
Mécanique Quantique

École Polytechnique - PHY 311 - PC 2015



Werner Heisenberg et Niels Bohr

Table des matières

I. Enoncés des petites classes et des devoirs à la maison	1
1. PC1 : Interférences et probabilités	3
1.1. Interférences, relation d'incertitude, ondes de matière	3
1.1.1. Nature ondulatoire des photons	3
1.1.2. Ondes de matière	4
1.2. Loi de désintégration exponentielle	5
1.3. Interférométrie et physique fondamentale	6
2. PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude	9
2.1. Propriétés générales de la transformation de Fourier	9
2.2. Transformation de Fourier et inégalités de Heisenberg	10
2.3. Évolution du paquet d'onde libre	10
2.4. Relations d'incertitude et physique fondamentale	11
3. PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel	13
3.1. L'effet tunnel dans la vie quotidienne	13
3.2. Conditions de raccordement à l'interface d'un potentiel discontinu.	14
3.3. Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.	15
3.4. Application à la marche de potentiel à une dimension.	17
3.5. Résonance de diffusion	17
4. PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés	19
4.1. Évolution temporelle	19
4.2. Invariance par parité	19
4.3. Etats isotropes de l'atome d'hydrogène	20
5. PC5 : L'oscillateur harmonique	23
5.1. Notations de Dirac et relations de commutation dans l'espace des états	23
5.2. L'oscillateur harmonique	24
6. PC6 : Expérience de Stern et Gerlach	27
6.1. Théorème d'Ehrenfest	27
6.2. Moment magnétique	27
6.2.1. Description classique : précession de Larmor	27
6.2.2. Description quantique	28

Table des matières

7. PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux	29
7.1. Oscillation de Rabi	29
8. PC8 : Cryptographie quantique	31
8.1. Motivation	31
8.2. États de spin $\frac{1}{2}$	31
8.3. État intriqué de deux spins	32
8.4. Contexte physique	34
8.5. Protocole de codage de messages confidentiels	34
8.6. Le théorème de non-clonage quantique	36
9. PC9 : Molécule de Benzène	37
9.1. Un modèle simple pour la molécule de benzène	37
9.2. La molécule de cyclooctatétraène	38
10. Devoir Maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude	41
10.1. Particule libre	41
10.2. Oscillateur harmonique	42
11. Premier devoir à la maison	43
1. Courant de probabilité	43
2. Marche de potentiel à une dimension.	44
3. Demi-tour devant un précipice	46
4. Étalement du paquet d'onde	46
12. Second devoir à la maison	49
1. Effet tunnel résonnant et contrôle de la transmission d'un électron à travers une barrière	49
2. États quasi-classique d'un oscillateur harmonique	50
II. Corrigés des petites classes et des devoirs	51
13. Corrigé PC1 : Interférences et probabilités	53
1. Interférences, relation d'incertitude, ondes de matière	53
1.1. Nature ondulatoire des photons	53
1.2. Ondes de matière	55
2. Loi de désintégration exponentielle	55
14. Corrigé PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude	57
1. Propriétés générales de la transformation de Fourier	57
2. Transformation de Fourier et inégalités de Heisenberg	58
3. Évolution du paquet d'onde libre	60
15. Corrigé PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel	63

2.	Conditions de raccordement à l'interface d'un potentiel discontinu.	63
3.	Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.	64
4.	Application à la marche de potentiel à une dimension.	66
5.	Résonance de diffusion	66
16. Corrigé PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés		67
1.	Évolution temporelle	67
2.	Invariance par parité	67
3.	États isotropes de l'atome d'hydrogène	68
17. Corrigé PC5 : L'oscillateur harmonique		71
1.	Notations de Dirac et relations de commutation dans l'espace des états	71
2.	L'oscillateur harmonique	72
18. Corrigé PC6 : Expérience de Stern et Gerlach		77
1.	Théorème d'Ehrenfest	77
2.	Moment cinétique	78
2.1.	Description classique : précession de Larmor	78
2.2.	Description quantique	78
19. Corrigé PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux		81
1.	Oscillation de Rabi	81
8. Corrigé PC8 : Cryptographie quantique		85
1.	États de spin $\frac{1}{2}$	85
2.	État intriqué de deux spins	86
9. Corrigé PC9 : Molécule de Benzène		89
1.	Un modèle simple pour la molécule de benzène	89
2.	La molécule de cyclooctatétrène	91
10. Corrigé devoir maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude		93
1.	Particule libre	93
2.	Oscillateur harmonique	95
11. Corrigé du premier devoir à la maison		99
1.	Courant de probabilité	99
2.	Marche de potentiel à une dimension.	101
3.	Demi-tour devant un précipice	103
4.	Étalement du paquet d'onde	104
12. Corrigé du second devoir à la maison		107
1.	Effet tunnel résonnant et contrôle de la transmission d'un électron à travers une barrière	107

