^{23}$

charge de l'électron :  $e = 1,6 \times 10^{-19}$  C

masse de l'électron :  $m_e \simeq 0,9 \times 10^{-30}$  Kg

**Exercice 1 : Superposition d'états**

Un oscillateur harmonique de pulsation  $\omega$  et dont les états stationnaires sont notés  $|n\rangle$ , est dans l'état suivant:

$$|\varphi\rangle = \alpha |1\rangle + \frac{i}{4} |2\rangle + \frac{e^i}{4} |3\rangle + \frac{\sqrt{5}}{4} |4\rangle$$

- A) Calculer la valeur de la constante  $\alpha$ .
- B) On effectue une mesure de l'énergie. Quelles valeurs peut on obtenir ? Expliquer la réponse.
- C) Quelle sont les probabilités de mesurer ces valeurs de l'énergie ? Expliquer la réponse.
- D) Sans faire aucun calcul, dans cet état, la distribution de probabilité de présence oscille-t-elle dans le temps? Expliquer la réponse.
- E) Donner l'expression de  $|\varphi(t)\rangle$
- F) L'énergie moyenne de cet état varie-t-elle au cours du temps et combien vaut cette énergie moyenne au cours du temps ?

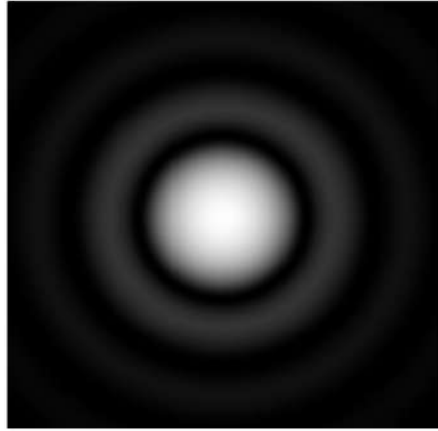


Figure 1 – Image de diffraction par une ouverture circulaire.

## Exercice 2 : Diffraction par une ouverture circulaire

En optique ondulatoire, il est bien connu qu'une onde électromagnétique qui passe au travers d'une petite ouverture circulaire, donne lieu à une figure de diffraction, connue aussi sous le nom de tache d'Airy, représentée en figure 1.

Au lieu d'utiliser des ondes électromagnétiques, on utilise un générateur d'électrons. Les électrons sont accélérés jusqu'à atteindre une énergie de  $100 \text{ eV}$  et ensuite ils sont envoyés un par un vers l'ouverture, dont le diamètre est  $4 \text{ nm}$ .

- A) Quelle est la longueur d'onde ici?
- B) Qualitativement, décrire ce qu'on observe sur l'écran au fur et à mesure qu'on augmente le nombre d'électrons envoyés vers l'ouverture circulaire. Expliquer la réponse.

## Exercice 3 : Particule dans un puits de potentiel

Une particule de masse  $m$  en une dimension est soumise à un potentiel:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in [0, a] \\ \infty, & \text{si } x \notin [0, a] \end{cases}$$

- A) Calculer la valeur moyenne de l'observable position  $\hat{x}$  dans un état propre du hamiltonien.
- B) Calculer l'écart quadratique moyen de l'observable position  $\hat{x}$  dans un état propre du hamiltonien.

- C) Calculer la valeur moyenne de l'observable impulsion  $\hat{p}_x$  dans un état propre du hamiltonien.
- D) Calculer l'écart quadratique moyen de l'observable impulsion  $\hat{p}_x$  dans un état propre du hamiltonien.
- E) Calculer le produit entre l'écart quadratique moyen de l'observable position et l'observable impulsion. Commenter la réponse.
- F) Dans quel cas le produit entre l'écart quadratique moyen de l'observable position et de l'observable impulsion est minimal ? Ce produit peut-il être égal à zéro ? Justifier la réponse.

## Exercice 4 : Théorème du Viriel dans un puits de potentiel polynomial

On se place dans le formalisme quantique. On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel attractif à force centrale  $V(r)$ . On suppose que le potentiel est de la forme  $V(r) = a r^n$ ,  $a$  et  $n$  étant deux constantes réelles telles  $n > -2$  et  $an > 0$ . Par simplicité, on se place en représentation  $x$ .

- A) Ecrire le Hamiltonien complet  $\hat{H}$  de la particule.
- B) Calculer le commutateur  $\hat{C} = [\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}]$  (on pourra calculer séparément les contributions de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle).
- C) En se servant du résultat précédent, et en calculant la valeur moyenne de  $\hat{C}$ , montrer que tout état lié stationnaire d'énergie totale  $E$  de la particule vérifie :

$$\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle$$

$\langle T \rangle$  et  $\langle V \rangle$  étant respectivement les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle associées à cet état.

## Exercice 5 : Puits de potentiel ponctuel

On considère une particule pouvant se mouvoir selon l'axe  $Ox$  dans un potentiel  $W(x)$  de la forme :

$$\begin{cases} W(x) = +\infty & \text{si } x < 0 \\ W(x) = -W_0 \delta(x - a) & \text{si } x > 0 \end{cases}$$



$\delta(x - a)$  étant la fonction “Dirac” en  $x = a$ , représentant la limite d’un puits de potentiel infiniment fin et infiniment profond.

On s’occupera ici que des états liés, c’est-à-dire des états d’énergie  $E < 0$ .

- A) Que peut-on dire de la continuité de la fonction d’onde et de sa dérivée ?
- B) Ecrire *en représentation  $x$*  l’équation que doit vérifier un état stationnaire  $\psi$  de la particule d’énergie  $E$ .
- C) Donner les conditions aux limites que doit vérifier la fonction d’onde en  $x = 0$ , en  $x = a$  et pour  $x \rightarrow +\infty$ , ainsi que la condition de normalisation. En particulier, en intégrant l’équation de Schrödinger (au sens des distributions pour que tout se passe bien) sur un intervalle infinitésimal autour de  $x = a$ , montrer que la dérivée de la fonction d’onde opère un saut en  $x = a$  tel que :

$$\Delta\psi' = \psi'(a+) - \psi'(a-) = -\frac{2mW_0}{\hbar^2} \psi(a)$$

- D) On introduit la quantité  $k$  telle que :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -E$$

Ecrire sous la forme d’une relation liant  $k$ ,  $a$  et  $W_0$  la condition pour qu’il existe un état lié.

- E) Exprimer la condition précédente dans la limite de faible couplage entre le puits ponctuel et le mur de potentiel, soit  $ka \gg 1$ , puis dans la limite de fort couplage, soit  $ka \ll 1$ . Dans ce dernier cas, montrer qu’il existe une distance limite  $a_{\min}$  au-dessous de laquelle il n’y a plus d’état lié. On donnera l’expression de cette distance.

## Exercice 6 : Détermination de la distance interatomique du CO à partir de son spectre de vibration-rotation

On cherche à déterminer la distance  $r_{\text{CO}}$  qui sépare les noyaux de carbone et d’oxygène de la molécule de monoxyde de carbone (CO). Pour cela, nous disposons d’un spectre d’absorption expérimental de cette molécule à l’état gazeux et à température ambiante (Figure 2).

Les pics dans ce spectre correspondent à une transition de l’état fondamental de la molécule vers des états excités de rotation et de vibration du gaz CO. Les énergies de transition entre ces états et l’état fondamental peuvent s’écrire comme la somme

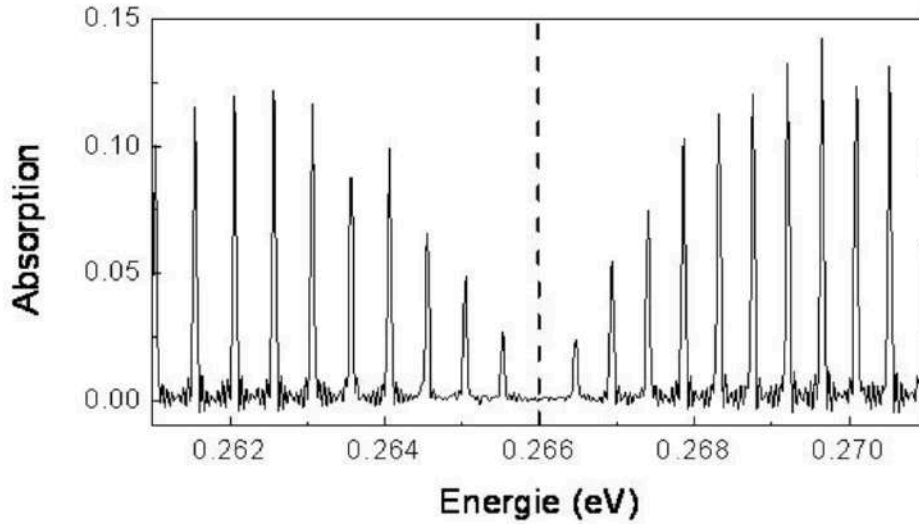


Figure 2 – Spectre de vibration-absorption de la molécule CO.

d'une énergie de vibration et de rotation, la première étant en général plus grande. La transition de vibration pure, qui correspond à l'excitation du premier état de vibration sans rotation, et qui est attendue au milieu du spectre (ligne pointillée) est interdite par des règles de sélection que nous donnerons plus loin, ce qui explique l'absence de pic d'absorption à cette énergie. Tous les pics de la figure 2 peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\Delta E = \Delta E_{\text{vib}} + \Delta E_{\text{rot}}$$

chacun des écarts  $\Delta E_{\text{vib}}$  et  $\Delta E_{\text{rot}}$  correspondant respectivement à des différences d'énergie entre états de vibration-rotation.

On considèrera, de façon similaire au cas de l'atome d'hydrogène, que le hamiltonien de la liaison C-O peut s'écrire comme la somme d'un hamiltonien radial  $\hat{H}_{\text{rad}}$ , qui ne fait pas intervenir les variables angulaires, et d'un hamiltonien  $\hat{H}_{\text{rot}}$  qui fait intervenir les variables angulaires. Le hamiltonien fait intervenir la masse réduite  $\mu$ , telle que :  $1/\mu = 1/m_{\text{O}} + 1/m_{\text{C}}$ ,  $m_{\text{O}}$  et  $m_{\text{C}}$  étant les masses respectives des atomes d'oxygène et de carbone.

