

# Introduction à la Mécanique Quantique

Syllabus d'exercices

PHYS-F203

**Titulaire du cours :** Serge MASSAR

**Assistant :** Louan MOL

2022-2023

Les énoncés figurants dans ce documents ont été repris des séances d'exercices rédigées par Adrien Fiorucci.

# Table des matières

Séances d'exercices	4
1 Dualité onde-corpuscule	4
2 Équation de Schrödinger	8
3 Formalisme de Dirac	16
4 Postulats & applications	22
5 Systèmes à deux dimensions	30
6 L'oscillateur harmonique en mécanique quantique	34
7 Produit tensoriel & intrication	39
 Examens précédents	 42
Examen de juin 2019	42
Examen de septembre 2019	43
Examen de juin 2021	44
Examen de septembre 2021	45
Examen de juin 2022	46
Examen de septembre 2022	47

# Bibliographie

- [1] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU et F. LALOE. *Mécanique Quantique - Tome 1 : Nouvelle édition*. EDP Sciences, 2018. ISBN : 9782759822881.

# Séance 1 | Dualité onde-corpuscule

Sources : Schaum, chapitre 1 ; Cohen-Tannoudji, complément I-K.

## Exercice 1 *L'effet photoélectrique.*

L'effet photoélectrique fut découvert par hasard par Heinrich Hertz en 1887, alors qu'il s'employait à créer un appareil capable de générer des ondes électromagnétiques. Il s'agit d'un des nombreux processus physiques permettant d'extraire des électrons d'une surface métallique. Ses propriétés furent étudiées en plus grand détails quelques années plus tard par Philipp Lenard au moyen du dispositif expérimental que voici.

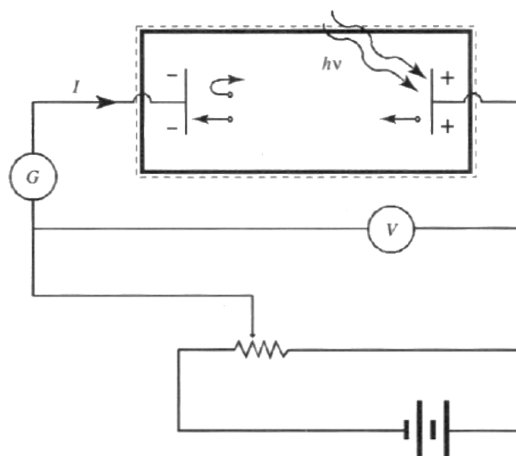


FIGURE 1.1 – Schéma de l'appareil destiné à l'étude de l'effet photoélectrique.

On se munit d'un tube à vide contenant une électrode en Zinc. Cette dernière est éclairée par un rayon lumineux monochromatique de fréquence  $\nu$ . On constate que cette irradiation provoque l'émission d'électrons par la plaque de Zinc, lesquels seront collectés par une autre électrode située à l'autre extrémité du tube à vide. Les deux électrodes sont reliées entre elles par un circuit électrique muni d'un générateur de tension réglable, d'un volt-mètre et d'un ampère-mètre.

1. La lumière fournit une quantité d'énergie  $E$  à un électron de la plaque émettrice, convertie en travail d'extraction  $W$  et énergie cinétique de l'électron libéré :  $E = W + \frac{1}{2}mv^2$ .
2. Lorsque l'électron est collecté par la seconde électrode, une différence de potentiel s'établit entre les deux électrodes du "condensateur" enfermé dans le tube à vide, ce qui crée un courant dans le circuit extérieur, mesuré par l'ampère-mètre.
3. En outre, un générateur de tension réglable est introduit dans le circuit. Il fournit une différence de potentiel  $V$  entre l'électrode émettrice et l'électrode réceptrice, appelée *potentiel retardateur*.

## Questions

1. Expliquez le fait expérimental suivant :

*Pour un signal lumineux de fréquence et d'intensité donnée, l'intensité du courant diminue lorsqu'on augmente le potentiel retardateur, jusqu'à atteindre 0 pour une valeur  $V = V_0$  appelé potentiel d'arrêt.*

Quelle quantité dynamique la mesure de  $V_0$  permet-elle de déterminer ?

2. Voici un second fait expérimental.

*Pour une surface donnée,  $V_0$  dépend de la couleur du rayonnement mais pas de son intensité. Pour chaque métal, il existe une fréquence de seuil  $\nu_s$  en-dessous de laquelle aucun courant n'est observé, et ce, quelle que soit l'intensité du rayon de lumière.*

Est-ce un résultat attendu, considérant la théorie ondulatoire de la lumière ?

3. Dans l'hypothèse d'Einstein, la lumière se comporte comme un flux de paquets insécables d'énergie  $E = h\nu$ , appelés *photons*. Interprétez le résultat expérimental cité à la question précédente à la lumière de cette hypothèse. Établissez et représentez graphiquement la relation entre  $V_0$  et  $\nu$ , et expliquez pourquoi  $\nu_s$  ne dépend que du métal employé.
4. Expérimentalement, on remarque aussi que le courant s'établit presque instantanément lorsqu'on allume le faisceau de lumière, même à très faible intensité lumineuse. Cela vous paraît-il plausible dans l'optique de la théorie ondulatoire ? Et avec l'hypothèse de quantification d'Einstein ?
5. Pour rendre plus précise la réponse à la question précédente, effectuons le petit calcul que voici. Supposons que nous éclairions (en incidence normale) une surface métallique avec une lumière d'intensité  $10^{-10} \text{ W/m}^2$ . La distance moyenne entre 2 atomes du métal est de  $3 \text{ \AA}$ , et chaque atome dispose d'un électron libre. L'énergie de liaison de cet électron est évaluée à  $5 \text{ eV}$ . Supposons encore que la lumière est distribuée uniformément sur la surface, et que l'énergie est parfaitement absorbée par les électrons en surface. Si la radiation incidente est traitée classiquement (théorie ondulatoire), calculez le temps moyen d'irradiation qui devra s'écouler avant qu'un électron ne gagne assez d'énergie pour pouvoir être éjecté comme photo-électron ?

### Exercice 2 L'effet Compton.

Selon la théorie quantique, un rayonnement électromagnétique monochromatique de fréquence  $\nu$  peut être considéré comme un flux de photons, assimilables sous maints aspects à des particules, chacun possédant une quantité indivisible d'énergie  $E = h\nu$  et une quantité de mouvement satisfaisant à la loi de De Broglie,  $p = h\nu/c = h/\lambda$  ( $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide, et  $\lambda$  la longueur d'onde du rayonnement). La diffusion de la lumière devient alors un problème de collision des photons avec des particules matérielles.

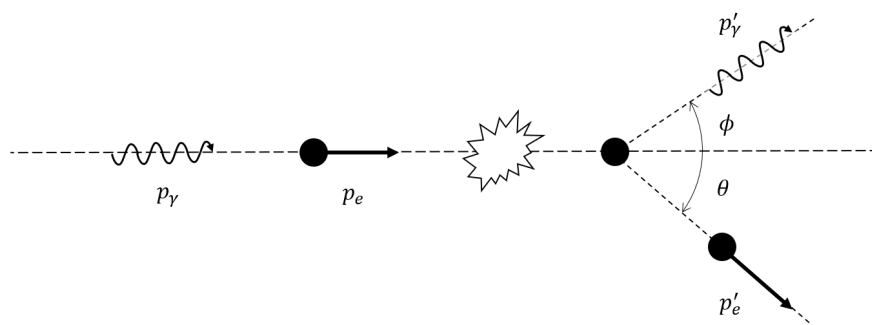


FIGURE 1.2 – Représentation schématique de la diffusion Compton.

Supposons qu'un photon, d'impulsion  $p_\gamma$ , se déplace le long de l'axe  $\vec{Ox}$ , et rencontre un électron de quantité de mouvement  $p_e$ . Pour des raisons de simplicité, nous considérons que ce vecteur est aligné avec la direction de propagation du photon. Après collision, la trajectoire et la fréquence du photon sont modifiées (voir schéma pour la définition des diverses quantités). Ce phénomène, observé par Arthur Compton en 1923, acheva de convaincre les derniers sceptiques à l'égard du modèle corpusculaire de la lumière.

1. Écrivez la conservation de la quantité de mouvement et calculez  $p'_e$ .
2. Écrivez la conservation de l'énergie (relativiste) et montrez que l'énergie du photon diffusé est donnée par

$$E'_\gamma = \frac{E_\gamma(p_e c - E_e)}{E_\gamma(\cos \phi - 1) + p_e c \cos \phi - E_e}. \quad (1.0.1)$$

3. Établissez le déplacement en longueur d'onde du photon  $\Delta\lambda_\gamma = \lambda'_\gamma - \lambda_\gamma$ .
4. On considère désormais que l'électron est initialement au repos. Évaluez la longueur d'onde de Compton de l'électron (pour laquelle le photon est diffusé dans la direction normale à la ligne d'incidence). Quel est le gain relatif en longueur d'onde pour de la lumière visible ( $\lambda \approx 4000 \text{ \AA}$ ) ? Pour du rayonnement X ( $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$ ) ?
5. Calculez l'énergie transférée à l'électron en fonction de l'angle de déviation du photon. Discutez les deux régimes  $E_\gamma \ll m_e c^2$  (*diffusion de Thomson*) et  $E_\gamma \gg m_e c^2$ .
6. Montrez que  $(1 + \sigma) \tan \theta = \cot(\phi/2)$  pour une constante  $\sigma$  que l'on déterminera. Discutez les deux cas extrêmes  $\phi = 0$  et  $\phi = \pi$ . Pouviez-vous prévoir ce type de comportement ?

### Exercice 3 La diffusion de fullerènes.

Les *fullerènes* sont des nanoparticules formées d'un complexe de 60 atomes de carbone ( $C_{60}$ ), et dont le nom fait référence à l'illustre architecte Buckminster Fuller (1895-1983). En 2000, elles furent utilisées par des chercheurs autrichiens pour réaliser une expérience de diffraction quantique, illustrant de manière prodigieuse la dualité onde-corpuscule pour des molécules plus complexes et massives que de simples particules élémentaires.

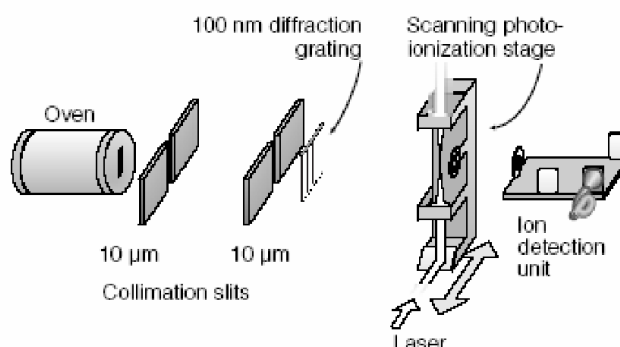


FIGURE 1.3 – *Dispositif expérimental. Source : [Nature 401 (2000) 691].*

1. Les fullerènes étaient émises par une petite ouverture dans un four chauffé à  $1000 \text{ K}$ . Quelle est leur énergie cinétique, leur impulsion, leur longueur d'onde de De Broglie ?
2. Après collimation, les nanoparticules passaient à travers un réseau dont les fentes étaient espacées de  $100 \text{ nm}$ . Elles se propageaient ensuite sur  $1.25 \text{ m}$  avant d'être détectées. Estimez l'interfrange attendu sur la figure de diffraction. La détection s'opérait par focalisation d'un faisceau de lumière visible intense qui ionisaient les fullerènes. Les ions obtenus étaient accélérés par un champ électrique et détectés. L'interfrange est-elle compatible avec la méthode de détection utilisée ?

Voici les résultats de l'expérience. Les deux figures reprennent les coups enregistrés dans le détecteur en fonction de la position de celui-ci, en haut, en présence du réseau, en bas, en l'absence du réseau. On remarque clairement la présence d'interférences, et leur position s'ajuste assez fidèlement aux courbes lisses en surimpression, qui représentent la figure de diffraction attendue dans une théorie purement ondulatoire de la propagation. Ceci nous indique que le comportement collectif des nanoparticules est sans conteste ondulatoire.

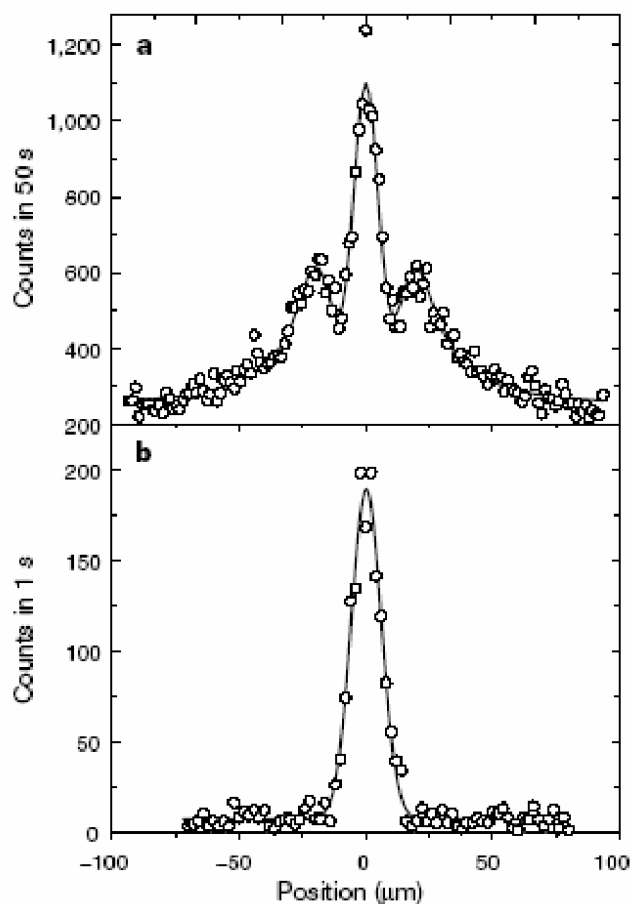


FIGURE 1.4 – Résultats. Source : [Nature **401** (2000) 691].