Table des matières

2. États cohérents de l'oscillateur harmonique	108
III. Compléments : exercices non donnés, etc.	111
1. Compléments	113
1. Conséquences de la relation d'incertitude de Heisenberg	113
2. Le puits carré infini	113
3. Effet tunnel avec double puits	114
4. Application à une barrière infiniment haute et mince.	116
2. Relation d'incertitude et gravitation quantique	119
0.1. Contexte physique	120
1. Corrigé	121
3. Filtres à spins et Corrélations	123
1. Filtres	123
1.1. Corrélations	124
2. Corrigé	124
2.1. Filtres	125
2.2. Corrélations	125
4. États cohérents de l'oscillateur harmonique	127
1. Chaton de Schrödinger (“Schrödinger's kitten”)	128
2. corrigé États cohérents de l'oscillateur harmonique	129
3. corrigé Chaton de Schrödinger (« Schrödinger's kitten »)	130

Première partie .

Enoncés des petites classes et des devoirs à la maison

1. PC1 : Interférences et probabilités

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 15 avril 2015

1.1. Interférences, relation d'incertitude, ondes de matière

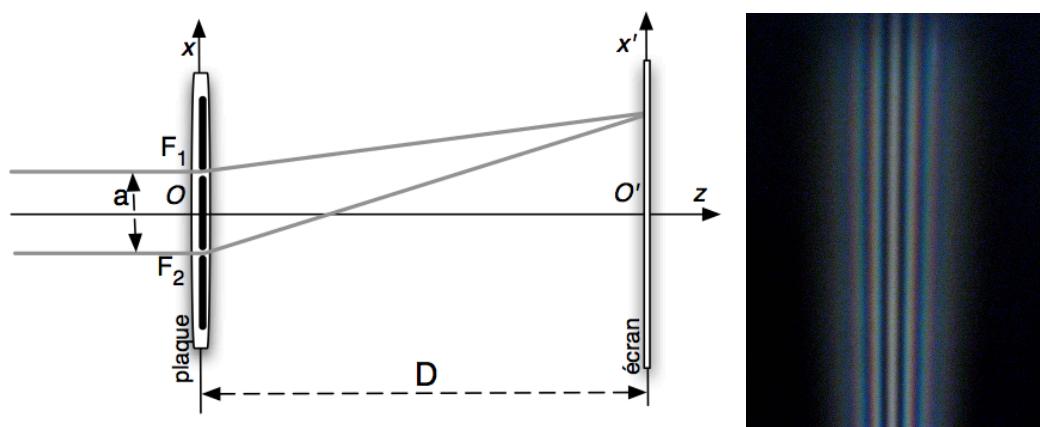


FIGURE 1. – À gauche : représentation d'un expérience de fentes d'Young. À droite : une photographie de l'intensité lumineuse sur l'écran montrant le phénomène d'interférences.

On réalise une expérience de fentes d'Young¹ en utilisant une onde incidente plane et monochromatique, de vecteur d'onde \vec{k} parallèle à un axe Oz et de longueur d'onde λ . La distance entre les deux fentes F_1 et F_2 (chacune parallèle à l'axe Oy) sera notée a , et la distance entre le plan des fentes et l'écran sera notée D (on notera $O'x'$ l'axe sur l'écran parallèle à Ox). Le repère (O, x, y, z) est orthogonal.²

1.1.1. Nature ondulatoire des photons

Dans un premier temps on s'intéresse à la nature ondulatoire des photons.

1. Thomas Young (1773-1829).

2. Richard Feynman a qualifié cette expérience de "phenomenon which is impossible ... to explain in any classical way, and which has in it the heart of quantum mechanics. In reality, it contains the only mystery of quantum mechanics." The Feynman Lectures on Physics, Volume III. Massachusetts, USA : Addison-Wesley

1. PC1 : Interférences et probabilités

- a) En faisant quelques approximations (que l'on justifiera) sur la diffraction par les deux fentes, montrer que le champ électrique sur l'écran peut s'écrire sous la forme

$$E = E_0 [\cos(\omega t - kL_1) + \cos(\omega t - kL_2)], \quad (1)$$

où L_1 et L_2 sont les distances des fentes F_1 et F_2 au point d'observation sur l'écran. En déduire la valeur de l'interfrange i en fonction de a , D et λ .

- b) Donner l'expression de l'intensité proportionnelle à la valeur moyenne temporelle $\langle E^2 \rangle_t$.

On considère maintenant l'aspect corpusculaire des photons. On va essayer de déterminer par quel chemin le photon est passé. L'écran est supposée mobile le long de l'axe Ox . On mesure la quantité de mouvement que chaque photon cède à l'écran lors de son passage par une des fentes.