- A) Donner l'expression des deux hamiltoniens  $\hat{H}_{\text{rad}}$  et  $\hat{H}_{\text{rot}}$  en fonction de l'opérateur  $\hat{L}^2$  ( $\hat{L}$  étant l'opérateur de moment cinétique) et de la distance  $r$  entre l'atome de carbone et l'atome d'oxygène.

- B)** On supposera que le hamiltonien de vibration radial peut s'assimiler en bonne approximation à un oscillateur harmonique à une dimension. Donnez l'énergie de vibration de la molécule en fonction du nombre quantique  $n$  (le numéro de l'état propre) et de sa pulsation propre  $\omega$ . Déterminer  $\omega$  à partir de la figure 2.
- C)** Donner les énergies possibles des états de rotation en fonction du nombre quantique  $\ell$ . On indiquera par  $r_{CO}$  la distance moyenne entre l'atome de carbone et l'atome d'oxygène.
- D)** Toutes les transitions entre états de vibration-rotation (chacun de ces états étant caractérisé par les nombres quantiques  $n$  et  $\ell$ ) ne sont pas autorisées. Les règles de sélection régissant les transitions qui donnent les pics de la figure 2 sont :  $\Delta n = +1$  et  $\Delta \ell = \pm 1$  ( $\Delta n$  et  $\Delta \ell$  désignent ici les variations des nombres quantiques dans la transition). Dédurre à partir des résultats des questions précédentes l'expression de la position des pics de la figure 2 en fonction de  $\omega$ ,  $\mu$ ,  $r_{CO}$  et  $\ell$ .
- E)** Déterminer l'énergie qui sépare deux pics voisins. En déduire une valeur approximative de  $r_{CO}$ . Application numérique :  $m_O = 16$  g/mole,  $m_C = 12$  g/mole.

**PHYSIQUE QUANTIQUE**

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

On rappelle que

$$\sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2}$$

**Constantes utiles :**

constante de Planck réduite :  $\hbar = 1,06 \times 10^{-34}$  J s

Nombre d'Avogadro :  $\mathcal{N} = 6,02 \times 10^{23}$

charge de l'électron :  $e = 1,6 \times 10^{-19}$  C

masse de l'électron :  $m_e \simeq 0.9 \times 10^{-30}$  Kg

**Exercice 1 : Superposition d'états**

Un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega$  et dont les états stationnaires sont notés  $|n\rangle$ , est dans l'état suivant:

$$|\varphi\rangle = \alpha |1\rangle + \frac{i}{4} |2\rangle + \frac{e^i}{4} |3\rangle + \frac{\sqrt{5}}{4} |4\rangle$$

**A)** Calculer la valeur de la constante  $\alpha$ .

*Réponse:*

Par la condition de normalisation,

$$|\alpha|^2 + \frac{1}{16} + \frac{1}{16} + \frac{5}{16} = 1$$

on obtient

$$\alpha = \frac{3}{4} e^{i\phi}$$

- B) On effectue une mesure de l'énergie. Quelles valeurs peut on obtenir ? Expliquer la réponse.

*Réponse:*

Le système est dans un état qui est superposition linéaire des quatre premiers états d'énergie, donc une mesure de l'énergie ne pourra donner qu'une des valeurs  $E_1, E_2, E_3, E_4$ .

On sait que

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

donc les mesures peuvent donner les valeurs suivantes:

$$E_1 = \hbar\omega \left( 1 + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_2 = \hbar\omega \left( 2 + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_3 = \hbar\omega \left( 3 + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_4 = \hbar\omega \left( 4 + \frac{1}{2} \right)$$

- C) Quelle sont les probabilités de mesurer ces valeurs de l'énergie ? Expliquer la réponse.

*Réponse:*

Les probabilités sont données par le module carré des coefficients de décomposition linéaire, donc:

$$P(E_1) = \frac{9}{16}$$

$$P(E_2) = \frac{1}{16}$$

$$P(E_3) = \frac{1}{16}$$

$$P(E_4) = \frac{5}{16}$$

- D) Sans faire aucun calcul, dans cet état, la distribution de probabilité de présence oscille-t-elle dans le temps? Expliquer la réponse.

*Réponse:* Oui, la distribution de probabilité de présence oscille dans le temps parce que le système n'est pas dans un état d'énergie bien défini.

- E) Donner l'expression de  $|\varphi(t)\rangle$

*Réponse:*

$$|\varphi(t)\rangle = \alpha e^{-\frac{E_1 t}{\hbar}} |1\rangle + \frac{i}{4} e^{-\frac{E_2 t}{\hbar}} |2\rangle + \frac{e^i}{4} e^{-\frac{E_3 t}{\hbar}} |3\rangle + \frac{\sqrt{5}}{4} e^{-\frac{E_4 t}{\hbar}} |4\rangle$$

- F) L'énergie moyenne de cet état varie-t-elle au cours du temps et combien vaut cette énergie moyenne au cours du temps ?

*Réponse:* Par le théorème d'Ehrenfest, la valeur moyenne de l'énergie est

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi | [\hat{H}, \hat{H}] | \varphi \rangle + \langle \varphi | \left( \frac{d}{dt} \hat{H} \right) | \varphi \rangle = 0$$

car le hamiltonien commute avec lui même et l'observable hamiltonien d'un oscillateur harmonique ne dépend pas explicitement du temps.

La valeur moyenne peut être calculée par

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^2 p_n E_n = \frac{9}{16} \hbar \omega \left( 1 + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{16} \hbar \omega \left( 2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{16} \hbar \omega \left( 3 + \frac{1}{2} \right) + \frac{5}{16} \hbar \omega \left( 4 + \frac{1}{2} \right) = \frac{21}{8} \hbar \omega$$

## Exercice 2 : Diffraction par une ouverture circulaire

En optique ondulatoire, il est bien connu qu'une onde électromagnétique qui passe au travers d'une petite ouverture circulaire, donne lieu à une figure de diffraction, connue aussi sous le nom de tache d'Airy, représentée en figure 1.

Au lieu d'utiliser des ondes électromagnétiques, on utilise un générateur d'électrons. Les électrons sont accélérés jusqu'à atteindre une énergie de 100 eV et ensuite ils sont envoyés un par un vers l'ouverture, dont le diamètre est 4 nm.

- A) Quelle est la longueur d'onde ici?

*Réponse:* La longueur d'onde  $\lambda$  sera donnée par la longueur d'onde de de Broglie

$$\lambda = h/p$$

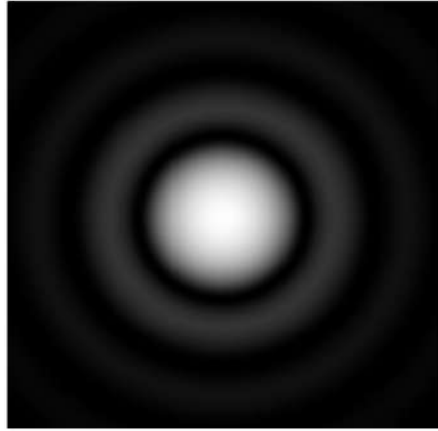


Figure 1 – Image de diffraction par une ouverture circulaire.

avec

$$p = \sqrt{2mE} = \sqrt{2meV}$$

d'où

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 0.9 \times 10^{-30} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 100}} = 1.23 \times 10^{-10} m$$

- B)** Qualitativement, décrire ce qu'on observe sur l'écran au fur et à mesure qu'on augmente le nombre d'électrons envoyés vers l'ouverture circulaire. Expliquer la réponse.

*Réponse:* On observera d'abord les impacts ponctuels des premiers électrons sur l'écran, distribués apparemment de façon aléatoire.

Lorsqu'un grand nombre d'électrons aura été envoyé, la densité d'impacts va néanmoins tendre vers la densité de probabilité de présence d'un électron sur l'écran. La densité de probabilité de présence est donnée par le module au carré de la fonction d'onde.

L'électron se propageant comme une onde, sa fonction d'onde mime celle de la diffraction électromagnétique. Son module au carré ressemblera donc à l'intensité de la diffraction électromagnétique, donnée par la figure 1. Mais l'image restera mouchetée tant que le nombre d'impacts ne sera pas suffisant.

Après un très grand nombre d'impacts, l'image sera très proche de la figure 1, avec la longueur d'onde calculée à la question A.

## Exercice 3 : Particule dans un puits de potentiel

Une particule de masse  $m$  en une dimension est soumise à un potentiel:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in [0, a] \\ \infty, & \text{si } x \notin [0, a] \end{cases}$$

- A) Calculer la valeur moyenne de l'observable position  $\hat{x}$  dans un état propre du hamiltonien.

*Réponse:*

On sait que les fonctions propres sont:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad , \quad \text{avec } n = 1, 2, \dots$$

et les valeurs propres correspondantes sont

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

On voit facilement que les modules carrés des fonctions d'onde sont des fonctions paires, donc

$$\langle x \rangle = \langle \psi_n | \hat{x} | \psi_n \rangle = \frac{2}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x dx = \frac{a}{2}$$

- B) Calculer l'écart quadratique de l'observable position  $\hat{x}$  dans un état propre du hamiltonien.

*Réponse:*

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ \langle x^2 \rangle &= \frac{2}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x^2 dx = a^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right) \\ (\Delta x)^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = a^2 \left( \frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right) \end{aligned}$$



- C) Calculer la valeur moyenne de l'observable impulsion  $\hat{p}_x$  dans un état propre du hamiltonien.

*Réponse:*

$$\langle p_x \rangle = 0$$

puisque il s'agit d'un état propre du hamiltonien. Le calcul direct donne bien sûr le même résultat.

- D) Calculer l'écart quadratique de l'observable impulsion  $\hat{p}_x$  dans un état propre du hamiltonien.

*Réponse:*

$$(\Delta p_x)^2 = 2m \langle E_n \rangle = 2m E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

On peut aussi le calculer directement par

$$(\Delta p_x)^2 = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

- E) Calculer le produit entre l'écart quadratique de l'observable position et l'observable impulsion. Commenter la réponse.