Depuis lors, cette expérience a été répétée avec d'autres molécules plus complexes, notamment le  $C_{70}$ , la tétraphénylporphyrine (TPP)  $C_{44}H_{30}N_4$  ou encore le fluorofullerène  $C_{60}F_{48}$ .

**Exercice 4** *La relation d'incertitude de Heisenberg.*

1. Nous désirons illustrer ici le fait que les propriétés ondulatoires de la matière ne sont pas pertinentes pour décrire le monde macroscopique. Considérons une particule d'un micromètre de diamètre, et de masse  $m = 10^{-15} \text{ kg}$ . Calculez la longueur d'onde de De Broglie correspondant à cette particule si celle-ci se meut à une vitesse moyenne de  $1 \text{ mm/s}$ . Commentaires ?
2. Soit un virus d'une taille de  $10 \text{ Å}$ . Supposons que sa densité soit celle de l'eau, et qu'il soit confiné dans une région de largeur caractéristique approximativement égale à son diamètre moyen. Quelle est la vitesse minimale de ce virus ?



# Séance 2 | Équation de Schrödinger

## Exercice 1 Conservation des particules et courant de probabilité.

On se donne une fonction d'onde  $\Psi(t, \vec{x})$  décrivant un système dynamique dans l'espace  $\mathbb{R}^3$ , solution de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\vec{x})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \quad (2.0.1)$$

Le module carré  $|\Psi(t, \vec{x})|^2$  de la fonction d'onde joue le même rôle que l'intensité pour les ondes classiques, mais doit être interprété ici comme la densité de probabilité de présence d'une particule à la position  $\vec{x}$ , à l'instant  $t$ . Nous allons montrer que l'équation de Schrödinger garantit la conservation de la particule au cours de son évolution.

1. Montrez que l'équation de Schrödinger peut se réécrire

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.0.2)$$

où  $\rho(t, \vec{x}) = |\Psi(t, \vec{x})|^2$  et  $\vec{J}(t, \vec{x}) = \frac{\hbar}{m}\text{Im}[\bar{\Psi}\vec{\nabla}\Psi]$ . Donnez une signification physique à cette équation et aux quantités qu'elle implique.

2. Montrez que cela conduit à la conservation de la particule décrite par  $\Psi(t, \vec{x})$ , et que la probabilité de présence dans l'espace complet est la norme de  $\Psi(t, \vec{x})$ .
3. On se donne des champs  $\rho(t, \vec{x})$  et  $\vec{J}(t, \vec{x})$  arbitraires. Montrez qu'une condition nécessaire et suffisante pour que ces champs décrivent un état physique  $\Psi(t, \vec{x})$  est  $\vec{\nabla} \times (\vec{J}/\rho) = \vec{0}$ . Déduisez-en que deux états identiques peuvent différer par un facteur de phase global.
4. Considérons une particule libre dont la quantité de mouvement  $\vec{p}$  est *parfaitement* connue.
  - (a) Écrivez la fonction d'onde  $\Psi(t, \vec{x})$  associée.
  - (b) Calculez  $\rho(t, \vec{x})$ ,  $\vec{J}(t, \vec{x})$  et interprétez vos résultats.
  - (c) Cette fonction d'onde est-elle de carré sommable?
  - (d) Votre réponse vous surprend-elle?

**Exercice 2** *Propagation d'un paquet d'onde gaussien.*

Dans la réalité, la Relation de Heisenberg empêche quiconque de prédire exactement la position (respectivement l'impulsion) d'une particule sans provoquer l'indétermination totale de son impulsion (respectivement sa position). Imaginons qu'à l'origine du temps  $t = 0$  nous connaissions approximativement la position d'une particule autour de  $x = 0$ , dont le mouvement sera supposé uni-dimensionnel et libre. L'incertitude sur cette position sera notée  $L$ . Nous pouvons représenter cette particule par une fonction d'onde gaussienne de largeur  $L$  et d'impulsion initiale  $p_0$  :

$$\Psi(0, x) = \frac{1}{\sqrt{L\sqrt{2\pi}}} e^{-\frac{x^2}{4L^2}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}. \quad (2.0.3)$$

Quelle sera la forme et la position du paquet d'onde en un instant futur  $t > 0$ ? C'est ce que nous allons déterminer.

1. Justifiez que la fonction d'onde peut généralement s'écrire comme une superposition d'ondes planes. Nous pouvons donc supposer que

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)} \quad (2.0.4)$$

où les amplitudes  $\psi(p)$  sont encore inconnues, et  $E(p) = p^2/2m$ .

2. À l'aide de la forme de la fonction  $\Psi(0, x)$ , et de l'expression intégrale de la distribution de Dirac

$$\delta(p - p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}, \quad (2.0.5)$$

déterminez l'expression de  $\psi(p)$ . Calculez la moyenne statistique et l'écart-type de  $\psi(p)$ . Vérifiez que la Relation de Heisenberg est satisfaite.

3. Montrez que la fonction d'onde recherchée est donnée par

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{(2\pi L^2 \beta^2)^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - E(p_0)t)} e^{-\frac{1}{4L^2\beta}(x - \frac{p_0}{m}t)^2}, \quad \beta \equiv 1 + \frac{i\hbar t}{2mL^2}. \quad (2.0.6)$$

*Indication* : démontrez que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-\frac{u^2\alpha^2}{2}} e^{iuy} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\alpha} e^{-\frac{y^2}{2\alpha^2}} \quad (2.0.7)$$

pour  $\alpha$  tel que  $\text{Re}\{\alpha^2\} > 0$ .

4. Calculez  $\rho(t, x) = |\Psi(t, x)|^2$  et montrez qu'il s'agit aussi d'une distribution gaussienne, dont vous calculerez la moyenne statistique et l'écart-type. Interprétez vos résultats.
5. Calculez le courant de probabilité  $J(t, x)$  associé à la propagation du paquet d'onde, et vérifiez que la particule est bien conservée.

**Exercice 3** *Marche de potentiel.*

On considère une particule de masse  $m$  en mouvement unidimensionnel le long de la direction  $x$ . Se déplaçant initialement dans la région  $x < 0$  de gauche à droite, elle rencontre en  $x = 0$  une marche de potentiel de hauteur finie et donnée par  $V_0$ . Nous analyserons deux cas distincts.

1. *Réflexion partielle :  $E > V_0$ .*

- (a) Justifiez qu'il n'existe aucun état propre d'énergie négative pour ce système.
- (b) Résolvez l'équation de Schrödinger dans les régions  $x > 0$  et  $x < 0$ .
- (c) En guise de rafraîchissement de mémoire, montrez, comme vous l'avez vu au cours, que sous l'hypothèse d'un potentiel présentant une discontinuité finie en  $x = 0$  (ce qui est le cas ici!), la fonction d'onde de la particule ainsi que sa dérivée doivent être *continues* en  $x = 0$ .
- (d) Faites bon usage de ces conditions de raccord pour trouver les probabilités de réflexion et transmission de la particule par la marche de potentiel. Commentez les résultats obtenus en les confrontant au cas classique.

2. *Réflexion totale :  $E < V_0$ .*

- (a) Résolvez l'équation de Schrödinger dans les régions  $x > 0$  et  $x < 0$ .
- (b) Exigez la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pour trouver les probabilités de réflexion et transmission de la particule par la marche de potentiel.
- (c) Supposons que vous soyez en mesure de photographier le système à un instant arbitrairement choisi. Est-il possible que la particule soit photographiée à *droite* de la marche de potentiel? Commentez.
- (d) Calculez le déphasage entre l'onde incidente et l'onde réfléchie, et donnez-en une interprétation physique.

**Exercice 4** *État lié dans un puits de potentiel infiniment mince.*

On considère une particule de masse  $m$  en mouvement unidimensionnel le long de la direction  $x$  et dont l'opérateur Hamiltonien est donné par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x) \quad (2.0.8)$$

où  $\alpha$  est une constante réelle positive dont on donnera les dimensions.

1. Formez l'équation de Schrödinger qui décrit le mouvement de la particule.
2. Intégrez-la autour du point "dramatique"  $x = 0$  sur un intervalle de rayon  $\varepsilon > 0$  quelconque fixé et arbitrairement proche de zéro. Montrez que la dérivée de la fonction d'onde  $\Psi(x)$  subit une discontinuité en  $x = 0$  que vous exprimerez en fonction de  $\alpha$ ,  $m$  et  $\Psi(0)$ .
3. On suppose que l'énergie  $E$  de la particule est négative (état lié). Résolvez l'équation de Schrödinger dans les régions  $x < 0$  et  $x > 0$ .
4. Exigez les conditions de raccord en  $x = 0$  pour fixer les valeurs possibles pour l'énergie  $E$ , ainsi que les fonctions d'onde normées correspondantes.
5. Représentez graphiquement les fonctions d'onde déterminées au point précédent, et donnez un ordre de grandeur de leur largeur  $\Delta x$ .

**Exercice 5** *Transmission à travers une barrière de potentiel infiniment mince.*

On considère une particule de masse  $m$  en mouvement unidimensionnel le long de la direction  $x$  et dont l'opérateur Hamiltonien est à nouveau donné par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x). \quad (2.0.9)$$

On suppose qu'elle se propage de gauche à droite le long de la direction  $x$  avec une énergie  $E$  positive.

1. Montrez qu'un état stationnaire de la particule peut s'écrire :

$$\begin{cases} x < 0 & : \quad \Psi(x) = e^{ikx} + A e^{-ikx} \\ x > 0 & : \quad \Psi(x) = B e^{ikx} \end{cases} \quad (2.0.10)$$

où  $k$ ,  $A$  et  $B$  sont des constantes dont vous calculerez la valeur en fonction de  $E$ ,  $m$  et  $\alpha$ .

2. Posons  $-E_L \equiv -m\alpha^2/2\hbar^2$ , l'énergie de l'état lié de la particule. Calculez, en fonction du paramètre sans dimensions  $\sigma = E/E_L$  les coefficients de réflexion et transmission de la barrière, notés respectivement  $\mathcal{R}$  et  $\mathcal{T}$ .
3. Décrivez la variation de  $\mathcal{R}$  et  $\mathcal{T}$  en fonction de l'énergie incidente  $E$ . Que se passe-t-il lorsque  $E \rightarrow +\infty$ ? Commentaires?
4. Montrez que, si l'on prolonge l'expression de  $\mathcal{T}$  pour des valeurs d'énergie négatives, elle diverge lorsque  $E \rightarrow -E_L$ . Commentaires?

**Exercice 6** *Piège quantique à murs infiniment minces.*

On considère une particule de masse  $m$  en mouvement unidimensionnel le long de la direction  $x$ , dont l'énergie potentielle s'écrit

$$V(x) = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x - \ell), \quad \alpha > 0, \ell > 0. \quad (2.0.11)$$

1. Calculez les états liés de la particule en fonction du paramètre  $\rho$  défini implicitement par

$$E = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m}. \quad (2.0.12)$$

Montrez que les niveaux d'énergie possibles vérifient la relation

$$e^{-\rho\ell} = \pm \left(1 - \frac{2\rho}{\mu}\right), \quad \mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}. \quad (2.0.13)$$

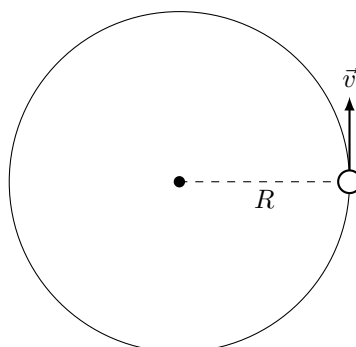
Donnez une résolution graphique de cette équation.

2. Décrivez les états stationnaires du système.

- (a) *État fondamental.* Montrez que l'état fondamental est pair, c'est-à-dire invariant par symétrie miroir par rapport au point central  $x = \ell/2$ . Montrez que son énergie  $E_S$  est inférieure à l'énergie  $-E_L$  de l'état lié introduite à l'exercice précédent. Donnez une interprétation physique pour ce résultat. Représentez graphiquement la fonction d'onde correspondante.
- (b) *État excité.* Montrez que, lorsque le puits est suffisamment large (au-delà d'une valeur critique pour  $\ell$  que vous calculerez), il existe un état excité, impair cette fois, et d'énergie  $E_A$  supérieure à  $-E_L$ . À nouveau, interprétez et représentez graphiquement la fonction d'onde correspondante.

**Exercice 7** *Mouvement circulaire uniforme — Modèle de Bohr.*

Considérons une particule de masse  $m$  confinée sur un cercle de rayon  $R$  et de circonférence  $L = 2\pi R$ . Plus précisément, on admet qu'un potentiel confine la particule dans les directions transverses. Ce potentiel est tellement fort qu'aux échelles d'énergie que nous envisageons, le seul degré de liberté est le mouvement le long du cercle.



Soit  $x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  la coordonnée le long du cercle. L'origine  $x = 0$  est arbitrairement choisie, puisque ce système possède une symétrie de rotation.

1. Quelles sont les conditions de raccord en  $x = \pm \frac{L}{2}$  qu'il faut imposer sur  $\psi(x)$  pour respecter la symétrie du problème?
2. Démontrez que les niveaux d'énergie de la particule sont quantifiés  $\{E_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ , et déterminez les fonctions d'onde  $\{\varphi_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}}$  correspondantes. Les états sont-ils dégénérés?
3. Montrez que les fonctions d'onde associées à  $m \neq n$  sont mutuellement orthogonales.
4. Démontrez que le moment cinétique orbital de la particule est quantifié,  $\mathcal{L}_n = \hbar n$ .

Le résultat précédent est en fait assez fondamental : le *modèle de Bohr* de l'atome d'Hydrogène peut d'ailleurs être construit à partir de ce principe. Considérons un électron décrivant une orbite circulaire *supposée* stable dans le potentiel électrostatique d'un proton, et faisons l'hypothèse que son moment cinétique orbital vérifie  $\mathcal{L} = \hbar n$  où  $n \in \mathbb{N}_0$ .