- c) Quelle est la quantité de mouvement des photons incidents ?
- d) Calculer l'impulsion $p_x^{(1)}$ (respectivement $p_x^{(2)}$) transmise à la plaque si le photon détecté en x' est passé par la fente F_1 (respectivement F_2). Exprimer $|p_x^{(1)} - p_x^{(2)}|$ en fonction de a , D et λ .
- e) Quelle condition doit-on imposer à l'incertitude Δp_x sur l'impulsion de la plaque si l'on veut pouvoir séparer les deux possibilités précédentes ? En utilisant la relation de Heisenberg, $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, montrer que la position de la plaque P a une dispersion ou « incertitude » minimale Δx que l'on calculera et que l'on comparera à l'interfrange. Conclusion ?

1.1.2. Ondes de matière

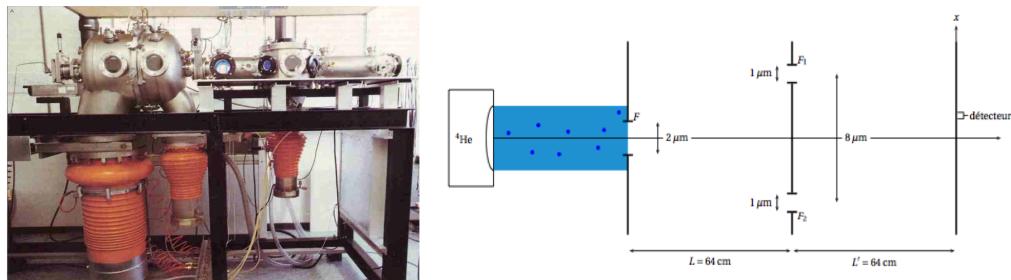


FIGURE 2. – À gauche : photographie du dispositif expérimental (La Recherche 247, oct. 1992). À droite : schéma de principe de l'expérience.

On s'intéresse maintenant aux ondes de matières. En 1991, O. Carnal et J. Mlynek ont réalisé une expérience de fentes d'Young réalisée avec des atomes d'hélium 4.³

3. O. Carnal et J. Mlynek, "Young's double-slit experiment with atoms : A simple atom interfe-

1.2. Loi de désintégration exponentielle

- f) Pour les ondes de matière, il faut remplacer la longueur d'onde optique λ par la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} . Les atomes du jet initial ont une vitesse de $v = 9.7 \cdot 10^2 \text{ m/s}$. Calculer la longueur d'onde λ_{dB} .
- g) Quel est l'interfrange mesurée dans cette expérience, sachant que $D = 64 \text{ cm}$ et $a = 8 \mu\text{m}$?

Valeurs numériques : Un atome d'hélium 4 a pour masse $m_{He^4} \simeq 4.1661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. La constante de Planck $h \simeq 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$.

1.2. Loi de désintégration exponentielle

La loi de désintégration exponentielle est très importante en physique, car elle repose sur l'hypothèse fondamentale que le processus responsable de la désintégration n'a « pas de mémoire ». La décroissance radioactive suit une loi exponentielle.

Une loi de probabilité sans mémoire se traduit mathématiquement par le fait que la probabilité conditionnelle $P(T > t_1 + t_2 | T > t_1)$ que la particule ne se soit pas désintégrée après une durée $t_1 + t_2$ sachant qu'elle ne s'est pas désintégrée après une durée t_1 , et égale à $P(T > t_2)$ la probabilité de ne pas s'être désintégrée après une durée t_2 . En termes mathématiques nous avons

$$P(T > t_1 + t_2 | T > t_1) = P(T > t_2), \quad \forall t_1, t_2 \geq 0. \quad (2)$$

Insistons sur la différence entre cette propriété d'absence de mémoire et l'indépendance des événements. La relation (2) est différente de

$$P(T > t_1 + t_2 | T > t_1) = P(T > t_2 + t_1), \quad \forall t_1, t_2 \geq 0. \quad (3)$$

Le but de l'exercice est de déterminer la probabilité pour qu'une particule non encore désintégrée à l'instant t_0 antérieur à t , se désintègre entre t et $t + dt$.

- a) Soit $F(t)$ la probabilité que la durée de vie soit supérieure à t . Montrer que l'absence de vieillissement implique que

$$F(t_1 + t_2) = F(t_1)F(t_2). \quad (4)$$

- b) Résoudre cette équation pour en déduire que $F(t)$ est une loi exponentielle.

On définit la densité de probabilité $f(t) := F'(t) / \int_{t_0}^{\infty} F(t)dt$.