*Réponse:*

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2\sqrt{3}} \cdot \sqrt{n^2 \pi^2 - 6} = 0.57 \cdot \hbar > \frac{\hbar}{2}$$

C'est bien  $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ , comme on s'attendait par l'inégalité de Heisenberg.

- F) Dans quel cas le produit entre l'écart quadratique de l'observable position et l'observable impulsion est minimal ? Ce produit peut-il être égal à zéro ? Justifier la réponse.

*Réponse:*

Ce produit est minimal quand  $n = 1$ , c'est-à-dire  $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ , ce qui est tout à fait en accord avec l'inégalité de Heisenberg  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ .

Ce produit ne pourra jamais être égal à zéro, puisque les observables  $x$  et  $p_x$  ne commutent pas.

## Exercice 4 : Théorème du Viriel dans un puits de potentiel polynomial

On se place dans le formalisme quantique. On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel attractif à force centrale  $V(r)$ . On suppose que le potentiel est de la forme  $V(r) = a r^n$ ,  $a$  et  $n$  étant deux constantes réelles telles  $n > -2$  et  $an > 0$ . Pour simplicité, on se place en représentation  $x$ .

1. Ecrire le Hamiltonien complet  $\hat{H}$  de la particule.

*Réponse:* Le Hamiltonien de la particule est la somme du Hamiltonien d'énergie cinétique et du potentiel :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + a (r^n)$$

2. Calculer le commutateur  $\hat{C} = [\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}, \hat{H}]$  (on pourra calculer séparément les contributions de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle).

*Réponse:* Calculons tout d'abord le commutateur de  $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$  avec  $\hat{p}^2$  :

$$\begin{aligned} [\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}, \hat{p}^2] &= [\hat{x}\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] + [\hat{y}\hat{p}_y, \hat{p}_y^2] + [\hat{z}\hat{p}_z, \hat{p}_z^2] \\ &= [\hat{x}, \hat{p}_x^2] \hat{p}_x + [\hat{y}, \hat{p}_y^2] \hat{p}_y + [\hat{z}, \hat{p}_z^2] \hat{p}_z = 2i\hbar (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = 2i\hbar \hat{p}^2 \end{aligned}$$

On calcule par ailleurs le commutateur de  $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$  avec  $\hat{r}^n$  :

$$\begin{aligned} [\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}, \hat{r}^n] &= [\hat{x}\hat{p}_x, \hat{r}^n] + [\hat{y}\hat{p}_y, \hat{r}^n] + [\hat{z}\hat{p}_z, \hat{r}^n] \\ &= \hat{\vec{r}} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}(\hat{r}^n) - \hat{r}^n \hat{\vec{r}} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \hat{\vec{r}} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}(\hat{r}^n) = \frac{n\hbar}{i} \hat{r}^n \end{aligned}$$

En regroupant ces deux calculs, on obtient finalement :

$$[\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}, \hat{H}] = \frac{i\hbar \hat{p}^2}{m} - in\hbar a \hat{r}^n$$

3. En se servant du résultat précédent, et en calculant la valeur moyenne de  $\hat{C}$ , montrer que tout état lié stationnaire d'énergie totale  $E$  de la particule vérifie :

$$\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle$$

$\langle T \rangle$  et  $\langle V \rangle$  étant respectivement les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle associées à cet état.

*Réponse:* Pour un état stationnaire,  $\hat{H}\psi = E\psi$ . Calculons la valeur moyenne de  $\hat{C}$  pour cet état :

$$\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} E | \psi \rangle - \langle \psi | E \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} | \psi \rangle = 0$$

Donc, en se servant du calcul précédent :

$$2i\hbar \langle \psi | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle - in \langle \psi | a \hat{r}^n | \psi \rangle = 2i \langle T \rangle - in \langle V \rangle = 0$$

On en déduit :  $\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle$

## Exercice 5 : Puits de potentiel ponctuel

On considère une particule pouvant se mouvoir selon l'axe  $Ox$  dans un potentiel  $W(x)$  de la forme :

$$\begin{cases} W(x) = +\infty & \text{si } x < 0 \\ W(x) = -W_0 \delta(x - a) & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

$\delta(x - a)$  étant la fonction "Dirac" en  $x = a$ , représentant la limite d'un puits de potentiel infiniment fin et infiniment profond.

On s'occupera ici que des états liés, c'est-à-dire des états d'énergie  $E < 0$ .

1. Que peut-on dire de la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée ?

*Réponse:*

- La fonction d'onde est toujours continue.
- sa dérivée est continue si le saut d'énergie potentiel est fini, ce qui n'est pas le cas ici à cause du delta. On s'attend donc à une dérivée discontinue en  $x=a$ .

2. Ecrire en représentation  $x$  l'équation que doit vérifier un état stationnaire  $\psi$  de la particule d'énergie  $E$ .

*Réponse:* L'équation que doit vérifier un état stationnaire est l'équation de Schrödinger aux valeurs propres. En représentation  $x$  à une dimension, celle-ci s'écrit :

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

3. Donner les conditions aux limites que doit vérifier la fonction d'onde en  $x = 0$ , en  $x = a$  et pour  $x \rightarrow +\infty$ , ainsi que la condition de normalisation. En particulier, en intégrant l'équation de Schrödinger (au sens des distributions pour que tout se passe bien) sur un intervalle infinitésimal autour de  $x = a$ , montrer que la dérivée de la fonction d'onde opère un saut en  $x = a$  tel que :

$$\Delta\psi' = \psi'(a+) - \psi'(a-) = -\frac{2mW_0}{\hbar^2} \psi(a)$$

*Réponse:* La fonction d'onde  $\phi$  doit vérifier les conditions suivantes :

- $\psi(0) = 0$  ,
- $\psi$  est continue en  $x = a$  ,
- $\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x) = 0$  ,
- $\psi$  est normée :  $\int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$  .

Pour le saut de dérivée en  $x = a$ , on intègre l'équation de Schrödinger entre  $a - \varepsilon$  et  $a + \varepsilon$ . Le membre de gauche donne :

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) - W_0 \delta(x-a) \psi(x) \right] dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi' - W_0 \psi(a)$$

Par ailleurs, la fonction d'onde étant continue en  $x = a$ , le membre de droite va s'annuler dans la limite où  $\varepsilon$  tend vers 0. il reste donc en définitive :

$$\Delta\psi' = -\frac{2mW_0}{\hbar^2} \psi(a)$$

4. On introduit la quantité  $k$  telle que :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -E$$

Ecrire sous la forme d'une relation liant  $k$ ,  $a$  et  $W_0$  la condition pour qu'il existe un état lié.

*Réponse:* On résout l'équation de Schrödinger dans les zones  $]0, a[$  et  $]a, +\infty[$  :

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

Un état lié correspond donc à un état d'énergie  $E$  négative, car sans cela on aurait un comportement oscillant de la fonction d'onde en  $+\infty$ . On a donc pour un état lié :

$$\begin{cases} \psi(x) = \alpha \exp(kx) + \beta \exp(-kx) & \text{sur } ]0, a[ \\ \psi(x) = \gamma \exp(-kx) & \text{sur } ]a, +\infty[ \end{cases}$$

On ne conserve que l'exponentielle décroissante pour  $x > a$  afin de pouvoir avoir une fonction d'onde normalisable. En raison de l'annulation de la fonction d'onde en  $x = 0$ , la fonction d'onde sur  $]0, a[$  est en fait proportionnelle à  $\sinh(kx)$ . En résumé, on peut donc plutôt écrire :

$$\begin{cases} \psi(x) = \alpha \sinh(kx) & \text{pour } x < a \\ \psi(x) = \beta \exp(-kx) & \text{pour } x > a \end{cases} \quad \text{et} \quad \alpha \sinh(ka) = \beta \exp(-ka)$$

On utilise enfin la relation de continuité pour la dérivée en  $x = a$  trouvée à la question précédente :

$$\Delta\psi' = -k\beta \exp(-ka) - k\alpha \cosh(ka) = -\frac{2mW_0}{\hbar^2} \beta \exp(-ka)$$

et donc, en utilisant la relation entre  $\alpha$  et  $\beta$  :

$$k(1 + \coth(ka)) = \frac{2mW_0}{\hbar^2}$$

5. Exprimer la condition précédente dans la limite de faible couplage entre le puits ponctuel et le mur de potentiel, soit  $ka \gg 1$ , puis dans la limite de fort couplage, soit  $ka \ll 1$ . Dans ce dernier cas, montrer qu'il existe une distance limite  $a_{\min}$  au-dessous de laquelle il n'y a plus d'état lié. On donnera l'expression de cette distance.

*Réponse:* Limite du couplage faible :  $ka \gg 1$  et donc  $\coth(ka) \approx 1$ . Donc :

$$k = \frac{mW_0}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad E = -\frac{mW_0^2}{2\hbar^2}$$

Limite du couplage fort :  $ka \ll 1$  et donc  $\coth(ka) \approx 1/(ka)$ . Donc :

$$k \left( 1 + \frac{1}{ka} \right) = \frac{2mW_0}{\hbar^2} \quad \text{soit} \quad k = \frac{2mW_0}{\hbar^2} - \frac{1}{a}$$

On voit alors que, pour avoir  $k > 0$ , il faut que  $a$  soit plus petit que :

$$a_{\min} = \frac{\hbar^2}{2mW_0}$$

## Exercice 6 : Détermination de la distance interatomique du CO à partir de son spectre de vibration-rotation

On cherche à déterminer la distance  $r_{\text{CO}}$  qui sépare les noyaux de carbone et d'oxygène de la molécule de monoxyde de carbone (CO). Pour cela, nous disposons d'un spectre d'absorption expérimental de cette molécule à l'état gazeux et à température ambiante (Figure 2).