5. Montrez que le rayon de cette orbite vérifie  $R_n = a_0 n^2$  où  $n \in \mathbb{N}_0$  et  $a_0$  est le rayon de Bohr que l'on calculera. Comment pouviez-vous estimer la valeur de  $a_0$ ?
6. Quels sont, dans ce modèle, les niveaux d'énergie  $\varepsilon_n$  de l'atome d'Hydrogène?
7. Calculez la longueur d'onde dans le vide de la raie correspondant à la transition d'un électron du niveau  $n'$  vers le niveau  $n$  de l'atome d'Hydrogène (*formule de Rydberg*). Quelle est l'énergie d'ionisation de cet atome?

**Exercice 8** Boîte quantique avec barrière infiniment mince.

[Septembre 2019]

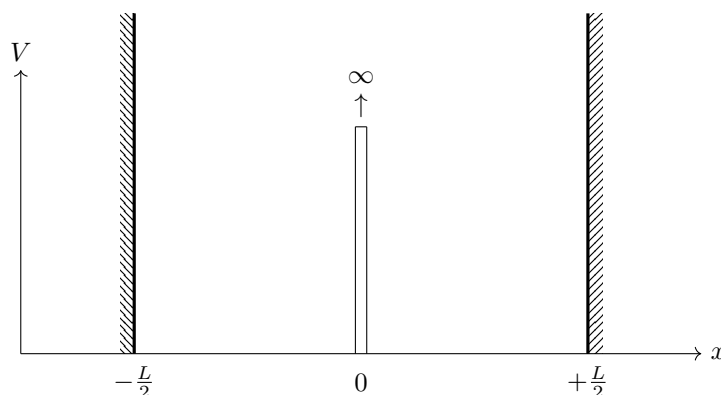


FIGURE 2.1 – Représentation schématique du potentiel  $V(x)$  de l'équation (2.0.14) :  $V$  est infini pour  $x < -\frac{L}{2}$  et pour  $x > \frac{L}{2}$ . En outre un potentiel  $\delta$  est présent en  $x = 0$ .

Considérons une particule de masse  $m$  confinée entre  $x = -\frac{L}{2}$  et  $x = +\frac{L}{2}$ . En  $x = 0$  se trouve une barrière de potentiel suffisamment mince pour que nous puissions la représenter par une distribution  $\delta$ .

L'équation de Schrödinger stationnaire pour la particule est donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.0.14)$$

avec  $\alpha > 0$  et les conditions aux bords  $\psi(-\frac{L}{2}) = 0 = \psi(+\frac{L}{2})$ .

1. Quels sont les états stationnaires du système lorsque  $\alpha = 0$ . Calculez les niveaux d'énergie correspondants.
2. Dorénavant, nous considérons  $\alpha \neq 0$ . Quelles conditions de raccord faut-il imposer en  $x = 0$  pour tenir compte du potentiel  $\delta$  ?
3. Démontrez que toute solution de l'équation (2.0.14) possède une parité bien définie. Montrez en particulier que les fonctions d'onde impaires, solutions de l'équation (2.0.14) avec  $\alpha = 0$  (trouvées au point 1), sont également solutions lorsque  $\alpha \neq 0$  avec la même énergie.
4. Considérons à présent les solutions paires. En utilisant la condition de raccord dérivée au point 2, déterminez les niveaux d'énergie de ces solutions.

*Note :* Ces niveaux d'énergie seront donnés par une équation transcendante que vous ne pourrez pas résoudre analytiquement !



# Séance 3 | Formalisme de Dirac

*Conventions.* Nous travaillons avec des espaces de Hilbert  $\mathcal{H}$  dont les vecteurs sont représentés par les *kets*  $|\psi\rangle$ . Les formes linéaires sur ces espaces sont écrites sous forme de *bras*  $\langle\psi|$ , de sorte que le produit scalaire dans  $\mathcal{H}$  sera noté  $\langle\phi|\psi\rangle$ , avec la notation *braket* qui incorpore directement le théorème de représentation de Riesz. Les opérateurs agissant dans  $\mathcal{H}$  seront toujours repérés par un accent circonflexe,  $\hat{A}$ , alors que les matrices qui les représentent dans une base donnée en seront dépourvues,  $A$ . Parmi les opérateurs, on comptera en particulier les produits dyadiques, représentés par  $|\psi\rangle\langle\phi|$ , ainsi que l'identité, notée  $\hat{I}$ .

## Exercice 1 Découverte du formalisme de Dirac.

1. L'espace des états d'un système physique  $S$  est à deux dimensions. Soit  $\mathcal{B} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  une base orthonormée de cet espace. On définit les *kets*  $|\psi\rangle$  et  $|\chi\rangle$  par :

$$|\psi\rangle = 9i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle \quad ; \quad |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle. \quad (3.0.1)$$

- (a) Calculez les produits scalaires  $\langle\psi|\psi\rangle$ ,  $\langle\chi|\chi\rangle$ ,  $\langle\psi|\chi\rangle$  et  $\langle\chi|\psi\rangle$ . Déduisez-en la valeur du produit scalaire  $\langle\psi + \chi|\psi + \chi\rangle$ . Les quantités  $\langle\psi|\chi\rangle$  et  $\langle\chi|\psi\rangle$  sont-elles égales ?
- (b) Formez les opérateurs  $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\chi|$  et  $\hat{B} = |\chi\rangle\langle\psi|$ , sont-ils égaux ? Calculez leur trace, qu'observez-vous ?
- (c) Établissez l'expression des opérateurs réalisant la projection orthogonale le long de  $|\psi\rangle$  et  $|\chi\rangle$  respectivement. Calculez leur trace.
- (d) On définit les vecteurs  $|\pm\rangle = N(|\phi_1\rangle \pm |\phi_2\rangle)$ , où  $N$  est une constante de normalisation à déterminer. Calculez les opérateurs de projection orthogonale sur ces vecteurs. Sont-ils hermitiens ? Montrez que leurs ensembles images sont orthogonaux. Calculez leur somme. Commentaires ?
- (e) Montrez que  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  forment une nouvelle base  $\mathcal{B}'$  orthonormale de  $S$  et donnez la matrice de changement de base.
- (f) Dans la base  $\mathcal{B}$ , un opérateur  $\hat{H}$  est représenté par la matrice

$$H = \begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & 1 \end{bmatrix}, \quad \alpha \in \mathbb{R}_0. \quad (3.0.2)$$

Déterminez la représentation de  $\hat{H}$  dans la nouvelle base  $\mathcal{B}'$ , d'une part en utilisant la procédure algébrique habituelle, et d'autre part, en se reposant uniquement sur la notation de Dirac.

2. Soit un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  sur lequel agit l'opérateur  $\hat{H} = \alpha|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + h.c.$  où  $\alpha \in \mathbb{R}_0$ , et les  $|\phi_i\rangle$  sont les vecteurs propres normalisés, et non-dégénérés, d'un opérateur  $\hat{A}$  auto-adjoint pour le produit scalaire dont  $\mathcal{H}$  est muni.
  - (a) Déterminez  $p, q \in \mathbb{Z}_0$  tels que  $\hat{P} = \alpha^p \hat{H}^q$  soit un projecteur. Déterminez  $\text{Ker } \hat{P}$  et  $\text{Im } \hat{P}$ . Commentaires ?
  - (b) Calculez le commutateur  $[\hat{H}, |\phi_1\rangle\langle\phi_1|]$ . Pouvez-vous en déduire  $[\hat{H}, |\phi_2\rangle\langle\phi_2|]$  ?

- (c) Sans construire explicitement la matrice de  $\hat{H}$ , trouvez les vecteurs propres de  $\hat{H}$  ainsi que les valeurs propres correspondantes.
- (d) Construisez la matrice représentant  $\hat{H}$  dans la base que vous avez à votre disposition. Vérifiez alors vos résultats obtenus du point précédent.

**Exercice 2** *Base d'opérateurs.*

Soit un espace de Hilbert de dimension  $N \in \mathbb{N}_0$ . On imagine qu'il existe un opérateur  $\hat{H}$  agissant dans cet espace, qui soit hermitien et possède un ensemble de vecteurs propres non-dégénérés notés  $\{|\varphi_n\rangle\}$ . Pour les besoins de l'exercice, nous supposons que ces vecteurs de base sont normés :  $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1, \forall n$ .

1. Justifiez que  $\mathcal{B} = \{|\varphi_n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$  constitue une base orthonormée de l'espace de Hilbert.
2. Pour tout couple de naturels  $(m, n)$ , on définit l'opérateur  $\hat{U}(m, n) = |\varphi_m\rangle\langle\varphi_n|$ . Interprétez l'action de  $\hat{U}(m, n)$  lorsque  $m \neq n$ .
3. Quel sens donnez-vous à  $\hat{U}(n, n)$ ? Montrez qu'il faut et il suffit que  $\sum_{n=1}^N \hat{U}(n, n) = \hat{I}$  pour que  $\mathcal{B}$  forme une base orthonormée de l'espace de Hilbert (*relation de fermeture*).
4. Calculez l'adjoint de  $\hat{U}(m, n)$  ainsi que le commutateur  $[\hat{H}, \hat{U}(m, n)]$ .
5. Calculez  $\hat{U}(m, n)\hat{U}^\dagger(p, q)$ ,  $\forall m, n, p, q \in \mathbb{N}_0$ , ainsi que  $\text{tr}[\hat{U}(m, n)]$ .
6. Soit un opérateur  $\hat{A}$  dont les éléments de matrice dans la base  $\mathcal{B}$  sont les nombres complexes  $A_{mn}$ . Démontrez la relation  $\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn} \hat{U}(m, n)$ .
7. Prouvez que si l'on dispose de l'opérateur  $\hat{A}$  et de la collection d'opérateurs  $\hat{U}(m, n)$ , on peut facilement obtenir les composantes  $A_{mn}$  en calculant  $A_{mn} = \text{tr}[\hat{A}\hat{U}^\dagger(m, n)]$ . Quel sens donnez-vous alors à  $\hat{U}(m, n)$ ?

**Exercice 3** Structures propres (2 dimensions).

Soit un opérateur hermitien  $\hat{A}$  agissant dans un espace de Hilbert à 2 dimensions dont on considère la base orthonormée  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Nous dénoterons par  $A_{mn}$  l'élément de matrice  $\langle m|\hat{A}|n\rangle$ .

1. Montrez qu'il existe un opérateur hermitien  $\hat{A}'$ , sans dimensions et sans trace, tel que  $\hat{A} = \frac{1}{2}\alpha\hat{I} + \frac{1}{2}\beta\hat{A}'$ , avec  $\alpha = \text{Tr}\hat{A}$ . Donnez l'expression de  $\beta$  et des  $A'_{mn}$  en termes des  $A_{mn}$ .
2. On définit les angles  $\theta \in [0, \pi]$  et  $\phi \in [0, 2\pi[$  par  $\theta = \arctan \left[ \frac{2|A_{21}|}{A_{11}-A_{22}} \right]$  et  $\phi = \arg(A_{21})$ . Déterminez la structure propre de  $\hat{A}'$  en fonction de  $(\theta, \phi)$ .
3. Déduisez-en les valeurs et vecteurs propres de  $\hat{A}$  en fonction de  $(\theta, \phi)$ . Commentaires?
4. À quelle condition le spectre de  $\hat{A}$  est-il dégénéré?

**Exercice 4** Structures propres (3 dimensions).

Soient deux transformations linéaires  $\hat{A}, \hat{B} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  dont les matrices exprimées par rapport à la base canonique  $\mathcal{B}$  de  $\mathbb{R}^3$  sont

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.0.3)$$

1. Caractérisez l'opérateur  $\hat{A}$ , ainsi que son spectre. Est-il diagonalisable? Donnez son expression dans la base canonique de  $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ . Mêmes questions pour  $B$ .
2. Déterminez les valeurs propres, ainsi que les vecteurs propres normalisés de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ .
3. Montrez que les vecteurs propres de  $\hat{A}$  forment une nouvelle base orthonormée complète  $\mathcal{B}'$  par rapport au produit scalaire  $\langle \vec{x}|\vec{y} \rangle = \sum_i x_i y_i$  dans  $\mathbb{R}^3$ , et justifiez-le.
4. Calculez les matrices de projection sur les sous-espaces propres de  $\hat{A}$ . Vérifiez que ces projecteurs satisfont à des relations d'orthogonalité et de complétude. Interprétez cet état de fait.
5. Déterminez et caractérisez l'opérateur  $\hat{U}$  qui permet, par transformation de similitude, d'obtenir la forme de Jordan de  $\hat{A}$ , et donnez sa matrice dans les bases  $\mathcal{B}$  et  $\mathcal{B}'$ .
6. Calculez les matrices représentant  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  dans la base  $\mathcal{B}'$  de deux façons différentes.

Pour s'entraîner : analysez la structure propre des opérateurs décrits par les matrices suivantes

$$\begin{bmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -i & i \\ -i & 0 & i \\ i & i & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -6 & -4 \\ 5 & -11 & -6 \\ -6 & 9 & 4 \end{bmatrix}.$$

**Exercice 5** Projecteurs orthogonaux.

Il existe une classe bien utile d'opérateurs qui réalisent une projection sur un sous-espace qui soit orthogonal à son complémentaire. Cet exercice se fixe pour but de donner une caractérisation de ces projecteurs, dits *orthogonaux*, ainsi que d'étudier leur composition.

1. Montrez que si  $\hat{P}$  est un projecteur, alors  $\hat{I} - \hat{P}$  est également un projecteur, et déterminez les sous-espaces  $\text{Ker}(\hat{I} - \hat{P})$  et  $\text{Im}(\hat{I} - \hat{P})$ .
2. Démontrez qu'un projecteur  $\hat{P}$  est orthogonal si et seulement si  $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$ .

Soient  $\hat{P}_1$  le projecteur orthogonal sur le sous-espace vectoriel  $\mathcal{E}_1$  de l'espace vectoriel  $\mathcal{V}$ , et  $\hat{P}_2$  le projecteur orthogonal sur le sous-espace vectoriel  $\mathcal{E}_2$ .

3. Montrez que le produit  $\hat{P}_1\hat{P}_2$  est un projecteur orthogonal si et seulement si  $\hat{P}_1$  et  $\hat{P}_2$  commutent. Si tel est le cas, quel est le sous-espace sur lequel projette  $\hat{P}_1\hat{P}_2$ ?
4. Montrez que la somme  $\hat{P}_1 + \hat{P}_2$  est un projecteur orthogonal si et seulement si  $\hat{P}_1\hat{P}_2$  est zéro. Dans ce cas, déterminez le sous-espace sur lequel projette  $\hat{P}_1 + \hat{P}_2$ .
5. Montrez que  $\hat{P}_1 + \hat{P}_2 - \hat{P}_1\hat{P}_2$  est un projecteur orthogonal à condition que  $\hat{P}_1$  et  $\hat{P}_2$  commutent. Sur quel sous-espace cet opérateur projette-t-il?

**Exercice 6** *Opérateurs unitaires.*

Nous savons désormais que les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles, et que les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux. Nous allons prouver que les opérateurs unitaires, d'importance primordiale pour la Mécanique Quantique, jouissent de propriétés similaires.

1. Soit  $\hat{U}$  un opérateur unitaire,  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ . Montrez que les valeurs propres de  $\hat{U}$  sont des nombres complexes de module 1.
2. Montrez que les vecteurs propres de  $\hat{U}$  associés à des valeurs propres *distinctes* sont orthogonaux.

**Exercice 7** *Fonctions de matrices et d'opérateurs.*

Soit  $f(x)$  une fonction analytique d'une variable complexe.

1. Pour une matrice  $A$  à coefficients complexes, comment donner sens à  $f(A)$  ?
2. Soit  $D$  une matrice diagonale. Calculez explicitement  $f(D)$ .
3. Soient  $M$  et  $N$  deux matrices semblables. Montrez que  $f(M)$  et  $f(N)$  sont également semblables et donnez la transformation de similitude.
4. Utilisez les résultats précédents pour expliciter  $f(H)$  où  $H$  est une matrice hermitienne.

5. Concentrons-nous à présent sur les transformations de  $\mathbb{R}^n$ , où  $n \in \mathbb{N}_0$ .
- (a) Soit  $A$ , une matrice de  $\mathbb{R}^{n \times n}$ . Définissez l'exponentielle matricielle  $e^A$  et montrez qu'elle existe toujours.
  - (b) Montrez que  $B = e^A$  est inversible, et donnez  $B^{-1}$ .
  - (c) Prouvez que  $B$  est une transformation orthogonale si  $A$  est antisymétrique.
6. Particularisons maintenant aux transformations de l'espace euclidien  $\mathbb{R}^3$ , dont la base canonique est notée  $\mathcal{B} = \{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$ . Considérons les 3 matrices suivantes, exprimées dans  $\mathcal{B}$  :

$$L_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_z = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.0.4)$$

- (a) Calculez  $R_a(\theta) \equiv e^{\theta L_a}$  avec  $a = x, y, z$  paramétrées par  $\theta \in [0, 2\pi[$ .
- (b) Que représentent les trois transformations linéaires dont les  $R_a$  sont les matrices dans la base canonique  $\mathcal{B}$ ?
- (c) Calculez les matrices représentant des transformations *infinitésimales*  $R_a(\delta\theta)$  où le paramètre  $\delta\theta \ll 1$ . Déduisez-en le rôle des  $L_a$ .
- (d) Calculez les commutateurs  $[L_a, L_b] = L_a L_b - L_b L_a$ ,  $\forall a, b \in \{x, y, z\}$ . Commentaires?

### Exercice 8 Propriétés des commutateurs.

Très souvent, nous allons essayer d'analyser les propriétés de systèmes physiques en regardant de plus près les propriétés des opérateurs qui agissent sur ce système. En particulier, on va très fréquemment s'intéresser aux propriétés des commutateurs de ces opérateurs, lesquels sont les analogues quantiques des crochets de Poisson classiques, par le truchement du Principe de Correspondance. Voici donc quelques exercices qui permettent de revoir ou de découvrir quelques propriétés très utiles du commutateur de deux opérateurs  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ .

1. Considérons trois opérateurs  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  et  $\hat{C}$ . Prouvez les assertions suivantes :
  - (a) Le commutateur est bilinéaire, antisymétrique et vérifie l'*identité de Jacobi*  $[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] = 0$ .
  - (b) Le commutateur se distribue sur le produit  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ .
2. Supposez que  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent avec leur commutateur  $[\hat{A}, \hat{B}]$ . Prouvez alors que  $[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$  et  $[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ .
3. Généralisez le résultat précédent en montrant, pour toute fonction analytique  $F(\hat{B})$ , que  $[\hat{A}, F(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}]F'(\hat{B})$ .
4. Démontrez qu'à condition que  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent avec leur commutateur, on a

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp(\hat{A} + \hat{B}) \exp([\hat{A}, \hat{B}]/2). \quad (3.0.5)$$

C'est un cas particulier de l'*identité de Baker-Hausdorff*.

### Exercice 9 Espace métrique de fonctions.

Soit  $\mathcal{W} = \mathcal{P}_3([-1, 1])$ , l'ensemble des polynômes de degré au plus 3 définis sur l'intervalle  $[-1, 1]$  de la droite réelle, sur lequel on peut définir le produit scalaire

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R} : (f, g) \mapsto \langle f | g \rangle = \int_{-1}^{+1} dx f(x)g(x). \quad (3.0.6)$$

1. Montrez que  $\mathcal{W}$  est un espace vectoriel de dimension 4 dont la base canonique est  $\{1, x, x^2, x^3\}$ . On notera cette base  $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ .
2. Déterminez l'expression de l'opérateur  $\hat{D} : \mathcal{W} \rightarrow \mathcal{W} : f(x) \mapsto f'(x)$  dans la base canonique.
3. Exprimez de même l'opération de translation  $\hat{T}_a : \mathcal{W} \rightarrow \mathcal{W} : f(x) \mapsto f(x+a)$ , où  $a$  est un nombre réel arbitrairement fixé.

4. Montrez que  $\hat{T}_a = \exp a\hat{D}$ . En considérant la limite  $a \ll 1$ , interprétez le rôle de  $\hat{D}$ . Quel célèbre résultat retrouvez-vous ?
5. Déterminez une base orthonormée de l'espace  $\mathcal{W}$ , notée  $\{|P_n\rangle\}_{n=0}^3$ . Écrivez votre résultat explicitement en termes de la coordonnée  $x$  : vous obtenez ainsi les 4 premiers polynômes de Legendre !
6. Considérez l'opérateur  $\hat{A} = \hat{D} \circ [(1 - x^2)\hat{D}]$ . Montrez que  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ .
7. Calculez la matrice de  $\hat{A}$  dans la base des polynômes de Legendre, qu'observez-vous ?

# Séance 4 | Postulats & applications

## Exercice 1 *Évolution quantique.*

Soit un système quantique dont l'état dépendant du temps est noté  $|\psi(t)\rangle$ , et dont l'opérateur Hamiltonien s'écrit  $\hat{H}(t)$ .

### 1. Opérateur d'évolution.

- (a) Déduisez de l'uniformité du temps de la Relativité Galiléenne qu'il existe un opérateur unitaire  $\hat{U}(t, t_0)$  qui fasse évoluer l'état  $|\psi(t)\rangle$  du temps  $t_0$  de référence au temps  $t \geq t_0$ .
- (b) Prouvez que cet  $\hat{U}(t, t_0)$  est unique, et ne dépend donc pas de l'état de départ  $|\psi(t_0)\rangle$ .
- (c) Montrez que l'ensemble de tels opérateurs  $\hat{U}(t, t_0)$  doit former un groupe à un paramètre pour la loi de composition des opérateurs agissant sur l'espace des états du système.

### 2. Évolution des états quantiques.

- (a) Montrez que l'équation d'évolution d'un état quantique  $|\psi(t)\rangle$  est de la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{A}(t, t_0) |\psi(t)\rangle \quad (4.0.1)$$

pour un opérateur  $\hat{A}(t, t_0)$  que l'on calculera en fonction de  $\hat{U}(t, t_0)$ .

- (b) Démontrez que  $\hat{A}(t, t_0)$  est hermitien et indépendant de  $t_0$ . On notera donc  $\hat{A}(t)$ .
- (c) Justifiez, grâce au Principe de Correspondance *et* la définition de  $\hat{H}$  que  $\hat{A}(t) = \hat{H}(t)$  est un choix physiquement raisonnable. Qu'avez-vous retrouvé?
- (d) Donnez l'expression de  $\hat{U}(t, t_0)$  pour un système conservatif (le cas général fait l'objet d'un calcul assez technique qui ne sera pas abordé ici).
- (e) Pouvez-vous interpréter le rôle de l'opérateur  $\hat{H}$ ?

**Exercice 2** *Théorème d'Ehrenfest.*

1. Soit l'observable  $\hat{O}$  agissant dans l'espace des états du système. Dérivez l'équation d'évolution de la valeur moyenne de  $\hat{O}$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ .
2. Explicitiez cette équation pour  $\hat{O} = \hat{P}$  et  $\hat{O} = \hat{X}$ , et montrez que cela conduit aux équations de Hamilton pour les valeurs moyennes de ces observables.
3. Considérez une particule libre à une dimension possédant, à l'instant initial  $t = 0$ , une quantité de mouvement  $p_0$ .
  - (a) Montrez que les valeurs moyennes de  $\hat{P}(t)$  et  $\hat{X}(t)$  évoluent conformément aux équations classiques.
  - (b) Montrez que  $m \frac{d}{dt} \langle \hat{X}^2 | \hat{X}^2 \rangle = 2 \langle \hat{P} \hat{X} | \hat{P} \hat{X} \rangle + i\hbar$ . Comment  $\langle \hat{P}^2 | \hat{P}^2 \rangle$  évolue-t-elle?
  - (c) Déduisez-en que l'étalement  $\Delta x$  du paquet d'onde décrivant la particule est une fonction quadratique en  $t$ . Cela vous rappelle-t-il quelque chose?

**Exercice 3** *Opérateurs position et quantité de mouvement.*

En mécanique classique, le mouvement d'une particule se déplaçant dans l'espace est formulé en termes d'un espace des phases dont les coordonnées sont  $(\vec{x}, \vec{p})$ , où  $\vec{p}$  est le moment canoniquement conjugué à  $\vec{x}$ , appelé quantité de mouvement.

Par le truchement du Principe de Correspondance, les observables classiques  $\vec{x}$  et  $\vec{p}$  sont promues au rang d'opérateurs hermitiens  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$  agissant sur l'espace  $\mathcal{H}$  des états du système. La quantification du crochet de Poisson classique impose par ailleurs que  $[\hat{X} \cdot \vec{e}_m, \hat{P} \cdot \vec{e}_n] = i\hbar \hat{I} \delta_{mn}$ , où les  $\{\vec{e}_m\}$  sont les vecteurs de la base canonique de l'espace  $\mathbb{R}^3$ .

Cet exercice se fixe pour but de jouer quelque peu avec ces opérateurs afin d'étudier comment la symétrie de translation est implémentée au niveau quantique, et démontrer que  $\hat{P}$  peut être représenté comme un opérateur différentiel agissant sur l'espace de Hilbert des fonctions d'onde décrivant le système physique.

**1. Opérateur de translation.**

- (a) On définit  $\hat{T}(\vec{\alpha}) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \hat{P} \right]$ , pour tout  $\vec{\alpha} \in \mathbb{R}^3$ . Montrez que ces opérateurs sont unitaires et forment un groupe pour la loi  $\hat{T}(\vec{\alpha})\hat{T}(\vec{\beta}) = \hat{T}(\vec{\alpha} + \vec{\beta})$ .
- (b) Montrez que  $[\hat{X}, \hat{T}(\vec{\alpha})] = \vec{\alpha} \hat{T}(\vec{\alpha})$ .
- (c) Calculez ensuite  $\hat{T}(-\vec{\alpha})\hat{X}\hat{T}(\vec{\alpha})$  et interprétez l'action de  $\hat{T}(\vec{\alpha})$ .



**2. Opérateur position.**

- (a) Supposons que  $|\vec{x}\rangle$  soit vecteur propre de  $\hat{X}$  de valeur propre  $\vec{x}$ . Montrez que  $\hat{T}(\alpha)|\vec{x}\rangle$  est aussi vecteur propre de  $\hat{X}$  pour une valeur propre que l'on précisera. Caractérisez le spectre de  $\hat{X}$ .
- (b) Démontrez que les *kets*  $|\vec{x}\rangle$  sont orthonormés au sens des distributions, et commentez cet état de fait.
- (c) Montrez que la dégénérescence de  $|\vec{x}\rangle$  ne dépend pas de  $\vec{x}$ . Nous supposons donc ces états non-dégénérés par la suite.
- (d) Soit  $|\psi\rangle$  un état quantique. La fonction d'onde associée est  $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$ . Calculez l'élément de matrice  $\langle \vec{x} | \hat{T}(\vec{\alpha}) | \psi \rangle$  en fonction de  $\psi(x)$ . Déduisez-en que  $\hat{P} \equiv -i\hbar \vec{\nabla}$ .
- (e) Prouvez que cette définition garantit que  $\hat{P}$  soit hermitien.

**3. Invariance par translation**

- (a) Démontrez que la fonction d'onde  $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$  est invariante sous translations, c'est-à-dire, si  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \vec{x} + \vec{\alpha}$ ,  $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$ . Commentaires?
- (b) Comment se transforme l'Hamiltonien  $\hat{H}$  du système sous translation? Que se passe-t-il si le système est invariant sous translation?
- (c) Déduisez-en que la quantité de mouvement est alors *conservée*. Cela vous rappelle-t-il quelque chose?