Les pics dans ce spectre correspondent à une transition de l'état fondamental de la molécule vers des états excités de rotation et de vibration du gaz CO. Les énergies de transition entre ces états et l'état fondamental peuvent s'écrire comme la somme d'une énergie de vibration et de rotation, la première étant en général plus grande. La transition de vibration pure, qui correspond à l'excitation du premier état de vibration sans rotation, et qui est attendue au milieu du spectre (ligne pointillée) est interdite par des règles de sélection que nous donnerons plus loin, ce qui explique l'absence de pic d'absorption à cette énergie. Tous les pics de la figure 2 peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\Delta E = \Delta E_{\text{vib}} + \Delta E_{\text{rot}}$$

chacun des écarts  $\Delta E_{\text{vib}}$  et  $\Delta E_{\text{rot}}$  correspondant respectivement à des différences d'énergie entre états de vibration-rotation. Comme nous l'avons vu en cours, le Hamiltonien du système à deux constituants est donc le Hamiltonien relatif  $\hat{H}_r$  qui fait intervenir la masse réduite  $\mu$ , telle que :  $1/\mu = 1/m_{\text{O}} + 1/m_{\text{C}}$ ,  $m_{\text{O}}$  et  $m_{\text{C}}$  étant les masses respectives des atomes d'oxygène et de carbone.

1. Sachant que CO peut être considéré comme un oscillateur harmonique, donnez l'énergie de vibration de la molécule en fonction du nombre quantique  $n$  (le numéro de l'état propre) et de sa pulsation propre  $\omega$ . Déterminer  $\omega$  à partir de la figure 2.

*Réponse:* D'après le cours, les énergies propres d'un oscillateur harmonique s'écrivent :  $E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$ . Comme l'énergie en abscisse du spectre de la figure 2 correspond à la différence d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité, la position du pic de vibration pure (ligne pointillée) vaut  $\omega$ . D'où :

$$\omega = 4,310^{14} \text{ rad.s}^{-1}$$

2. On souhaite maintenant déterminer les énergies des états propres de rotation pure de la molécule (pas de dépendance radiale de la fonction d'onde). Sachant que  $\hat{H}_r$  ne contient que le terme d'énergie cinétique de rotation, donner, en utilisant le principe de correspondance, l'expression de  $\hat{H}_r$  en fonction

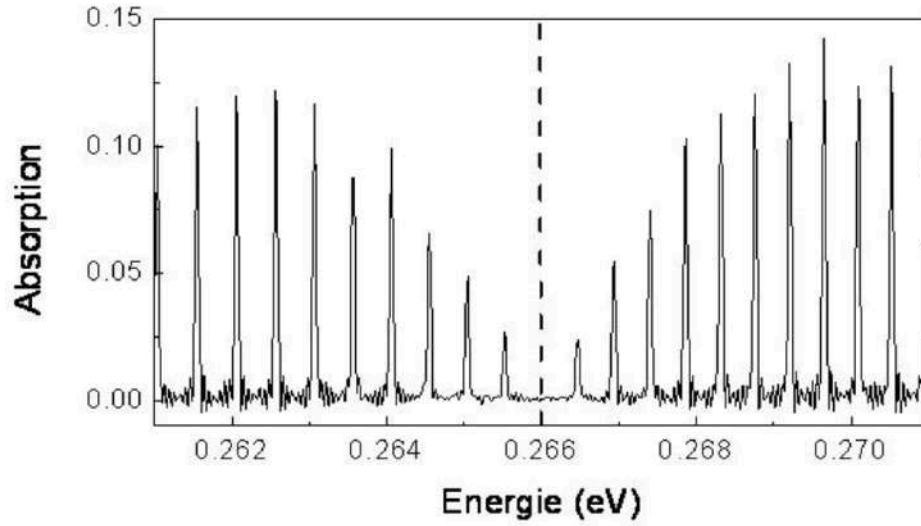


Figure 2 – Spectre de vibration-absorption de la molécule CO.

de l'opérateur  $\hat{L}^2$  ( $\hat{L}$  étant l'opérateur moment cinétique) et de la séparation moyenne  $r_{CO}$  entre l'atome de carbone et l'atome d'oxygène. En déduire les valeurs propres du Hamiltonien en fonction du nombre quantique  $\ell$ .

*Réponse:*

De même que dans le cas de l'atome d'hydrogène, on a :

$$\hat{p}^2 = \frac{\hat{L}^2}{r^2} - \hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

soit :

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

Comme on ne considère que la rotation, la fonction d'onde ne contient pas de termes radiaux. Les dérivées en fonction de  $r$  se simplifient et on obtient alors l'expression :

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{L}^2}{2\mu r_{CO}^2}$$

Les valeurs propres de  $\hat{H}_r$  sont au facteur  $1/2\mu r_{CO}^2$  près celles de  $L^2$ , d'où :

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2\mu r_{CO}^2} \ell(\ell + 1) \quad (1)$$

3. Toutes les transitions entre états de vibration-rotation (chacun de ces états étant caractérisé par les nombres quantiques  $n$  et  $\ell$ ) ne sont pas autorisées. Les règles de sélection régissant les transitions qui donnent les pics de la figure 2 sont :  $\Delta n = +1$  et  $\Delta \ell = \pm 1$  ( $\Delta n$  et  $\Delta \ell$  désignent ici les variations des nombres quantiques dans la transition). Dédurre à partir des résultats des questions 1 et 2 l'expression de la position des pics de la figure 2 en fonction de  $\omega$ ,  $\mu$ ,  $r_{\text{CO}}$  et  $\ell$ .

*Réponse:* Les pics dans la figure 2 ayant une énergie supérieure à 0.266 eV, correspondent à une transition d'une énergie supérieure à celle d'une vibration pure, donc au cas où  $\Delta \ell = +1$ . Par exemple, le premier pic au-delà de 0.266 eV correspond à la transition  $n = 0 \rightarrow n = 1$  couplée à celle  $\ell = 0 \rightarrow \ell = 1$ . Le pic suivant correspond à la transition  $n = 0 \rightarrow n = 1$  couplée à celle  $\ell = 1 \rightarrow \ell = 2$ , et ainsi de suite.

Les pics à gauche de 0.266 eV correspondent eux à  $\Delta \ell = -1$ . Par exemple, le premier pic en dessous de 0.266 eV correspond à la transition  $n = 0 \rightarrow n = 1$  couplée à celle  $\ell = 1 \rightarrow \ell = 0$ . Le pic suivant correspond à la transition  $n = 0 \rightarrow n = 1$  couplée à celle  $\ell = 2 \rightarrow \ell = 1$ , et ainsi de suite. La position des pics dans la figure correspondent donc à  $\omega$  plus la différence d'énergie entre 2 états de rotation voisins, soit :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu r_{\text{CO}}^2} (2\ell\Delta\ell + \Delta\ell^2 + \Delta\ell) = \frac{\hbar^2}{2\mu r_{\text{CO}}^2} (1 + 2\ell\Delta\ell + \Delta\ell)$$

$\ell$  étant l'indice de l'état initial. Ainsi, on a pour l'énergie totale :

$$\begin{cases} \hbar\omega + \frac{2\hbar^2(\ell+1)}{2\mu r_{\text{CO}}^2} & \text{si } \Delta\ell = +1 \\ \hbar\omega - \frac{2\hbar^2\ell}{2\mu r_{\text{CO}}^2} & \text{si } \Delta\ell = -1 \end{cases}$$

4. Déterminer l'énergie qui sépare deux pics voisins. En déduire une valeur approximative de  $r_{\text{CO}}$ . Application numérique :  $m_{\text{O}} = 16$  g/mole,  $m_{\text{C}} = 12$  g/mole.

*Réponse:*



L'énergie qui sépare 2 pics voisins vaut approximativement  $5 \cdot 10^{-4}$  eV et doit valoir  $\hbar^2/\mu r_{\text{CO}}^2$ , ce qui donne :

$$r_{\text{CO}} = 1,06 \cdot 10^{-34} \times \sqrt{\frac{6,02 \cdot 10^{23} \times 10^3 \times \left(\frac{1}{12} + \frac{1}{16}\right)}{5 \cdot 10^{-4} \times 1,6 \cdot 10^{-19}}} \approx 0,11 \text{ nm}$$

On remarquera que la distance entre deux pics voisins n'est pas strictement constante. En effet, le calcul des valeurs propres du Hamiltonien complet vibration-rotation donne en plus des termes considérés plus haut d'autres termes non linéaires en  $\ell$ .

## PHYSIQUE QUANTIQUE

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

### Exercice 1: Quantification canonique

Dans le cadre de la mécanique analytique, on considère une particule classique repérée par ses coordonnées  $(x(t), y(t), z(t))$  dans un repère cartésien en trois dimensions.

- A) Calculer le crochet de Poisson  $\{x, p_x\}$ .
- B) Calculer le crochet de Poisson  $\{L_x, L_y\}$  entre les deux premières composantes du moment cinétique  $\vec{L}$ .
- C) Expliquer la procédure de quantification canonique du système et ce que deviennent ces deux relations.
- D) En mécanique analytique, expliquer pourquoi, en général, l'impulsion est différente de la quantité de mouvement. Laquelle de ces deux quantités utilise-t-on dans le cadre du formalisme de la physique quantique ?

### Exercice 2 : Superposition d'états

Un oscillateur harmonique de pulsation  $\omega$  est dans l'état quantique suivant:

$$|\Psi\rangle = \frac{i}{2\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_5 t}{\hbar}} |5\rangle - \frac{i}{2\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_6 t}{\hbar}} |6\rangle - \frac{e^i}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_7 t}{\hbar}} |7\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_8 t}{\hbar}} |8\rangle$$

- A) Nous effectuons une mesure de l'énergie sur ce système. Quels sont les résultats possibles de la mesure ?
- B) Quelles sont les probabilités associées à chacun de ces résultats possibles ?

- C) Supposons que nous ayons effectué une mesure de l'énergie, et que nous ayons obtenu le résultat  $E_6$ . Quelle est alors la probabilité de mesurer la valeur de l'énergie  $E_5$  à la suite de la première mesure ?
- D) Imaginons que l'on ait un très grand nombre de ces oscillateurs harmoniques, chacun étant dans l'état décrit par le ket  $|\Psi\rangle$ . Imaginons que l'on effectue aussi une mesure de l'énergie de chaque oscillateur harmonique. Calculer la valeur moyenne des résultats de mesure de l'énergie en fonction de  $\hbar$  et  $\omega$ .
- E) L'énergie moyenne calculée à la question précédente correspond elle à une valeur de l'énergie mesurable pour un oscillateur harmonique ? Pourquoi ?
- F) Calculer l'écart type  $\Delta E$  de la distribution des valeurs d'énergies mesurées. Donner juste l'expression en fonction des énergies sans besoin de développer le calcul pour donner les résultats en fonction de  $\hbar$  et  $\omega$ .