**Exercice 4** *Observables compatibles et Relation de Heisenberg.*

On définit  $\langle \hat{A} | \hat{A} \rangle_\psi \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  la valeur moyenne de l'observable  $\hat{A}$  dans l'état  $|\psi\rangle$ . En vertu du 3<sup>e</sup> Postulat de la Mécanique Quantique, l'incertitude sur la mesure de cette observable est donné par l'écart-type probabiliste  $\Delta A \equiv \sqrt{\langle \hat{A}^2 | \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} | \hat{A} \rangle_\psi^2}$ .

1. Montrez que  $\Delta A$  équivaut à la norme hilbertienne du vecteur  $(\hat{A} - \langle \hat{A} | \hat{A} \rangle_\psi \hat{I}) |\psi\rangle$ .
2. Pour tout couple d'observables  $\hat{A}, \hat{B}$ , établissez l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \frac{1}{i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] | [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi \right|. \quad (4.0.2)$$

3. Deux observables qui ne commutent pas entre elles peuvent-elles être mesurées simultanément? Particularisez à  $\hat{A} = \hat{X}$ ,  $\hat{B} = \hat{P}$ . Quel célèbre résultat retrouvez-vous?

**Exercice 5** *Mesure et évolution.*

La molécule d'Ozone  $O_3$  est constituée de 3 atomes d'Oxygène  $O$  dont la structure électronique est  $[\text{He}]2s^22p^4$ . Lors de l'assemblage de la molécule, les orbitales atomiques se recouvrent pour établir la liaison moléculaire. On observera une *liaison*  $\sigma$  pour chaque recouvrement d'orbitales dans l'axe interatomique. Les électrons restants, peuplant des orbitales atomiques  $2p$  orthogonales au plan de la molécule, vont réaliser un recouvrement latéral connu sous le nom de *liaison*  $\pi$ . Dans la molécule d'Ozone, 4 électrons  $2p$  sont disponibles pour la liaison  $\pi$ , qui va potentiellement les délocaliser dans toute la molécule.

Dans l'état fondamental, nous simplifions le modèle en supposant qu'il n'y a aucune interaction entre les liaisons  $\sigma$  et  $\pi$ , de sorte que nous puissions nous concentrer exclusivement sur les secondes. On notera alors  $|\phi_1\rangle$ ,  $|\phi_2\rangle$  et  $|\phi_3\rangle$  les orbitales atomiques  $2p$ . Le Principe de Superposition conduit à penser l'orbitale moléculaire  $\pi$  comme une combinaison linéaire de ces trois *kets* : l'espace des états du problème est donc à 3 dimensions. Nous supposons que l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  est représenté dans la base orthonormée  $\mathcal{B} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$  par la matrice

$$H = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 \\ \beta & \alpha & \beta \\ 0 & \beta & \alpha \end{bmatrix}, \quad (4.0.3)$$

où  $\alpha > 0$  est l'*intégrale coulombienne*, correspondant approximativement à l'énergie de l'orbitale atomique  $2p$  que l'Oxygène se dispose à partager, tandis que  $\beta > 0$  est l'*intégrale de recouvrement*, décrivant la propension de ces orbitales à se délocaliser vers les atomes voisins. A l'instant  $t = 0$ , les électrons du système  $\pi$  se trouvent dans l'état collectif  $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - |\phi_3\rangle)$ .

1. Quels résultats peuvent être obtenus grâce à une mesure de l'énergie de la molécule? Calculez et représentez graphiquement les états stationnaires correspondants.
2. Quelle est la probabilité de mesurer chacune de ces valeurs en  $t = 0$ ? Donnez l'énergie moyenne de la molécule en cet instant, ainsi que l'incertitude sur la mesure de l'énergie.
3. Quel sera l'état  $|\psi(t)\rangle$  du système  $\pi$  en un temps  $t > 0$ ? Les probabilités de mesurer chaque valeur de l'énergie ont-elles changé? Commentaires?
4. Déterminez la probabilité que l'état  $|\psi(t)\rangle$  coïncide avec l'état initial  $|\psi_0\rangle$ .
5. Supposons que l'on mesure l'énergie de la molécule au temps  $t$ , et que l'on obtienne  $E = \alpha$ . Quel est l'état du système en  $t' > t$ ?
6. En  $t'$ , on décide de mesurer l'observable  $\hat{A}$  dont la matrice dans la base  $\mathcal{B}$  s'écrit

$$A = a \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.0.4)$$

où  $a \in \mathbb{R}$ . Quels résultats peut-on obtenir, et avec quelles probabilités?

**Exercice 6** *Mesures successives et commutateurs.*

Considérons un système physique dont l'espace des états, qui est à trois dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les trois vecteurs  $|\phi_1\rangle$ ,  $|\phi_2\rangle$  et  $|\phi_3\rangle$ . Dans cette base, les matrices de l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  du système et de deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  s'écrivent :

$$H = E_0 \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} ; \quad A = a \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{bmatrix} ; \quad B = b \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad (4.0.5)$$

où  $E_0, a, b$  sont des nombres réels strictement positifs. À l'instant initial  $t = 0$ , le système se trouve dans l'état  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_3\rangle$ .

1. Si une mesure d'énergie est effectuée sur le système à l'instant  $t = 0$ , quelles valeurs pourront être obtenues, et avec quelles probabilités? Calculez la valeur moyenne  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle$  et l'écart quadratique moyen  $\Delta H$  dans l'état initial.

2. Déterminez la structure propre des observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Qu'observez-vous ?
3. Calculez le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  du système au temps  $t > 0$ , ainsi que les valeurs moyennes  $\langle \hat{A} | \hat{A} \rangle(t)$  et  $\langle \hat{B} | \hat{B} \rangle(t)$ . Quelles remarques pouvez-vous faire ?
4. *Mesure de l'observable  $\hat{A}$ .*
  - (a) Nous mesurons l'observable  $\hat{A}$  en  $t = t_1 \equiv \frac{\pi\hbar}{2E_0}$ , et nous obtenons  $A = 2a$ . Quelle était la probabilité d'obtenir ce résultat ? Quel est l'état du système immédiatement après la mesure ? Quel est ce même état en  $t > t_1$  ?
  - (b) Calculez  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle$  et  $\Delta H$  après la mesure de  $\hat{A}$ , et commentez votre réponse.
  - (c) Quelle est la probabilité d'obtenir  $(E, A) = (E_0, 2a)$  par une mesure de  $\hat{A}$  en  $t = t_1$  et une mesure de  $\hat{H}$  immédiatement après ? Qu'observez-vous ?
  - (d) Comparez cette valeur à la probabilité d'obtenir les mêmes résultats en *inversant* l'ordre des opérations.
5. *Mesure de l'observable  $\hat{B}$ .*
  - (a) Supposons maintenant que l'on mesure  $\hat{B}$  en  $t = t_1$ , et que nous obtenions  $B = -b$ . Déterminez à nouveau l'état du système en  $t \geq t_1$ .
  - (b) Que valent  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle$  et  $\Delta H$  dans cet état ? Expliquez votre raisonnement.
  - (c) Quel est le résultat d'une seconde mesure de  $\hat{B}$  entre  $t_1$  et  $t_2$  ? Justifiez !
  - (d) Quelle est la probabilité d'obtenir  $(E, B) = (2E_0, -b)$  par une mesure de  $\hat{B}$  en  $t = t_1$  et une mesure de  $\hat{H}$  immédiatement après ? L'ordre des opérations importe-t-il ici ?

### Exercice 7 Effondrement de la fonction d'onde.

On considère le problème bien connu d'une particule libre de masse  $m$  coincée entre deux plaques infranchissables situées en  $x = 0$  et  $x = a$ .

1. Soient  $|\phi_n\rangle$  les états propres du système, associés aux énergies  $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$ .
  - (a) Calculez les éléments de matrice des opérateurs  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  dans la base  $\{|\phi_n\rangle\}$ .
  - (b) Déduisez-en les valeurs moyennes  $\langle \hat{X} | \hat{X} \rangle_n$  et  $\langle \hat{P} | \hat{P} \rangle_n$  ainsi que les incertitudes  $\Delta X_n$  et  $\Delta P_n$ .
  - (c) Vos résultats sont-ils compatibles avec la Relation de Heisenberg ? Évaluez l'énergie de point zéro du système, et comparez-la au résultat exact.
2. Initialement, l'état de la particule est  $|\psi(0)\rangle = a_1 |\phi_1\rangle + a_2 |\phi_2\rangle + a_3 |\phi_3\rangle + a_4 |\phi_4\rangle$ . On supposera, par un choix de phase adéquat, que  $a_1$  est un nombre réel.
  - (a) Quelle est la probabilité de trouver  $E < \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$  si l'on mesure l'énergie en  $t = 0$  ?
  - (b) Calculez  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle$  dans l'état initial, et déterminez l'incertitude sur la mesure de l'énergie. Quelles conditions sur les  $(a_i)$  entraînent l'annulation de cette incertitude ?
  - (c) Calculez l'état de la particule au temps  $t > 0$ . Les résultats trouvés en (a) et (b) restent-ils corrects en un instant  $t > 0$  quelconque fixé ? Commentez votre réponse.
  - (d) Lors d'une mesure d'énergie, on trouve  $E = \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ . Après la mesure, quel est l'état du système ? Quelle valeur obtiendra-t-on si l'on mesure à nouveau l'énergie ? Commentaires ?
3. Considérons à présent que  $a_1 = a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$  et  $a_3 = a_4 = 0$ .
  - (a) Écrivez la fonction d'onde  $\psi(0, x)$  de la particule à l'instant initial  $t = 0$ . Calculez la valeur moyenne de l'impulsion  $\langle \hat{P} | \hat{P} \rangle$ , ainsi que l'incertitude sur la mesure de celle-ci.
  - (b) Calculez l'état  $|\psi(t)\rangle$  au temps  $t > 0$ . Comment évolue la probabilité de présence  $\rho(t, x)$  ? Montrez que la particule est conservée.
  - (c) Montrez que le centre du paquet d'onde décrit par  $|\psi(t)\rangle$  oscille autour de la position  $x = a/2$  à une pulsation  $\omega_0$  que vous calculerez. Commentaires ?

- (d) Calculez l'énergie moyenne  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle$ , ainsi que l'incertitude  $\Delta E$  sur la mesure de l'énergie. Pour l'échelle de temps caractéristique du système  $\Delta t = \omega_0^{-1}$ , estimez  $\Delta E \Delta t$ .
- (e) Calculez la probabilité de trouver la particule entre  $x = 0$  et  $x = a/2$  au temps  $t$ .
- (f) Supposons que l'on mesure l'énergie au temps  $t_1$  et que l'on obtienne  $E = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$ . Quel est l'état du système en  $t_2 > t_1$ ? Supposons maintenant que l'on mesure la position du système en  $t_2$ , et que l'on obtienne  $x = a/2$ . Donnez la fonction d'onde *normalisée* du système en tout temps ultérieur à  $t_2$ .
- (g) Quels résultats peuvent être retirés d'une mesure de l'énergie en  $t_3 > t_2$ , et avec quelles probabilités? Expliquez vos résultats.

**Exercice 8** *Ensembles complets d'opérateurs qui commutent.*

Soit  $\hat{A}$  un opérateur hermitien agissant dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ . On peut prendre une base de  $\mathcal{H}$  qui est constitué de vecteurs propres de  $\hat{A}$ . Si le spectre de  $\hat{A}$  est non dégénéré, alors cette base est unique. Mais si le spectre est dégénéré, alors la base n'est évidemment pas unique! Que faire? Considérer une seconde observable  $\hat{B}$  qui commute avec  $\hat{A}$ ...

1. Montrez que  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  peuvent être simultanément diagonalisées si et seulement si  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .
2. Montrez que, pour tout vecteur propre  $|a\rangle$  de  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}|a\rangle$  est également vecteur propre de  $\hat{A}$ . Déterminez la valeur propre correspondante et expliquez les conséquences de ce résultat.
3. Démontrez que  $\langle a_1 | \hat{B} | a_2 \rangle = 0$  si  $|a_1\rangle$  et  $|a_2\rangle$  sont deux vecteurs propres de  $\hat{A}$  associés à des valeurs propres *distinctes*.

Grâce à ces résultats, on peut se munir d'une base dont tous les éléments sont à la fois vecteurs propres de  $\hat{A}$  et de  $\hat{B}$ . Les différents vecteurs de la base seront désignés par la valeur propre de  $\hat{A}$  et la valeur propre de  $\hat{B}$ . Si la base n'est toujours pas unique, on peut chercher un troisième opérateur  $\hat{C}$  qui commute avec  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ , et ainsi de suite, jusqu'à avoir, selon la formule consacrée, épuisé la dégénérescence. On définit alors un **Ensemble Complet d'Opérateurs qui Commutent** (*E.C.O.C.*) comme une collection d'opérateurs hermitiens, tels que si l'on spécifie la valeur propre de chaque opérateur, on obtient un vecteur propre commun et unique. Cet exercice se fixe pour but d'étudier cette notion d'un peu plus près, au moyen de deux cas simples à traiter!

4. On considère un système physique dont l'espace des états (à 3 dimensions) est rapporté à la base orthonormée formée par  $\{|u_i\rangle\}_{i=1}^3$ . Dans cette base, les opérateurs  $\hat{H}$  et  $\hat{B}$  sont représentés par les matrices

$$H = \hbar\omega_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} ; \quad B = b \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \omega_0, b \in \mathbb{R}_0. \quad (4.0.6)$$

- (a)  $\hat{H}$  et  $\hat{B}$  sont-ils hermitiens?
  - (b) Montrez que  $\hat{H}$  et  $\hat{B}$  commutent. Donnez une base de vecteurs propres communs à  $\hat{H}$  et  $\hat{B}$ .
  - (c) Parmi les ensembles d'opérateurs  $\{\hat{H}\}$ ,  $\{\hat{B}\}$ ,  $\{\hat{H}, \hat{B}\}$ ,  $\{\hat{H}^2, \hat{B}\}$ , lesquels forment un *E.C.O.C.*?
5. On considère à nouveau un système physique dont l'espace des états (à 3 dimensions) est rapporté à la base orthonormée formée par  $\{|u_i\rangle\}_{i=1}^3$ . On définit  $\hat{L}_z$  et  $\hat{S}$  par leur action sur ces vecteurs de base :

$$\begin{aligned} \hat{L}_z |u_1\rangle &= |u_1\rangle, & \hat{L}_z |u_2\rangle &= 0, & \hat{L}_z |u_3\rangle &= -|u_3\rangle; \\ \hat{S} |u_1\rangle &= |u_3\rangle, & \hat{S} |u_2\rangle &= |u_2\rangle, & \hat{S} |u_3\rangle &= |u_1\rangle. \end{aligned} \quad (4.0.7)$$

- (a) Écrivez les matrices représentant, dans la base  $\{|u_i\rangle\}_{i=1}^3$ , les opérateurs  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{L}_z^2$ ,  $\hat{S}$  et  $\hat{S}^2$ . Ces opérateurs peuvent-ils être considérés comme des observables physiques?
- (b) Donnez la forme de la matrice la plus générale représentant un opérateur qui commute avec  $\hat{L}_z$ . Même question pour  $\hat{L}_z^2$ , et  $\hat{S}^2$ .
- (c)  $\hat{L}_z^2$  et  $\hat{S}$  forment-ils un *E.C.O.C.*? Dans l'affirmative, donnez une base de vecteurs propres communs.

## Exercices complémentaires

### Exercice S1 *Mesure et évolution.*

[Juin 2007.]

Considérons un espace de Hilbert de dimension 2 dont une base orthonormée est  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Considérons l'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[ |1\rangle + \sqrt{2}|2\rangle \right]. \quad (4.0.8)$$

- Supposons que l'on mesure  $|\psi\rangle$  dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Qu'entend-t-on par "mesurer dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ " ? Quelles sont les probabilités de trouver les résultats 1 et 2 ?
- Même question si l'on mesure  $|\psi\rangle$  dans la base  $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle \pm |2\rangle]$  ? Commentaires ?
- Considérons l'opérateur hamiltonien  $\hat{H}$  dont la représentation dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  est  $H = 3E |1\rangle\langle 1| + E |2\rangle\langle 2|$ . Interprétez physiquement la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Si l'on prépare le système dans l'état  $|\psi\rangle$  au temps initial  $t = t_0$ , écrire l'état du système au temps  $t > t_0$ .

### Exercice S2 *Représentation P.*

- On note  $|\vec{p}\rangle$  le vecteur propre de  $\hat{P}$  de valeur propre  $\vec{p}$ . Déterminez les fonctions d'onde propres de l'opérateur  $\hat{P}$ . Sont-elles normalisables ? Pourquoi ?
- Calculez  $\bar{\psi}(t, \vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$  en fonction de  $\psi(t, \vec{x})$  définie à l'exercice précédent. Justifiez qu'en représentation  $P$  le rôle de  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$  sont échangés. Déduisez-en la forme de  $\hat{X}$ .
- Démontrez que  $\bar{\psi}(t, \vec{p})$  est normée si  $\psi(t, \vec{x})$  l'est (*égalité de Parseval*).
- Montrez que l'équation d'évolution de la fonction  $\bar{\psi}(t, \vec{p})$  en présence d'un potentiel indépendant du temps est

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(t, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} \bar{\psi}(t, \vec{p}) + \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \bar{V}(\vec{p} - \vec{q}) \bar{\psi}(\vec{q}, t) \quad (4.0.9)$$

où  $\bar{V}(\vec{p})$  désigne la transformée de Fourier du potentiel  $V(\vec{x})$  et  $p^2 = \vec{p} \cdot \vec{p}$ .

- Considérons à présent un mouvement unidimensionnelle dans le potentiel  $V(z) = -mgz$ , où  $m$  a les dimensions d'une masse,  $z$  est l'altitude, et  $g$  est l'accélération gravifique locale.
  - Exprimez le théorème d'Ehrenfest pour les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion du mobile ponctuel. Comparez au mouvement classique.
  - Montrez que l'incertitude sur l'impulsion ne varie pas au cours du temps.
  - Écrivez la version uni-dimensionnelle de (4.0.9) pour ce potentiel linéaire. Déduisez-en une relation entre  $\frac{\partial}{\partial t} |\bar{\psi}(t, p)|^2$  et  $\frac{\partial}{\partial p} |\bar{\psi}(t, p)|^2$ .
  - Intégrez l'équation obtenue et donnez à votre résultat une interprétation physique.

### Exercice S3 *Petits problèmes à une dimension.*

- Considérons l'espace de Hilbert des fonctions  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  déclinantes à l'infini, muni du produit scalaire  $\langle f | g \rangle = \int dx f(x)^* g(x)$ .
  - Étudiez l'hermiticité des opérateurs  $\hat{X}$  et  $\hat{D} = \frac{d}{dx}$  et calculez  $[\hat{D}, \hat{X}]$ .
  - Montrez que l'opérateur  $\hat{A} = i(\hat{X}^2 + a^2 \hat{D})\hat{D} + i\hat{X}$  est hermitien pour tout  $a \in \mathbb{R}$ .
  - Trouvez l'état  $\psi_0(x)$  du système tel que  $\hat{A}\psi_0(x) = 0$ . Quelle est la valeur moyenne de l'impulsion dans cette configuration ?
  - Calculez la probabilité de trouver le mobile ponctuel décrit par  $\psi_0(x)$  dans la région  $-a \leq x \leq a$ .

- (e) Un état excité du système est décrit par  $\psi(x) = e^{ip_0x/\hbar}\psi_0(x)$ , où  $p_0 \in \mathbb{R}_0^+$ . Calculez à nouveau la probabilité de trouver le mobile dans l'intervalle  $-a \leq x \leq a$ .
  - (f) Donnez la valeur moyenne de l'impulsion de ce mobile dans l'état  $\psi(x)$ .
2. Soient  $\{\psi_n(x)\}$ , les états stationnaires d'un système quantique correspondant aux niveaux d'énergie  $E_n$  ( $n \in \mathbb{N}_0$ ). Au temps  $t = 0$ , une mesure de l'énergie donne  $E_1$  avec une probabilité de  $1/2$ ,  $E_2$  avec une probabilité de  $3/8$  et  $E_3$  avec une probabilité de  $1/8$ .
- (a) Écrivez la formule la plus générale pour la fonction d'onde initiale  $\psi(0, x)$ .
  - (b) Que devient cette fonction d'onde après un temps  $t$ ,  $\psi(t, x)$ ?
  - (c) Montrez que la valeur moyenne de l'énergie dans cet état ne varie pas au cours du temps, et justifiez-le.
  - (d) Calculez la densité de probabilité  $\rho(t, x)$  ainsi que le courant de probabilité  $J(t, x)$ . Vérifiez que la particule est conservée.
3. Soit une particule se déplaçant à une dimension aux dépens d'un potentiel  $V(x)$  homogène de degré  $n \in \mathbb{N}_0$  en  $x$ .
- (a) Calculez la valeur moyenne du commutateur  $[\hat{H}, \hat{X}\hat{P}]$  dans un état stationnaire.
  - (b) Montrez que les valeurs moyennes  $\langle T|T \rangle$  et  $\langle V|V \rangle$  des énergies cinétique et potentielle, évaluées pour un état stationnaire également, satisfont l'égalité  $2\langle T|T \rangle = n\langle V|V \rangle$  (*Théorème du Viriel*). Vérifiez que ce résultat s'étend directement à 3 dimensions.

# Séance 5 | Systèmes à deux dimensions

## Exercice 1 Matrices de Pauli.

Les matrices de Pauli sont définies comme l'ensemble de matrices  $\mathbb{C}^{2 \times 2}$  :

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.0.1)$$

Elles s'emploient pour représenter les 3 composantes spatiales de l'opérateur spin (1/2) de l'électron, traité de manière non-relativiste.

1. Prouvez que les matrices de Pauli vérifient  $[\sigma_a, \sigma_b] = 2i \sum_c \varepsilon_{abc} \sigma_c$  et  $\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab} I$ , où  $I$  est la matrice identité et  $\varepsilon_{abc}$  est le tenseur complètement antisymétrique de Levi-Civita.

$$\varepsilon_{abc} = \begin{cases} +1 & \text{si } (a, b, c) \text{ est une permutation paire de } (1, 2, 3), \\ -1 & \text{si } (a, b, c) \text{ est une permutation impaire de } (1, 2, 3), \\ 0 & \text{si deux indices sont égaux.} \end{cases} \quad (5.0.2)$$

2. On peut considérer les matrices de Pauli comme les composantes spatiales d'un vecteur  $\vec{\sigma} = \sum_a \sigma_a \vec{e}_a$  où les  $\vec{e}_a$  sont les vecteurs de la base canonique de  $\mathbb{R}^3$ . Prouvez que

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = (\vec{A} \cdot \vec{B})I + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (5.0.3)$$

où  $\vec{A}, \vec{B}$  sont deux vecteurs de  $\mathbb{R}^3$ .

3. Si  $\vec{n}$  est un vecteur unitaire de  $\mathbb{R}^3$  et  $\alpha \in \mathbb{R}$ , démontrez que

$$e^{-\frac{i}{2}\alpha \vec{n} \cdot \vec{\sigma}} = \cos \frac{\alpha}{2} I - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (5.0.4)$$

Quelles sont les propriétés de cet objet ?

4. Montrez que toute matrice hermitienne  $2 \times 2$  peut s'écrire  $M = a_0 I + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$ . Montrez que  $a_0, a_x, a_y, a_z$  sont réels. Comment peut-on les calculer à partir de  $M$  ? Donnez les valeurs propres et vecteurs propres de  $M$  en fonction de  $a_0$  et  $\vec{a}$ .

**Exercice 2** *Spin dans une direction quelconque.*

Soit un électron dont l'état de spin est polarisé dans une direction repérée par la colatitude  $\theta$  et l'azimut  $\phi$ . On obtient de tels états en effectuant une rotation arbitraire de l'appareil de Stern-Gerlach (voir cours théorique). On choisira comme base de l'espace de Hilbert  $\mathcal{S}$  associé au spin de cet électron les états  $|\uparrow\rangle$  et  $|\downarrow\rangle$  représentant les états propres de l'opérateur  $\hat{S}_z = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_z$ , respectivement associés aux valeurs propres  $+\hbar/2$  et  $-\hbar/2$ .

1. Exprimez le vecteur unitaire  $\vec{n}$  en fonction des angles  $(\theta, \phi)$ .
2. Déterminez l'opérateur  $\hat{S}_{\vec{n}} = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{n}$  représentant le spin polarisé selon  $\vec{n}$  dans l'espace  $\mathcal{S}$ . Calculez-en les valeurs propres et vecteurs propres. Nous noterons ces derniers  $|\uparrow_{\vec{n}}\rangle$  et  $|\downarrow_{\vec{n}}\rangle$ .
3. Calculez  $\langle \hat{\vec{S}} | \hat{\vec{S}} \rangle$  dans l'état  $|\uparrow_{\vec{n}}\rangle$ . Qu'observez-vous? Tirez-en une technique géométrique pour visualiser l'état de spin d'un système à spin 1/2 (*sphère de Bloch*).
4. Calculez l'opérateur  $\hat{\mathcal{D}}(\theta, \phi)$  qui effectue le changement de base  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \rightarrow \{|\uparrow_{\vec{n}}\rangle, |\downarrow_{\vec{n}}\rangle\}$ . Montrez qu'elle est unitaire et justifiez cet état de fait.
5. Expliquez l'action de  $\hat{\mathcal{D}}(\theta, \phi)$  au niveau géométrique. Déduisez-en qu'il existe un vecteur unitaire  $\vec{p}$  (que vous calculerez) tel que

$$\hat{\mathcal{D}}(\theta, \phi) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \vec{p} \cdot \hat{\vec{S}}}. \quad (5.0.5)$$

Quel est le rôle joué par les opérateurs  $\hat{S}_a$ ? L'état d'un système décrivant une particule de spin 1/2 est-il invariant sous rotation complète d'angle  $2\pi$ ? Commentaires?

6. L'électron est préparé dans l'état  $|\uparrow_{\vec{n}}\rangle$ . On le soumet à un champ magnétique statique dirigé selon  $\vec{e}_z$ , de sorte que la restriction de l'opérateur hamiltonien à  $\mathcal{S}$  s'écrive  $\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_z$ . Décrivez l'état  $|\psi(t)\rangle$  après un temps  $t > 0$ .
7. Décrivez l'évolution des valeurs moyennes  $\langle \hat{S}_a | \hat{S}_a \rangle(t)$  et comparez au mouvement classique (*précession de Larmor*). Montrez en particulier que  $\hat{S}_z$  est une constante du mouvement.



**Exercice 3** *Particule à spin dans un champ magnétique.*

On considère une particule de spin  $1/2$ , de rapport gyromagnétique  $\gamma$ . L'espace des états de spin est muni de la base orthonormée  $\mathcal{B} = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  qui sont les états propres de l'opérateur  $\hat{S}_z = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_z$ , respectivement associés aux valeurs propres  $+\hbar/2$  et  $-\hbar/2$ .

**Champ stationnaire**

- À l'instant  $t = 0$ , on prépare le système dans l'état  $|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle$ . Si l'on mesure immédiatement l'observable  $\hat{S}_x$ , quels résultats peut-on trouver, et avec quelles probabilités ?
- On prépare à nouveau le système dans l'état  $|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle$  à l'instant initial  $t = 0$ . On le laisse ensuite évoluer librement sous l'action d'un champ magnétique uniforme  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_y$ . Déterminez l'état de spin du système  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t > 0$ , ramené à la base  $\mathcal{B}$ .
- En cet instant  $t$ , on mesure les observables  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ .
  - Peut-on les mesurer simultanément ?
  - Pour chacune d'entre elles, quelles valeurs peut-on trouver ? Avec quelles probabilités ?
  - Quelle relation doit-il y avoir entre  $B_0$  et  $t$  pour que l'une des mesures donne un résultat certain *a priori* ? Interprétez physiquement votre résultat.