### Exercice 3 : Propriétés des fonctions propres de l'oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique quantique à une dimension. Démontrer les résultats suivant :

- A) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, la valeur moyenne de l'observable position et de l'observable impulsion vaut zéro.
- B) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, la valeur moyenne de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle sont égales.
- C) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, on trouve  $\Delta x \Delta p_x = \hbar(n + 1/2)$ .
- D) La fonction d'onde correspondant à l'état fondamental est une gaussienne.

On suppose maintenant que l'oscillateur harmonique est, à l'instant  $t = 0$ , dans la combinaison d'états suivante :

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} \sum_{n=N-s}^{N+s} |n\rangle \quad \text{avec} \quad N \gg s \gg 1$$

- E) Écrire l'état  $|\Psi(t)\rangle$  à tout instant de temps  $t > 0$ .
- F) Combien vaut la valeur moyenne de l'observable position dans cet état à chaque instant de temps  $t > 0$  ? Quelle est l'amplitude de déplacement de l'oscillateur harmonique ? On fera l'approximation  $\sqrt{n} \approx \sqrt{n+1} \approx \sqrt{N}$  et  $2s+1 \approx 2s$ .

- G) Comparer l'amplitude de déplacement obtenue dans la question précédente avec celle d'un oscillateur harmonique classique de même énergie moyenne. Que constate-t-on ?

## Exercice 4 : Fonctions d'onde de l'hydrogène et moment orbital

La partie angulaire de la fonction d'onde d'un électron est décrite en coordonnées sphériques par :

$$u(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi$$

On donne les harmoniques sphériques  $Y_{l,m}$ :

$$\begin{aligned} Y_{2,0}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\varphi) \\ Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\varphi) \end{aligned}$$

$u$  et les  $Y_{l,m}$  sont normées de sorte que

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |u(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

et

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

On rappelle que

$$L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}$$

et

$$L_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}$$

On a  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$  et  $L_{\pm} Y_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{l,m \pm 1}$  si  $m \neq \pm l$  et  $L_- Y_{l,-l} = 0$  et  $L_+ Y_{l,l} = 0$ .

- A) De façon générale, pour un moment cinétique orbital quelles sont les valeurs possibles des nombres quantiques  $l$  et  $m$  ?

- B) Donner en la justifiant la probabilité qu'une mesure de  $L^2$  dans l'état  $u$  donne  $6\hbar^2$ .
- C) Donner la probabilité qu'une mesure de  $L_z$  dans l'état  $u$  donne respectivement  $0, \pm\hbar$  ou  $\pm 2\hbar$  sachant que l'axe  $z$  correspond à  $\theta = 0$ .
- D) Expliquez si les fonctions  $Y_{l,m}$  sont des fonctions propres ou pas de  $L_x$ .
- E) On pose  $g = \sum_{m=-2}^{m=2} c_m Y_{2,m}$  un état normé où  $c_m \in \mathbb{C}$ . Calculer  $L_+g$  et  $L_-g$ .
- F) Expliquez quelles sont à priori les valeurs possibles pour la mesure de  $L_x$  sachant que l'axe  $x$  correspond à  $(\theta = \pi/2, \varphi = 0)$ .
- G) Donner la probabilité qu'une mesure de  $L_x$  dans l'état  $u$  donne 0.

## Exercice 5 : Induction magnétique variable

On considère un électron libre soumis à un champ magnétique variable  $\vec{B}(t) : \vec{B}(t) = \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t)$  avec  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$  et  $\vec{B}_1(t) = B_1 \vec{e}_x \cos \omega t + B_1 \vec{e}_y \sin \omega t$ . On posera  $\omega_0 = -\gamma B_0$  et  $\omega_1 = -\gamma B_1$ , où  $\gamma = -|e|\hbar/m_e$  est le rapport gyromagnétique de l'électron, exprimé en fonction de la charge élémentaire  $e$  et de la masse de l'électron  $m_e$ . Dans la suite, on négligera l'énergie cinétique de l'électron, et on considèrera seulement l'énergie magnétique liée au spin  $\hat{S}$  de l'électron.

- A) Écrire le hamiltonien de l'électron, en distinguant bien les opérateurs en jeu grâce à un chapeau, et donner sa matrice dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de l'observable  $\hat{S}_z$ .
- B) Calculer les énergies propres du système. Tracer schématiquement les énergies propres en fonction de l'amplitude  $B_1$  du champ magnétique tournant.
- C) Cet hamiltonien dépendant du temps, l'état du système est décrit dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  par le ket :

$$|\alpha(t)\rangle = a_+(t) |+\rangle + a_-(t) |-\rangle$$

Écrire les équations d'évolution temporelle de  $a_+(t)$  et  $a_-(t)$ .

Afin d'écrire l'opérateur hamiltonien sans dépendance temporelle, nous introduisons l'opérateur de rotation

$$\hat{R}(t) = e^{i\omega \hat{S}_z t / \hbar}$$

qui agit ainsi sur les ket de la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  :

$$\hat{R}(t)|+\rangle = e^{i\omega t/2}|+\rangle \quad , \quad \hat{R}(t)|-\rangle = e^{-i\omega t/2}|-\rangle$$

Nous effectuons un changement de référentiel grâce à l'opérateur de rotation  $\hat{R}$  :

$$|\beta(t)\rangle = \hat{R}(t)|\alpha(t)\rangle$$

- D)** En posant  $|\beta(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$ , écrire les équations régissant la dynamique de  $b_+(t)$  et  $b_-(t)$ . Montrer que l'équation d'évolution temporelle peut se mettre sous la forme

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\beta(t)\rangle = \hat{H}_R |\beta(t)\rangle$$

- E)** Montrer que le hamiltonien  $\hat{H}_R$  s'écrit sous la forme

$$\hat{H}_R = \hbar \begin{pmatrix} A & B \\ B & -A \end{pmatrix}$$

$A$  et  $B$  étant deux pulsations réelles à déterminer. Cet hamiltonien dépend-t-il du temps ?

- F)** On pose maintenant

$$\cos\theta = \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \quad , \quad \sin\theta = \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \quad , \quad \Omega = \sqrt{A^2 + B^2}$$

pour écrire:

$$\hat{H}_R = \hbar\Omega \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Calculer les valeurs propres  $E_{\pm}$  et les vecteurs propres  $|\Psi_{\pm}\rangle$  du hamiltonien  $\hat{H}_R$  en utilisant les relations bien connues  $\cos(2x) = 2\cos^2(x) - 1 = 1 - 2\sin^2(x)$  et  $\sin(2x) = 2\sin(x)\cos(x)$  et de façon à ce que les états propres coïncident avec  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  lorsque  $\theta = 0$ .

- G)** Écrire le hamiltonien  $\hat{H}_R$  dans la nouvelle base  $\{|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle\}$ .
- H)** Soit  $|\beta\rangle = c_+(t)|\Psi_+\rangle + c_-(t)|\Psi_-\rangle$  l'état du système au temps  $t$ . Donner l'expression de  $c_+(t)$  et  $c_-(t)$ .

## PHYSIQUE QUANTIQUE

*Polycopié de l'ENSTA et notes (cours et TD) de l'élève autorisés.*

*Les réponses à certaines questions sont très simples.*

*Il vaut mieux ne pas répondre à une question que de répondre au hasard.*

*Les exercices sont indépendants les uns des autres.*

*Il est conseillé de lire tout l'énoncé avant de commencer.*

***Il sera tenu grand compte de la présentation de la copie.***

De façon générale les réponses seront rédigées en français en détaillant à la fois le raisonnement et les principaux arguments, notamment physiques, utilisés pour démarrer ou développer un calcul.

### Exercice 1: Quantification canonique

Dans le cadre de la mécanique analytique, on considère une particule classique repérée par ses coordonnées  $(x(t), y(t), z(t))$  dans un repère cartésien en trois dimensions.

**A)** Calculer le crochet de Poisson  $\{x, p_x\}$ .

*Réponse:* Par définition le crochet de Poisson de deux fonctions  $f(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$  et  $g(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$  est

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p_x} - \frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial p_y} - \frac{\partial f}{\partial p_y} \frac{\partial g}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial p_z} - \frac{\partial f}{\partial p_z} \frac{\partial g}{\partial z}$$

$$\text{On a donc } \{x, p_x\} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial p_x}{\partial p_x} - \frac{\partial x}{\partial p_x} \frac{\partial p_x}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial y} \frac{\partial p_x}{\partial p_y} - \frac{\partial x}{\partial p_y} \frac{\partial p_x}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial p_x}{\partial p_z} - \frac{\partial x}{\partial p_z} \frac{\partial p_x}{\partial z}.$$

Comme  $x, y, z$  et  $p_x, p_y, p_z$  sont des variables indépendantes, on a  $\frac{\partial p_i}{\partial x_j} = \delta_{i,j}$

et  $\frac{\partial x_i}{\partial p_j} = \delta_{i,j}$ . Il ne reste donc que  $\{x, p_x\} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial p_x}{\partial p_x} - 0$  soit  $\{x, p_x\} = 1$ .

**B)** Calculer le crochet de Poisson  $\{L_x, L_y\}$  entre les deux premières composantes du moment cinétique  $\vec{L}$ .

*Réponse:* Le moment cinétique (classique) est  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x)$ . On traite les  $x_i$  et les  $p_i$  comme des variables indépendantes a donc

$$\begin{aligned} \{L_x, L_y\} &= \frac{\partial L_x}{\partial x} \frac{\partial L_y}{\partial p_x} - \frac{\partial L_x}{\partial p_x} \frac{\partial L_y}{\partial x} + \frac{\partial L_x}{\partial y} \frac{\partial L_y}{\partial p_y} - \frac{\partial L_x}{\partial p_y} \frac{\partial L_y}{\partial y} + \frac{\partial L_x}{\partial z} \frac{\partial L_y}{\partial p_z} - \frac{\partial L_x}{\partial p_z} \frac{\partial L_y}{\partial z} \\ &= 0 - 0 + 0 - 0 + (-p_y)(-x) - yp_x \\ &= xp_y - yp_x \\ &= L_z \end{aligned}$$

- C) Expliquer la procédure de quantification canonique du système et ce que deviennent ces deux relations.

*Réponse:* La procédure consiste à remplacer les grandeurs physiques  $x, p_x, \dots$  par les observables correspondantes et les crochets de Poisson par les commutateurs correspondants divisés par  $i\hbar$ . En particulier l'équation de Schrödinger indique que c'est l'observable énergie du système qui gouverne l'évolution temporelle de la fonction d'onde. Si on a l'expression classique de l'énergie du système  $\mathcal{H}(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$ , dérivée par exemple d'un Lagrangien, on écrit l'observable énergie  $\hat{H}$  à partir des observables  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$  et on impose les relations de commutation :  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$  et  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$  et relations équivalentes le long des autres directions.

- D) En mécanique analytique, expliquer pourquoi, en général, l'impulsion est différente de la quantité de mouvement. Laquelle de ces deux quantités utilise-t-on dans le cadre du formalisme de la physique quantique ?

*Réponse:* Par définition, l'impulsion classique est définie dans le formalisme hamiltonien par

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$$

où  $(q_i)_{1 \leq i \leq 3}$  sont les coordonnées généralisées et  $\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$  le Lagrangien du système. La quantité de mouvement est, par contre, égale au produit de la masse par la vitesse :  $m\vec{\dot{q}}$ . Ces deux quantités sont différentes en général, et elles ne sont égales que dans certains cas particuliers, comme dans le cas d'une particule soumise à une énergie potentielle indépendante du temps et des vitesses.

En physique quantique, on fait appel à l'opérateur impulsion, qui est l'équivalent quantique de l'impulsion classique. Quelle que soit l'énergie potentielle, l'impulsion est toujours définie par

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Quand on quantifie un système, il faut donc d'abord écrire le hamiltonien en fonction des coordonnées et des impulsions, et ensuite on utilise le principe de correspondance pour passer des quantités classiques aux quantités quantiques.

## Exercice 2 : Superposition d'états

Un oscillateur harmonique de pulsation  $\omega$  est dans l'état quantique suivant:



$$|\Psi\rangle = \frac{i}{2\sqrt{3}}e^{-i\frac{E_5 t}{\hbar}}|5\rangle - \frac{i}{2\sqrt{3}}e^{-i\frac{E_6 t}{\hbar}}|6\rangle - \frac{e^i}{\sqrt{3}}e^{-i\frac{E_7 t}{\hbar}}|7\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{E_8 t}{\hbar}}|8\rangle$$

- A) Nous effectuons une mesure de l'énergie sur ce système. Quels sont les résultats possibles de la mesure ?

*Réponse :*  $E_5, E_6, E_7, E_8$

- B) Quelles sont les probabilités associées à chacun de ces résultats possibles ?

*Réponse :*  $P(E_5) = 1/12, P(E_6) = 1/12, P(E_7) = 1/3, P(E_8) = 1/2$

- C) Supposons que nous ayons effectué une mesure de l'énergie, et que nous ayons obtenu le résultat  $E_6$ . Quelle est alors la probabilité de mesurer la valeur de l'énergie  $E_5$  à la suite de la première mesure ?

*Réponse :* Si nous avons obtenu le résultat  $E_6$ , cela veut dire que le système a été projeté sur le sous-espace propre correspondant à la valeur propre  $E_6$ . Donc la probabilité que l'on mesure une valeur  $E_5$  de l'énergie juste après est égale à zéro.

- D) Imaginons que l'on ait un très grand nombre de ces oscillateurs harmoniques, chacun étant dans l'état décrit par le ket  $|\Psi\rangle$ . Imaginons que l'on effectue aussi une mesure de l'énergie de chaque oscillateur harmonique. Calculer la valeur moyenne des résultats de mesure de l'énergie en fonction de  $\hbar$  et  $\omega$ .

*Réponse :* Pour chaque oscillateur harmonique, la moyenne quantique des résultats de mesure est  $\langle E \rangle = \frac{1}{12} \cdot E_5 + \frac{1}{12} \cdot E_6 + \frac{1}{3} \cdot E_7 + \frac{1}{2} \cdot E_8$ . Compte-tenu que  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , on trouve  $\langle E \rangle = \hbar\omega\frac{31}{4}$

- E) L'énergie moyenne calculée à la question précédente correspond elle à une valeur de l'énergie mesurable pour un oscillateur harmonique ? Pourquoi ?

*Réponse :* L'énergie mesurée sur un oscillateur harmonique ne peut correspondre qu'à une valeur entière de  $n$ . La valeur moyenne de l'énergie ne correspondant à aucune valeur de  $n$  entière telle que l'on ait  $n + 1/2 = 31/4$ , on obtiendra donc jamais la valeur moyenne comme résultat de mesure de l'énergie sur un des oscillateurs.

- F) Calculer l'écart type  $\Delta E$  de la distribution des valeurs d'énergies mesurées. Donner juste l'expression en fonction des énergies sans besoin de développer le calcul pour donner les résultats en fonction de  $\hbar$  et  $\omega$ .

$$\begin{aligned} \text{Réponse : } \Delta E &= \sqrt{(H - \langle H \rangle)^2} \\ &= \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\sum_{i=5}^8 P_i \cdot E_i^2 - \left(\sum_{i=5}^8 P_i \cdot E_i\right)^2} \\
&= \sqrt{\frac{1}{12} \cdot (E_5)^2 + \frac{1}{12} \cdot (E_6)^2 + \frac{1}{3} \cdot (E_7)^2 + \frac{1}{2} \cdot (E_8)^2 - \left(\frac{1}{12} \cdot E_5 + \frac{1}{12} \cdot E_6 + \frac{1}{3} \cdot E_7 + \frac{1}{2} \cdot E_8\right)^2} \\
&= \dots = \sqrt{\frac{731}{12} (\hbar\omega)^2 - (31/4\hbar\omega)^2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{41}{3}} \hbar\omega
\end{aligned}$$

### Exercice 3 : Propriétés des fonctions propres de l'oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique quantique à une dimension. Démontrer les résultats suivant :

- A) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, la valeur moyenne de l'observable position et de l'observable impulsion vaut zéro.

*Réponse :* Il vaut mieux éviter de raisonner en terme de fonction d'onde qui sont peu facilement manipulables. Il est beaucoup plus élégant de rester en

notation de Dirac comme cela a été fait en TD :  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{2} (X^2 + P^2)$  avec les observables sans dimensions

$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}$  et  $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}$ , les opérateurs de création et d'annihilation

$\hat{a} = (\hat{X} + i\hat{P})/\sqrt{2}$  et  $\hat{a}^\dagger = (\hat{X} - i\hat{P})/\sqrt{2}$ , les relations inverses  $\hat{X} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$ ,  $\hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}i}$ , le commutateur  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$  à partir desquelles on démontre (voir le TD)

que  $\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right)$ ,  $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n+1/2)|n\rangle$ ,  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  (si  $n > 0$  et  $\hat{a}|0\rangle = 0$ ) et  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  où  $|n\rangle$  sont les états stationnaires non dégénérés repérés par un entier naturel  $n$ . Dans ce cas on a  $\langle\hat{x}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\langle\hat{X}\rangle$

où  $\langle\hat{X}\rangle = \frac{\langle\hat{a}\rangle + \langle\hat{a}^\dagger\rangle}{\sqrt{2}} = 0$  car  $\langle\hat{a}\rangle = \langle n|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|n-1\rangle = 0$  si  $n > 0$  et même si  $n = 0$  ( $\hat{a}|0\rangle = 0$ ) et de même  $\langle\hat{a}^\dagger\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0$  pour tout  $n$ .

De même  $\langle\hat{p}\rangle = \sqrt{m\hbar\omega}\langle\hat{P}\rangle$  et  $\langle\hat{P}\rangle = \frac{\langle\hat{a}\rangle - \langle\hat{a}^\dagger\rangle}{\sqrt{2}} = 0$  pour les mêmes raisons.

- B) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, la valeur moyenne de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle sont égales.

Réponse :  $\hat{X}^2 = \left( \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2}) = \frac{1}{2} (\hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 + \hat{a}^{\dagger 2})$

compte tenu que  $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ .

De même on a :  $\hat{P}^2 = \left( \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2} (-\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^{\dagger 2}) = \frac{1}{2} (-\hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 - \hat{a}^{\dagger 2})$ .

Donc  $\langle \hat{X}^2 \rangle = \langle \hat{P}^2 \rangle = \left\langle \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right\rangle = n + \frac{1}{2}$  ce qui montre que l'énergie ciné-

tique moyenne  $T = \frac{\hbar\omega}{2} \langle \hat{P}^2 \rangle$  et l'énergie potentielle moyenne  $V = \frac{\hbar\omega}{2} \langle \hat{X}^2 \rangle$

sont égales et valent toutes les deux  $\frac{\hbar\omega}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right)$ .

- C) Dans n'importe quel état stationnaire du hamiltonien, on trouve  $\Delta x \Delta p_x = \hbar(n + 1/2)$ .

Réponse:  $\Delta x \Delta p = \hbar \Delta X \Delta P$ ,  $\Delta X = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2} = \sqrt{n + \frac{1}{2}}$  et  $\Delta P = \sqrt{\langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2} = \sqrt{n + \frac{1}{2}}$  donc  $\Delta x \Delta p_x = \hbar(n + 1/2)$

- D) La fonction d'onde correspondant à l'état fondamental est une gaussienne.

Réponse : On part de l'équation  $\hat{a} |0\rangle = 0$  avec  $\hat{a} = \frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}} \right)$ ,

ce qui s'exprime en terme de fonction d'onde :

$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \phi_0(x) = 0$ . On voit facilement à partir de

l'équation  $\phi_0'(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \phi_0(x)$  que  $\phi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$  qui est une gaussienne telle que  $\int |\phi_0(x)|^2 dx = 1$ .

On suppose maintenant que l'oscillateur harmonique est, à l'instant  $t = 0$ , dans la combinaison d'états suivante :

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} \sum_{n=N-s}^{N+s} |n\rangle \quad \text{avec} \quad N \gg s \gg 1$$

- E) Écrire l'état  $|\Psi(t)\rangle$  à tout instant de temps  $t > 0$ .