**Champ dépendant du temps**

- À l'instant  $t = 0$ , on prend une mesure de  $\hat{S}_y$  et on trouve  $+\hbar/2$ . Donnez le vecteur d'état  $|\psi_0\rangle$  immédiatement après la mesure ?
- Immédiatement après cette mesure, on applique un champ uniforme parallèle à  $\vec{e}_z$ , dont l'amplitude varie dans le temps. L'hamiltonien associé à l'évolution de l'état de spin de la particule peut donc s'écrire  $\hat{H}(t) = \omega(t)\hat{S}_z$ . On suppose que

$$\omega(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0, \\ \omega_0 \frac{t}{T} & \text{si } 0 \leq t \leq T, \\ 0 & \text{si } t > T, \end{cases} \quad (5.0.6)$$

où  $\omega_0, T \in \mathbb{R}_0^+$ . Calculez le vecteur d'état à l'instant  $t > 0$ .

- Après l'extinction du champ magnétique ( $t > T$ ), on mesure  $\hat{S}_y$ .
  - Quels résultats peut-on trouver, et avec quelles probabilités ?
  - Déterminez la relation qui doit unir  $\omega_0$  et  $T$  pour que l'on soit certain du résultat de la mesure. Interprétez physiquement votre résultat.

**Exercice 4** *La résonance magnétique nucléaire.*

Nous allons considérer, dans cet exercice, l'évolution d'un spin  $1/2$  dans un système de champs magnétiques potentiellement variables dans le temps, et montrerons qu'il est possible d'en extraire une technique d'analyse de la matière sous certaines conditions de résonance.

- Nous commençons par l'analogue classique d'une particule de moment cinétique  $\vec{J}$  et de rapport gyromagnétique  $\gamma$ . Supposons-la plongée dans un champ magnétique statique  $\vec{B}_0$ .
  - Montrez que le moment magnétique est en rotation à une vitesse angulaire  $\omega_0$  constante (que l'on déterminera) autour de  $\vec{B}_0$  (*précession de Larmor*).
  - Allumons à présent un champ magnétique  $\vec{B}_1(t)$  tournant sans modifier son intensité dans le plan orthogonal à  $\vec{B}_0$  à vitesse angulaire constante  $\omega$ .
  - Décrivez un système d'axes  $\mathcal{R} = (\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$  particulièrement adapté à l'étude du problème.
  - Définissez un référentiel  $\mathcal{R}'$  où  $\vec{B}_0$  et  $\vec{B}_1(t)$  sont des vecteurs constants, et dérivez l'évolution du moment magnétique de la particule dans ce référentiel, que l'on nommera *référentiel tournant*.
  - Étudiez le comportement du moment magnétique lorsque les valeurs  $\omega$  et  $\omega_0$  sont très différentes, ou lorsqu'elles sont très proches l'une de l'autre. Quel phénomène peut-on observer lorsque  $\omega = \omega_0$  ?

2. Passons à présent au traitement quantique de la situation. Considérons une particule de spin  $1/2$  soumise à l'action des deux champs précédemment décrits. On désigne par  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  les états propres de la composante verticale du spin associés aux valeurs propres respectives  $+\hbar/2$  et  $-\hbar/2$ . Au temps  $t = 0$ , le spin est dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ .
- (a) Formez l'équation de Schrödinger dans le référentiel  $\mathcal{R}$ .
  - (b) Effectuez une rotation adéquate dans l'espace des spins pour vous placer dans le référentiel tournant  $\mathcal{R}'$ . Écrivez à nouveau l'équation de Schrödinger. Quel bénéfice retirez-vous du changement de référentiel ?
  - (c) Déterminez l'état du spin dans le référentiel  $\mathcal{R}$  pour toute valeur de  $t \geq 0$ .
  - (d) Si  $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ , calculez la probabilité d'observer un renversement du spin. Étudiez à nouveau le comportement du système en fonction de la différence  $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ .
  - (e) À quelles conditions est-on certain que le spin s'est renversé ? Expliquez alors comment peut-on analyser un échantillon de matière en utilisant cette méthode de renversement des spins des noyaux atomiques !
  - (f) Montrez que l'évolution de la valeur moyenne du moment magnétique de la particule à spin reproduit bien l'évolution classique. Vous comprenez alors pourquoi les résultats obtenus dans les deux analyses sont similaires !

# Séance 6 | L'oscillateur harmonique en mécanique quantique

## Exercice 1 *Thème et variations sur l'oscillateur harmonique quantique.*

Ce premier exercice permet d'aider l'étudiant à s'appropriier les différents outils algébriques mis à contribution pour l'étude de l'oscillateur harmonique en mécanique quantique, par le biais de quelques calculs simples et directs.

- Soit un oscillateur harmonique uni-dimensionnel de masse  $m$  et de pulsation propre  $\omega$ . À l'instant initial  $t = 0$ , l'état de cet oscillateur est donné par  $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$  où  $|n\rangle$  représente l'état propre à  $n$  excitations.
  - Quelle est la probabilité  $\mathcal{P}(t)$  pour qu'une mesure de l'énergie de l'oscillateur effectuée à un temps  $t > 0$  quelconque, donne un résultat supérieur à  $2\hbar\omega$ . Lorsque  $\mathcal{P}(t)$  est identiquement nulle pour tout  $t > 0$ , donnez les seuls coefficients  $c_n$  qui sont non-nuls.
  - Supposons à partir de maintenant que seuls  $c_0$  et  $c_1$  sont non-zéro. Déterminez ces coefficients si  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle = \hbar\omega$  et  $\langle \hat{X} | \hat{X} \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  dans l'état initial.  
*Indication :* sans perte de généralité, on peut considérer que  $c_0 \in \mathbb{R}^+$ . Pourquoi?
  - Faites maintenant évoluer  $|\psi(0)\rangle$  et écrivez  $|\psi(t)\rangle$  pour  $t > 0$  quelconque. Calculez  $\langle \hat{X} | \hat{X} \rangle(t)$ ,  $\langle \hat{P} | \hat{P} \rangle(t)$  et  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle(t)$  à tout instant.
- Sans écrire aucune équation, déterminez les niveaux d'énergie d'une particule soumise à l'action du potentiel  $V(x)$  tel que  $V(x) = \infty$  pour tout  $x \leq 0$  et  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  pour tout  $x > 0$ .
- Calculez les probabilités de trouver une particule dans la région classiquement interdite d'un oscillateur harmonique pour les états  $n = 0, 1, 2, 3, 4$ . Ces résultats sont-ils compatibles avec leur homologue classique?
- Calculez les éléments de matrice  $\langle m | \hat{X}^2 | n \rangle$  et  $\langle m | \hat{P}^2 | n \rangle$  dans la représentation de Fock. Déduisez-en l'énergie moyenne dans l'état  $|n\rangle$  pour une particule dans l'hamiltonien s'écrit  $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 - \lambda \hat{X}^4$ .
- Déterminez les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique isotrope à 3 dimensions de pulsation propre  $\omega$ . Les niveaux décrits sont-ils dégénérés? Si oui, donnez leur degré de dégénérescence?

## Exercice 2 *Oscillateur harmonique en représentation $X$ .*

Considérons une particule de masse  $m$  confinée dans un puits uni-dimensionnel défini par le potentiel harmonique  $V(\tilde{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2 \tilde{x}$ , où  $\tilde{x}$  décrit la position de la particule. On note  $\Psi(t, \tilde{x}) = \tilde{\varphi}(\tilde{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$  la fonction d'onde de la particule dans un état stationnaire d'énergie  $E$ .

- Définissez la coordonnée sans dimensions  $x$  afin que le profil spatial  $\varphi(x)$  soit solution de l'équation différentielle  $(\hat{D}^2 - x^2)\varphi(x) + 2\varepsilon\varphi(x) = 0$  où  $\hat{D} \equiv \frac{d}{dx}$  et  $\varepsilon$  est une fonction de  $E$  que vous préciserez. Établissez la relation entre  $\varphi(x)$  et  $\tilde{\varphi}(\tilde{x})$  et montrez que  $\varphi$  est normée si  $\tilde{\varphi}$  l'est.
- Montrez que le comportement asymptotique d'une solution de cette équation différentielle pour  $x \gg 1$  est  $\varphi(x) \sim e^{-x^2/2}$ . Nous poserons donc  $\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} H(x) e^{-x^2/2}$  où  $H(x)$  est un polynôme en  $x$  et  $N$  une constante de normalisation.

3. Démontrez que  $H(x)$  ainsi défini est un vecteur propre de l'opérateur  $\hat{A} = \hat{D}^2 - 2x\hat{D}$ .

Il nous reste donc à étudier la structure propre  $\hat{A}$ . Ce dernier agit sur l'espace de Hilbert  $\mathcal{P}(\mathbb{R})$  des polynômes d'une variable réelle, que l'on peut équiper du produit scalaire générique

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{P}(\mathbb{R}) \times \mathcal{P}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R} : (f, g) \mapsto \langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx w(x) f(x) g(x), \quad (6.0.1)$$

où  $w(x)$  est une fonction strictement positive de masse unité, appelée *poids* du produit scalaire.

4. Démontrez que  $\hat{A}$  est auto-adjoint pour le produit scalaire (6.0.1), pour un poids  $w(x)$  adéquat que vous déterminerez.
5. Soient  $\hat{P}$  et  $\hat{Q}$  deux opérateurs agissant dans  $\mathcal{P}(\mathbb{R})$  tels que  $[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{I}$ , et la suite de polynômes  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$  telle que  $\hat{P}f_0(x) = 0$ ,  $f_n(x) = \hat{Q}f_{n-1}(x)$  pour tout  $n > 0$ . Démontrez que  $f_n(x)$  est vecteur propre de  $\hat{Q}\hat{P}$ , associé à la valeur propre  $n$ .
6. Utilisez ce théorème pour vérifier que les vecteurs propres de  $\hat{A}$  peuvent s'écrire  $H_n(x) = (-1)^n \frac{1}{F} \frac{d^n}{dx^n} F$  pour une certaine fonction lisse  $F(x)$  (*polynômes d'Hermite*).
7. Calculez  $H_0(x)$  et  $H_1(x)$ . Montrez qu'il est suffisant de connaître ces deux polynômes pour connaître tous les  $H_n(x)$ ,  $\forall n \geq 1$ .
8. Démontrez que tout polynôme d'Hermite  $H_n(x)$  peut s'écrire comme un polynôme de degré  $n$ , de même parité que  $n$ . Commentaires?
9. Donnez l'expression des fonctions propres de la particule quantique, et justifiez qu'elles sont bien orthonormées.

**Exercice 3** *États cohérents.*

On considère un oscillateur harmonique quantique de fréquence propre  $\omega$ , évoluant dans la direction  $\vec{Ox}$ . Les opérateurs d'échelle sont notés conventionnellement  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$ . On définit un *état cohérent* comme un état propre de l'opérateur d'annihilation

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle. \quad (6.0.2)$$

Vu que  $\hat{a}$  n'est pas hermitien,  $\alpha$  est généralement un nombre complexe. À la différence des états propres de l'opérateur de comptage  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  qui décrivent un nombre fixé d'excitations, les états  $|\alpha\rangle$  sont peuplés par un nombre indéterminé d'excitations, mais possèdent une phase fixée. Notons enfin que l'état fondamental  $|0\rangle$  de l'oscillateur (tel que  $\hat{a}|0\rangle = 0$ ) est un état cohérent particulier.

**1. Opérateur déplacement.**

Définissons l'opérateur  $\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \bar{\alpha} \hat{a}}$  pour tout  $\alpha \in \mathbb{C}$ .

- (a) Prouvez que  $\hat{D}(\alpha)$  est unitaire et qu'il peut se réécrire  $\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\bar{\alpha} \hat{a}}$ .
- (b) Démontrez les identités suivantes :
  - i.  $\hat{D}^\dagger(\alpha) \hat{a} \hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \hat{I}$ ;
  - ii.  $\hat{D}^\dagger(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \bar{\alpha} \hat{I}$ ;
  - iii.  $\hat{D}(\alpha + \beta) = \hat{D}(\alpha) \hat{D}(\beta) e^{-i \operatorname{Im}\{\alpha \bar{\beta}\}}$ .
- (c) Montrez que l'état cohérent  $|\alpha\rangle$  peut être généré à partir de l'état fondamental  $|0\rangle$  par l'opérateur unitaire  $\hat{D}(\alpha)$ .

**2. Développement sur l'espace de Fock.**

- (a) Montrez que

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (6.0.3)$$

où  $|n\rangle$  est la  $n$ -ième vecteur de la base de Fock.

- (b) Calculez la probabilité  $P(n)$  de mesurer  $n$  excitations dans l'état  $|\alpha\rangle$ . Quelle loi de probabilité découvrez-vous ?
- (c) Trouvez les valeurs moyennes  $\langle \hat{X} | \hat{X} \rangle_\alpha$ ,  $\langle \hat{P} | \hat{P} \rangle_\alpha$ ,  $\langle \hat{H} | \hat{H} \rangle_\alpha$  des observables position, impulsion et énergie dans l'état  $|\alpha\rangle$ , ainsi que les incertitudes  $\Delta X_\alpha$ ,  $\Delta P_\alpha$ ,  $\Delta H_\alpha$ . Que se passe-t-il lorsque  $|\alpha| \gg 1$  ?