Réponse : Chaque état stationnaire  $|n\rangle$  évolue dans le temps avec un simple facteur de phase  $\exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right)$  avec  $E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$

L'équation de Schrödinger étant linéaire on peut appliquer le principe de superposition (la solution d'une somme est la somme des solutions) :

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} \sum_{n=N-s}^{N+s} \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right) |n\rangle$$

- F)** Combien vaut la valeur moyenne de l'observable position dans cet état à chaque instant de temps  $t > 0$  ? Quelle est l'amplitude de déplacement de l'oscillateur harmonique ? On fera l'approximation  $\sqrt{n} \approx \sqrt{n+1} \approx \sqrt{N}$  et  $2s+1 \approx 2s$ .

$$\text{Réponse : } \langle p | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle p | \hat{a} | n \rangle + \langle p | \hat{a}^\dagger | n \rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{p,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{p,n+1})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2s+1} \left( \sum_{p=N-s}^{N+s} \exp\left(-i\frac{E_p t}{\hbar}\right) \langle p | \right) \hat{x} \left( \sum_{n=N-s}^{N+s} \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) | n \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2s+1} \left( \sum_{p=N-s}^{N+s} \sum_{n=N-s}^{N+s} \exp\left(i\frac{(E_n - E_p) t}{\hbar}\right) \langle p | \hat{x} | n \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2s+1} \left( \sum_{p=N-s}^{N+s} \sum_{n=N-s}^{N+s} \exp(i\omega(n-p)t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{p,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{p,n+1}) \right) \\ &\approx \frac{1}{2s} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)) \sqrt{N} 2s \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar N}{m\omega}} \cos(\omega t) \end{aligned}$$

L'amplitude d'oscillation de la position moyenne est  $\sqrt{\frac{2\hbar N}{m\omega}}$ .

- G)** Comparer l'amplitude de déplacement obtenue dans la question précédente avec celle d'un oscillateur harmonique classique de même énergie moyenne. Que constate-t-on ?

*Réponse :* L'énergie moyenne ne dépend pas du temps d'après le théorème d'Ehrenfest. Elle se calcule directement car le hamiltonien est diagonal dans la base :

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(0) | \hat{H} | \Psi(0) \rangle \\ &= \frac{1}{2s+1} \left( \sum_{n=N-s}^{N+s} \hbar\omega(n+1/2) \right) \\ &\approx \frac{1}{2s} 2sN\hbar\omega \\ &= N\hbar\omega \end{aligned}$$

L'amplitude  $x_{max}$  d'un oscillateur classique ayant cette énergie est telle que

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x_{max}^2 = N\hbar\omega \text{ soit } x_{max} = \sqrt{\frac{2\hbar N}{m\omega}}$$

En moyenne l'oscillateur quantique a donc les caractéristiques de l'oscillateur classique aux limites des grands nombres quantiques.

## Exercice 4 : Fonctions d'onde de l'hydrogène et moment orbital

La partie angulaire de la fonction d'onde d'un électron est décrite en coordonnées sphériques par :

$$u(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi$$

On donne les harmoniques sphériques  $Y_{l,m}$ :

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\varphi)$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\varphi)$$

$u$  et les  $Y_{l,m}$  sont normées de sorte que

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |u(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

et

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

On rappelle que

$$L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}$$

et

$$L_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}$$

On a  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$  et  $L_{\pm} Y_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{l,m \pm 1}$  si  $m \neq \pm l$  et  $L_- Y_{l,-l} = 0$  et  $L_+ Y_{l,l} = 0$ .

- A) De façon générale, pour un moment cinétique orbital quelles sont les valeurs possibles des nombres quantiques  $l$  et  $m$  ?

*Réponse :* On doit avoir  $l$  entier positif ou nul, et  $-l \leq m \leq l$  avec  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ .

- B) Donner en la justifiant la probabilité qu'une mesure de  $L^2$  dans l'état  $u$  donne  $6\hbar^2$ .

*Réponse :* On remarque que  $u(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{2,2} + Y_{2,-2})$ . La valeur propre  $6\hbar^2$  de  $L^2$  correspond à  $\hbar^2 l(l+1)$  avec  $l = 2$ . Donc la probabilité demandée vaut 1.

- C) Donner la probabilité qu'une mesure de  $L_z$  dans l'état  $u$  donne respectivement 0,  $\pm\hbar$  ou  $\pm 2\hbar$  sachant que l'axe  $z$  correspond à  $\theta = 0$ .

*Réponse :* Les probabilités sont 0,0,0,1/2,1/2.

- D) Expliquez si les fonctions  $Y_{l,m}$  sont des fonctions propres ou pas de  $L_x$ .

*Réponse :* Non car  $L_x$  ne commute pas avec  $L_z$ .

- E) On pose  $g = \sum_{m=-2}^{m=2} c_m Y_{2,m}$  un état normé où  $c_m \in \mathbb{C}$ . Calculer  $L_+g$  et  $L_-g$ .

*Réponse :* On a  $L_{\pm} Y_{2,m} = \hbar \sqrt{6 - m(m \pm 1)} Y_{2,m \pm 1}$  si  $m \neq \pm 2$  et  $L_+ Y_{2,2} = 0$ ,  $L_- Y_{2,-2} = 0$ . On peut donc écrire  $L_{\pm}$  dans la base des  $Y_{2,m}$  ( $m = -2, -1, 0, 1, 2$ ):

$$L_+g = \hbar (2c_{-2}Y_{2,-1} + \sqrt{6}c_{-1}Y_{2,0} + \sqrt{6}c_0Y_{2,1} + 2c_1Y_{2,2})$$

et

$$L_-g = \hbar (2c_{-1}Y_{2,-2} + \sqrt{6}c_0Y_{2,-1} + \sqrt{6}c_1Y_{2,0} + 2c_2Y_{2,1})$$

- F) Expliquez quelles sont à priori les valeurs possibles pour la mesure de  $L_x$  sachant que l'axe  $x$  correspond à  $(\theta = \pi/2, \varphi = 0)$ .

*Réponse :* A priori les valeurs propres de  $L_x$  sont  $m\hbar$  avec  $m = -2, -1, 0, 1, 2$  et sont les mêmes que celles de  $L_z$  pour des raisons de symétrie.

- G) Donner la probabilité qu'une mesure de  $L_x$  dans l'état  $u$  donne 0.

*Réponse :*  $L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$  d'où si  $g$  est vecteur propre de  $L_x$  avec  $m\hbar$  on a :

$$L_x g = m\hbar g = \frac{\hbar}{2} [2c_{-1}Y_{2,-2} + (2c_{-2} + \sqrt{6}c_0)Y_{2,-1} + (\sqrt{6}c_{-1} + \sqrt{6}c_1)Y_{2,0} + (\sqrt{6}c_0 + 2c_2)Y_{2,1} + 2c_1Y_{2,2}]$$

Le vecteur propre associé à la valeur propre 0 doit alors vérifier :

$$c_{-1} = 0, 2c_{-2} + \sqrt{6}c_0 = 0, \sqrt{6}c_{-1} + \sqrt{6}c_1 = 0, \sqrt{6}c_0 + 2c_2 = 0 \text{ et } 2c_1 = 0 \text{ avec } \sum_{m=-2}^2 |c_m|^2 = 1.$$

Il nous reste donc  $2c_{-2} + \sqrt{6}c_0 = 0$  et  $\sqrt{6}c_0 + 2c_2 = 0$  soit  $c_{\pm 2} = -\sqrt{6}/2c_0$ . En utilisant la normalisation il vient :

$$(\frac{3}{2} + \frac{3}{2} + 1) |c_0|^2 = 1 \text{ soit } c_0 = \frac{e^{iq}}{2}. \text{ On prend } q = 0. \text{ On a donc :}$$

$$L_x(-\frac{\sqrt{6}}{4}Y_{2,-2} + \frac{1}{2}Y_{2,0} - \frac{\sqrt{6}}{4}Y_{2,2}) = 0.$$

Pour calculer la probabilité il est plus commode d'introduire le ket  $|l, m\rangle$  qui correspond à  $Y_{l,m}$ .

La probabilité demandée est donc  $P = \left| \left( -\frac{\sqrt{6}}{4} \langle 2, -2 | + \frac{1}{2} \langle 2, 0 | - \frac{\sqrt{6}}{4} \langle 2, 2 | \right) \left( \frac{|2, 2\rangle + |2, -2\rangle}{\sqrt{2}} \right) \right|^2$

Soit  $P = \frac{1}{2} \left| -\frac{\sqrt{6}}{2} \right|^2 = \frac{3}{4}$ .

## Exercice 5 : Induction magnétique variable

On considère un électron libre soumis à un champ magnétique variable  $\vec{B}(t)$  :  $\vec{B}(t) = \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t)$  avec  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$  et  $\vec{B}_1(t) = B_1 \vec{e}_x \cos \omega t + B_1 \vec{e}_y \sin \omega t$ . On posera  $\omega_0 = -\gamma B_0$  et  $\omega_1 = -\gamma B_1$ , où  $\gamma = -|e|\hbar/m_e$  est le rapport gyromagnétique de l'électron, exprimé en fonction de la charge élémentaire  $e$  et de la masse de l'électron  $m_e$ . Dans la suite, on négligera l'énergie cinétique de l'électron, et on considèrera seulement l'énergie magnétique liée au spin  $\hat{S}$  de l'électron.

- A) Écrire le hamiltonien de l'électron, en distinguant bien les opérateurs en jeu grâce à un chapeau, et donner sa matrice dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de l'observable  $\hat{S}_z$ .

*Réponse :* L'énergie se réduit à l'énergie magnétique  $\hat{H} = -\hat{\vec{M}} \cdot \vec{B}$  où  $\hat{\vec{M}}$  est l'observable moment magnétique de l'électron. Comme dans le cas classique, le moment magnétique est proportionnel au moment cinétique - ici réduit au spin - avec le facteur gyromagnétique  $\gamma$  comme constante de proportionnalité:  $\hat{\vec{M}} = \gamma \hat{\vec{S}}$ .