**3. Base d'états cohérents.**

- (a) Calculez  $|\langle \beta | \alpha \rangle|^2$  pour  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  quelconques. Commentaires ?  
 (b) Démontrez que les états cohérents forment une relation de fermeture

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{I}. \quad (6.0.4)$$

*Indications :* passez en coordonnées polaires dans le plan complexe, et utilisez  $\int_0^\infty ds e^{-s} s^n = \Gamma(n+1) = n!$

**4. Évolution des états cohérents.**

- (a) Étudiez l'évolution d'un état cohérent. Montrez en particulier qu'il reste constamment vecteur propre de  $\hat{a}$ , ce qui justifie l'appellation pour  $|\alpha\rangle$ .  
 (b) Déduisez-en l'évolution temporelle de la position moyenne du paquet d'onde correspondant. Commentaires ?  
 (c) Montrez que la fonction d'onde (en représentation de position) associée à un état cohérent  $|\alpha\rangle$  est donnée (à un choix de phase près) par

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} x \langle \hat{P} | \hat{P} \rangle_\alpha} \psi_0(x - \langle \hat{X} | \hat{X} \rangle_\alpha). \quad (6.0.5)$$

où  $\psi_0(x)$  est la fonction d'onde associée à l'état fondamental  $|0\rangle$  de l'oscillateur.

- (d) En tenant compte des points précédents, devinez comment évolue la fonction d'onde fraîchement dérivée lorsque le temps s'écoule ? Calculez la densité de probabilité de présence de la particule en cet instant. Interprétez physiquement votre résultat, et justifiez en particulier l'appellation "états quasi-classiques" pour les états cohérents de l'oscillateur harmonique.

**Exercice 4** *Parité des états.*

[Juin 2019.]

On prépare un oscillateur harmonique quantique unidimensionnel au temps  $t = 0$  dans l'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{5}} |1\rangle - \frac{1}{\sqrt{5}} |2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{5}} |4\rangle, \quad (6.0.6)$$

où les  $|n\rangle$  sont les vecteurs de la base de Fock. Considérons l'opérateur

$$\hat{\Pi} = \sum_{m=0}^{\infty} |2m\rangle \langle 2m|. \quad (6.0.7)$$

- Montrez que  $\hat{\Pi}$  est un projecteur orthogonal. Sur quel sous-espace  $E$  de l'espace de Fock l'opérateur  $\hat{\Pi}$  projette-t-il ? Commentaires ?
- Si l'on mesure l'opérateur  $\hat{\Pi}$  sur l'état  $|\psi\rangle$ , quels résultats pourrait-on obtenir, et avec quelles probabilités ?
- Si la mesure de  $\hat{\Pi}$  sur l'état  $|\psi\rangle$  donne le résultat 1, quel est l'état (normalisé) de l'oscillateur après la mesure ?
- Que devient cet état après un temps  $t > 0$  ?

**Exercice 5** *Oscillateur harmonique quantique forcé.*

Considérons une particule de masse  $m$  et de charge  $q$ , se déplaçant dans la direction  $\vec{O}x$  sous l'action d'un potentiel harmonique  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Elle ressent également la présence d'un champ électrique variable  $E(t)$  orienté dans la direction  $\vec{O}x$ .

- Écrivez l'hamiltonien  $\hat{H}(t)$  de la particule en fonction des opérateurs d'échelle  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$ . Calculez les commutateurs de ces derniers avec  $\hat{H}(t)$ .

2. Définissons  $\alpha(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{a} | \psi(t) \rangle$  où  $|\psi(t)\rangle$  est le vecteur d'état de la particule étudiée. Déduisez des résultats précédemment établis que

$$\frac{d}{dt}\alpha(t) = -i\omega\alpha(t) + i\frac{q}{\sqrt{2m\hbar\omega}}E(t). \quad (6.0.8)$$

Résolvez cette équation différentielle pour  $\alpha(t)$ . En un instant  $t$  quelconque, quelles sont les valeurs moyennes de la position et de la quantité de mouvement de la particule ?

3. Définissons un autre état  $|\varphi(t)\rangle \equiv [\hat{a} - \alpha(t)\hat{I}]|\psi(t)\rangle$ . Montrez que l'évolution de  $|\varphi(t)\rangle$  est gouvernée par

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle = [\hat{H}(t) + \hbar\omega\hat{I}]|\varphi(t)\rangle. \quad (6.0.9)$$

Comment varie la norme de  $|\varphi(t)\rangle$  en fonction du temps ?

4. Supposons qu'à l'instant  $t = 0$ , l'oscillateur est dans son état fondamental  $|0\rangle$ . Le champ électrique est actif dans l'intervalle de temps  $t \in [0, T]$  où  $T \in \mathbb{R}_0^+$ . En tout instant ultérieur  $t > T$ , quelle est l'évolution des valeurs moyennes  $\langle \hat{X} | \hat{X} \rangle(t)$  et  $\langle \hat{P} | \hat{P} \rangle(t)$  ?
5. Supposons que le champ électrique est donné par  $E(t) = E_0 \cos(\omega't)\chi_{[0,T]}$ . Discutez en fonction de l'écart de pulsation  $\Delta\omega \equiv \omega' - \omega$  les phénomènes observés.
6. Dans ces hypothèses, si on mesure l'énergie en un instant  $t > T$ , quels résultats peut-on observer, et avec quelles probabilités ?

# Séance 7 | Produit tensoriel & intrication

## Exercice 1 Produits tensoriels d'espaces de Hilbert.

Soit  $\mathcal{B}_A = \{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$  une base orthonormée de l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_A$ , et  $\mathcal{B}_B = \{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$  une base orthonormée de l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_B$ . On se donne les états suivants, appartenant à  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  :

$$\begin{cases} |\alpha\rangle = |0\rangle_A |0\rangle_B, \\ |\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle_A |0\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_A |1\rangle_B, \\ |\gamma\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle_A + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_A \right) \left( \frac{\sqrt{3}}{2} |0\rangle_B - \frac{i}{2} |1\rangle_B \right), \\ |\delta\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle_A |0\rangle_B + \frac{1}{2} |0\rangle_A |1\rangle_B + \frac{1}{2} |1\rangle_A |0\rangle_B - \frac{1}{2} |1\rangle_A |1\rangle_B. \end{cases} \quad (7.0.1)$$

1. Vérifiez que ces états sont tous normés.
2. Calculez les produits scalaires entre tous ces états.  
*Note* : il n'y a que  $6 = 3!$  produits scalaires à calculer (par sesqui-linéarité) !
3. Parmi ces états, lesquels sont intriqués ? Justifiez votre réponse!  
*Indication* : utilisez la décomposition de Schmidt.

## Exercice 2 Produits tensoriels d'opérateurs (1).

Soit  $\hat{A} : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$  et  $\hat{B} : \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_B$  deux opérateurs linéaires agissant sur les espaces  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$ . On définit le produit tensoriel de ces opérateurs par

$$\begin{aligned} \hat{A} \otimes \hat{B} : \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B &\rightarrow \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \\ |\psi\rangle_A |\phi\rangle_B &\mapsto \left( \hat{A} |\psi\rangle_A \right) \left( \hat{B} |\phi\rangle_B \right), \end{aligned} \quad (7.0.2)$$

et l'on étend l'action de  $\hat{A} \otimes \hat{B}$  sur tout  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  par linéarité. Les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  peuvent être vus comme agissant dans  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  avec le prolongement trivial  $\hat{\mathbf{A}} \stackrel{\text{not}}{=} \hat{A} \otimes \hat{I}_B$  et  $\hat{\mathbf{B}} \stackrel{\text{not}}{=} \hat{I}_A \otimes \hat{B}$ . Dans la pratique, on pourra souvent omettre le changement de typographie lorsque les sous-espaces dans lesquels agissent les opérateurs ont été clairement définis au préalable !

1. Montrez que les opérateurs  $\hat{\mathbf{A}}$  et  $\hat{\mathbf{B}}$  commutent (*i.e.*  $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = 0$ ).
2. Supposons que  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  et  $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$  sont hermitiens, et dénotons leurs valeurs et vecteurs propres par  $\hat{A} |a_i\rangle_A = a_i |a_i\rangle_A$ ,  $\hat{B} |b_j\rangle_B = b_j |b_j\rangle_B$ . Déterminez la structure propre des opérateurs  $\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{B}}$  et  $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}$ .

## Exercice 3 Produits tensoriels d'opérateurs (2).

Nous reprenons les définitions, notations et conventions de l'Exercice 1. Nous nous donnons également les opérateurs  $\{(\hat{\sigma}_x)_A, (\hat{\sigma}_y)_A, (\hat{\sigma}_z)_A\}$  et  $\{(\hat{\sigma}_x)_B, (\hat{\sigma}_y)_B, (\hat{\sigma}_z)_B\}$ , respectivement représentés par les matrices de Pauli dans les bases orthonormales  $\mathcal{B}_A$  et  $\mathcal{B}_B$ . Nous définissons enfin les trois opérateurs

$$(\hat{\sigma}_x)_A \otimes \hat{I}_B, \quad (\hat{\sigma}_z)_A \otimes (\hat{\sigma}_x)_B, \quad (\hat{\sigma}_z)_A \otimes (\hat{\sigma}_z)_B + (\hat{\sigma}_x)_A \otimes (\hat{\sigma}_x)_B. \quad (7.0.3)$$



Calculez l'action de ces opérateurs sur les états  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, |\delta\rangle$ .

**Exercice 4** *Corrélations quantiques.*

Soient deux particules quantiques  $A$  et  $B$ , dont les états sont respectivement représentés par des vecteurs appartenant aux espaces de Hilbert  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$ . Nous travaillons dans les bases orthonormées  $\mathcal{B}_A = \{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$  et  $\mathcal{B}_B = \{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ .

Le système se trouve dans l'état  $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle_A|0\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_A|1\rangle_B$ . Supposons qu'on mesure la particule  $A$  dans une nouvelle base orthonormale de  $\mathcal{H}_A$  donnée par

$$\begin{cases} |0'\rangle_A = c|0\rangle_A + s|1\rangle_A \\ |1'\rangle_A = -\bar{s}|0\rangle_A + \bar{c}|1\rangle_A \end{cases} \quad (7.0.4)$$

avec  $c, s \in \mathbb{C}$  satisfaisant  $|c|^2 + |s|^2 = 1$ .

1. Quelles sont les probabilités de trouver les résultats  $0'$  et  $1'$  ?
2. Quel est l'état de la particule  $B$  conditionné au résultat de la mesure sur la particule  $A$  ?  
*Indication* : exprimez l'état  $|\Phi^+\rangle$  dans les bases  $\{|0'\rangle_A, |1'\rangle_A\}$  et  $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ , et inspirez-vous de la démarche suivie lors de l'analyse de la téléportation quantique...

**Exercice 5** *État de Greenberger–Horne–Zeilinger.*

L'état quantique suivant appartient à l'espace des états de 3 systèmes à 2 dimensions :

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle_A|0\rangle_B|0\rangle_C + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_A|1\rangle_B|1\rangle_C. \quad (7.0.5)$$

Considérons les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z \otimes \hat{I} \otimes \hat{I}, \quad \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \otimes \hat{I}, \quad \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_y, \quad \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y, \quad \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (7.0.6)$$

L'état  $|GHZ\rangle$  est un vecteur propre de certains de ces opérateurs. Lesquels ? Quelle est la valeur propre correspondante ?

**Exercice 6** *Exercice récapitulatif.*

Soient deux espaces de Hilbert :  $\mathcal{H}_A$  dont une base orthonormée est constituée des vecteurs  $|1\rangle_A, |2\rangle_A, |3\rangle_A$ , et  $\mathcal{H}_B$  dont une base orthonormée est constituée des vecteurs  $|1\rangle_B, |2\rangle_B$ .

1. Écrivez une base de l'espace produit tensoriel  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ .
2. Soient les états

$$|\psi\rangle_A = \frac{1}{2}|1\rangle_A + \frac{1}{2}|2\rangle_A + \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle_A, \quad |\varphi\rangle_B = \frac{1}{3}|1\rangle_B + \frac{2\sqrt{2}}{3}|2\rangle_B. \quad (7.0.7)$$

Développez l'état  $|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$  dans la base obtenue au point précédent.

3. Soit l'opérateur unitaire agissant sur l'espace  $\mathcal{H}_A$

$$\hat{U}_A = |1\rangle_A \langle 1|_A - |2\rangle_A \langle 2|_A + i|3\rangle_A \langle 3|_A. \quad (7.0.8)$$

Calculez l'action de l'opérateur  $\hat{U}_A$  sur les états suivants

$$|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_A |1\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle_A |2\rangle_B, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_A |2\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle_A |1\rangle_B. \quad (7.0.9)$$

et calculez les normes des états résultants. Commentaires ?

4. Soit l'opérateur Hamiltonien suivant :

$$\hat{H} = E \left( |1\rangle_A \langle 2|_A \otimes |2\rangle_B \langle 1|_B + |2\rangle_A \langle 1|_A \otimes |1\rangle_B \langle 2|_B \right). \quad (7.0.10)$$

Déterminez la structure propre de  $\hat{H}$  en fonction de  $E \in \mathbb{R}_0$ . Si l'état à l'instant  $t = 0$  est un des états étudiés au point 3, quel est l'état du système à l'instant  $t > 0$  ?

5. Soit l'opérateur

$$\hat{S} = \left( |1\rangle_A \langle 2|_A + |2\rangle_A \langle 1|_A \right) \otimes \hat{I}_B. \quad (7.0.11)$$

- (a) Supposons que l'on mesure l'observable représentée par  $\hat{S}$ . Quels sont les résultats possibles de la mesure ? Quels sont les sous-espaces propres correspondants ?
- (b) Supposons que l'on mesure cette observable sur les états définis au point 3. Quels sont les résultats de la mesure, et quelles sont leurs probabilités ?

6. Mêmes questions pour l'opérateur défini par

$$\hat{T} = \left( |1\rangle_A \langle 2|_A + |2\rangle_A \langle 1|_A \right) \otimes \left( |1\rangle_B \langle 2|_B + |2\rangle_B \langle 1|_B \right). \quad (7.0.12)$$

*Note* : remarquez la structure particulière de  $\hat{T}$ , cela vous épargnera de nombreux calculs !

# Examen de juin 2019

# Examen de septembre 2019

# Examen de juin 2021

# Examen de septembre 2021

# Examen de juin 2022

# Examen de septembre 2022