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\gamma \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} \\ &= -\gamma \left( \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z \right) \cdot (B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_0) \\ &= -\gamma B_1 \cos(\omega t) \hat{S}_x - \gamma B_1 \sin(\omega t) \hat{S}_y - \gamma B_0 \hat{S}_z \end{aligned}$$

$\hat{H}$  agit dans l'espace des états de spin 1/2 de l'électron de dimension 2. Il est traditionnel (mais pas obligatoire) de choisir comme base les états propres

$\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de  $\hat{S}_z$ . Compte tenu que dans cette base  $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ ,  $\hat{S}_y =$

$\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ ,  $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$  on a :

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} & -\frac{\gamma B_1 \hbar}{2} e^{-i\omega t} \\ -\frac{\gamma B_1 \hbar}{2} e^{i\omega t} & \frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar \omega_0}{2} & \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{-i\omega t} \\ \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{i\omega t} & -\frac{\hbar \omega_0}{2} \end{bmatrix}$$

- B) Calculer les énergies propres du système. Tracer schématiquement les énergies propres en fonction de l'amplitude  $B_1$  du champ magnétique tournant.

*Réponse :*  $E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$  Bien que les énergies propres ne dépendent pas du temps, le hamiltonien lui dépend du temps et on ne cherchera pas à le diagonaliser directement pour trouver ses états propres. On va plutôt travailler sur la forme du vecteur d'état. Tracer  $E_{\pm}(\omega_1)$  présente deux niveaux qui s'écartent avec  $B_1$

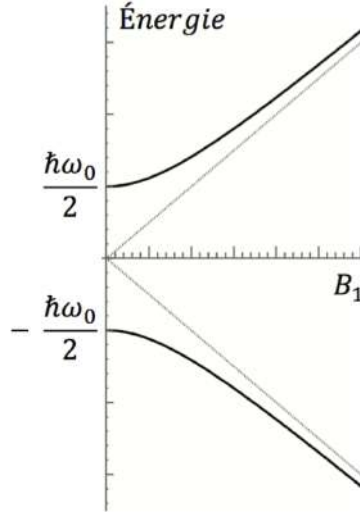


Figure 1 – Énergies propres en fonction de l'amplitude  $B_1$  du champ magnétique tournant.

- C) Cet hamiltonien dépendant du temps, l'état du système est décrit dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  par le ket :

$$|\alpha(t)\rangle = a_+(t) |+\rangle + a_-(t) |-\rangle$$

Écrire les équations d'évolution temporelle de  $a_+(t)$  et  $a_-(t)$ .

*Réponse :* En notation de Dirac l'équation de Schrödinger s'écrit  $i\hbar \frac{d|\alpha(t)\rangle}{dt} =$

$$\hat{H} |\alpha(t)\rangle \text{ soit dans la base choisie : } i\hbar \begin{bmatrix} \dot{a}_+ \\ \dot{a}_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} & \frac{\hbar\omega_1}{2} e^{-i\omega t} \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} e^{i\omega t} & -\frac{\hbar\omega_0}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \dot{a}_+ = -i\frac{\omega_0}{2} a_+ - i\frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \\ \dot{a}_- = i\frac{\omega_0}{2} a_- - i\frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ \end{cases} \quad \begin{cases} \dot{a}_+ = -i\frac{\omega_0}{2} a_+ - i\frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \\ \dot{a}_- = i\frac{\omega_0}{2} a_- - i\frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ \end{cases} \quad \text{Il s'agit donc}$$

d'un système d'équations linéaires couplées avec des coefficients dépendant du temps. On ne cherchera donc pas non plus à diagonaliser la matrice du système.



Afin d'écrire l'opérateur hamiltonien sans dépendance temporelle, nous introduisons l'opérateur de rotation

$$\hat{R}(t) = e^{i\omega\hat{S}_z t/\hbar}$$

qui agit ainsi sur les ket de la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  :

$$\hat{R}(t)|+\rangle = e^{i\omega t/2}|+\rangle \quad , \quad \hat{R}(t)|-\rangle = e^{-i\omega t/2}|-\rangle$$

Nous effectuons un changement de référentiel grâce à l'opérateur de rotation  $\hat{R}$  :

$$|\beta(t)\rangle = \hat{R}(t)|\alpha(t)\rangle$$

- D) En posant  $|\beta(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$ , écrire les équations régissant la dynamique de  $b_+(t)$  et  $b_-(t)$ . Montrer que l'équation d'évolution temporelle peut se mettre sous la forme

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\beta(t)\rangle = \hat{H}_R |\beta(t)\rangle$$

*Réponse :* Soit on écrit les relations entre les  $b_{\pm}(t)$  et les  $a_{\pm}(t)$  en utilisant le résultat précédent, soit on reste en notation de Dirac pour traiter en même temps la question suivante.

Première approche :  $\begin{bmatrix} b_+(t) \\ b_-(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{bmatrix}$  soit

$$\begin{cases} b_+ = e^{i\omega t/2} a_+ \\ b_- = e^{-i\omega t/2} a_- \end{cases} \quad \text{Les équations dynamiques s'écrivent} \quad \begin{cases} \dot{b}_+ = \left( i\frac{\omega}{2} a_+ + \dot{a}_+ \right) e^{i\omega t/2} \\ \dot{b}_- = \left( -i\frac{\omega}{2} a_- + \dot{a}_- \right) e^{-i\omega t/2} \end{cases}$$

soit

$$\begin{cases} \dot{b}_+ = \left( i\frac{\omega}{2} a_+ - i\frac{\omega_0}{2} a_+ - i\frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \right) e^{i\omega t/2} \\ \dot{b}_- = \left( -i\frac{\omega}{2} a_- + i\frac{\omega_0}{2} a_- - i\frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ \right) e^{-i\omega t/2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{b}_+ = i\frac{\omega - \omega_0}{2} a_+ e^{i\omega t/2} - i\frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t/2} a_- \\ \dot{b}_- = -i\frac{(\omega - \omega_0)}{2} a_- e^{-i\omega t/2} - i\frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t/2} a_+ \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{b}_+ = i\frac{\omega - \omega_0}{2} b_+ - i\frac{\omega_1}{2} b_- \\ \dot{b}_- = -i\frac{\omega - \omega_0}{2} b_- - i\frac{\omega_1}{2} b_+ \end{cases} \quad \begin{cases} i\hbar \dot{b}_+ = \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} b_+ + \frac{\hbar\omega_1}{2} b_- \\ i\hbar \dot{b}_- = \frac{\hbar\omega_1}{2} b_+ - \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} b_- \end{cases}$$

Deuxième approche :  $i\hbar \frac{d|\beta(t)\rangle}{dt} = i\hbar \frac{d\hat{R}}{dt} |\alpha(t)\rangle + i\hbar \hat{R} \frac{d|\alpha(t)\rangle}{dt}$  soit, en utilisant l'équation de Schrödinger,  $i\hbar \frac{d|\beta(t)\rangle}{dt} = i\hbar \frac{d\hat{R}}{dt} |\alpha(t)\rangle + \hat{R} \hat{H} |\alpha(t)\rangle$  Compte tenu que  $\frac{d\hat{R}}{dt} = i\omega/\hbar \hat{S}_z \hat{R}$  on a  $i\hbar \frac{d|\beta(t)\rangle}{dt} = -\omega \hat{S}_z |\beta(t)\rangle + \hat{R} \hat{H} \hat{R}^{-1} |\beta(t)\rangle$  que l'on peut écrire  $i\hbar \frac{d|\beta(t)\rangle}{dt} = \hat{H}_R |\beta(t)\rangle$  avec  $H_R = -\omega \hat{S}_z + \hat{R} \hat{H} \hat{R}^{-1}$  avec une formule de passage pour un changement de base.

E) Montrer que le hamiltonien  $\hat{H}_R$  s'écrit sous la forme

$$\hat{H}_R = \hbar \begin{pmatrix} A & B \\ B & -A \end{pmatrix}$$

$A$  et  $B$  étant deux pulsations réelles à déterminer. Cet hamiltonien dépend-t-il du temps ?

Réponse :  $\hat{H}_R = \begin{bmatrix} \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} & \frac{\hbar\omega_1}{2} \\ \frac{\hbar\omega_1}{2} & -\frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} A & B \\ B & -A \end{bmatrix}$  avec  $A = \frac{\omega_0 - \omega}{2}$  et  $B = \frac{\omega_1}{2}$ .

F) On pose maintenant

$$\cos\theta = \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \quad , \quad \sin\theta = \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \quad , \quad \Omega = \sqrt{A^2 + B^2}$$

pour écrire:

$$\hat{H}_R = \hbar\Omega \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Calculer les valeurs propres  $E_{\pm}$  et les vecteurs propres  $|\Psi_{\pm}\rangle$  du hamiltonien  $\hat{H}_R$  en utilisant les relations bien connues  $\cos(2x) = 2\cos^2(x) - 1 = 1 - 2\sin^2(x)$  et  $\sin(2x) = 2\sin(x)\cos(x)$  et de façon à ce que les états propres coïncident avec  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  lorsque  $\theta = 0$ .

Réponse : Les deux valeurs propres sont  $\hbar\Omega$  et  $-\hbar\Omega$ . Les formules de trigonométrie données permettent d'écrire simplement  $|\Psi_+\rangle = \begin{bmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{bmatrix}$  et  $|\Psi_-\rangle = \begin{bmatrix} -\sin\theta/2 \\ \cos\theta/2 \end{bmatrix}$  dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

G) Écrire le hamiltonien  $\hat{H}_R$  dans la nouvelle base  $\{|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle\}$ .

Réponse :  $\hat{H}_R = \begin{bmatrix} \hbar\Omega & 0 \\ 0 & -\hbar\Omega \end{bmatrix}_{|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle}$

H) Soit  $|\beta\rangle = c_+(t)|\Psi_+\rangle + c_-(t)|\Psi_-\rangle$  l'état du système au temps  $t$ . Donner l'expression de  $c_+(t)$  et  $c_-(t)$ .

Réponse : Dans ce cas la solution est immédiate :  $c_+(t) = c_+(0)\exp(-i\Omega t)$  et  $c_-(t) = c_-(0)\exp(i\Omega t)$