- c) Calculer la valeur moyenne $T := \langle t - t_0 \rangle$ où $\langle \dots \rangle$ désigne la valeur moyenne. Calculer la dispersion (ou écart type) $(\Delta T)^2 := \langle (t - t_0 - T)^2 \rangle$. Quelle est l'interprétation physique ?

rometer”, Phys. Rev. Lett. **66**, 2689 (1991). Une autre expérience publiée simultanément est D.W. Keith et al., “An interferometer for atoms”, Phys. Rev. Lett. 66, 2693 (1991).

1. PC1 : Interférences et probabilités

Cette partie n'est pas traitée en PC

Nous considérons maintenant une autre méthode basée sur une équation différentielle. Cette méthode est celle présentée dans l'appendice A page 430 du livre de cours de J.-L. Basdevant et J. Dalibard.⁴

Soit $w(t)$ la densité de probabilité (inconnue) de l'instant de désintégration de la particule, vérifiant par définition

$$\int_{t_0}^{\infty} w(t)dt = 1. \quad (5)$$

C'est-à-dire que la particule se désintègre à un instant $t > t_0$.

- d) Donner en fonction de w l'expression de la probabilité p pour que la particule se désintègre entre t_0 et t , puis celle de la probabilité q pour que la particule soit encore présente à l'instant t .
- e) En écrivant que la probabilité conditionnelle pour que la particule se désintègre entre t et $t + dt$, sachant qu'elle est présente à t , est indépendante de t , montrer que

$$w(t) = w(t_0) \int_t^{\infty} w(u)du. \quad (6)$$

Résoudre cette équation pour en déduire que $w(t) = f(t)$.

Les atomes radioactifs possèdent une durée de vie qui suit une loi exponentielle.

- f) On appelle demi-vie δ le temps au bout duquel la moitié des particules se sont désintégrées. Donnez l'expression de δ en fonction de τ .
- g) Quelle est la durée de vie moyenne d'un noyau d'iode 131 ayant un demi-vie de 8.02 jours ?

Exemples : période des Noyaux radioactifs

noyau	uranium 238	carbone 14	césium 137
période τ	$4.5 \cdot 10^9$ an	5700 an	30.15 an

1.3. Interférométrie et physique fondamentale

Grâce à leur grande sensibilité les interféromètres sont utilisés pour détecter des signaux astrophysiques et cosmologiques comme le *Very Large Telescope* au Chili ou les interféromètres de Michelson VIRGO (Pise, Italie), LIGO (USA).

Afin d'éviter d'avoir à utiliser des miroirs de grande taille, qui sont difficiles et coûteux chers à réaliser, on utilise un ensemble de petits télescopes. Le principe dit de « synthèse d'ouverture » est similaire à celui des fentes d'Young. Il a été suggéré par Fizeau au XIXème siècle et mis en pratique par Pearse et Michelson en 1920

4. Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard "Mécanique Quantique" Ecole Polytechnique.

1.3. Interférométrie et physique fondamentale

au télescope du Mont Wilson aux États Unis pour mesurer la taille de Bételgeuse dans la constellation d'Orion (voir fig. 3). Les trous d'Young sont remplacés par deux miroirs de télescopes. Le signal est ensuite combinée sur un détecteur afin de mesurer la différence de marche des faisceaux incidents.

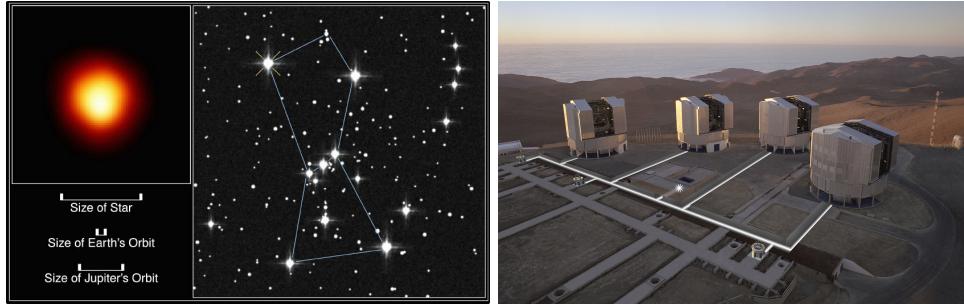


FIGURE 3. – À gauche Bételgeuse est une supergéante rouge située dans la constellation d'Orion, à 640 années-lumière de la Terre. À droite, le « Very Large Telescope » au Chili.

Cette technique est délicate car il faut un excellent contrôle des chemins optiques parcourus dans les deux bras de l'interféromètre. Mis en service en 2001, le « Very Large Telescope » construit au Chili par l'Observatoire Européen Austral, est un réseau de quatre télescopes de 8 m de diamètre chacun réalisant un diamètre équivalent d'une centaine de mètre (voir fig 3). Cette technique est basée sur des travaux d'Antoine Labeyrie du l'Observatoire de Haute Provence.

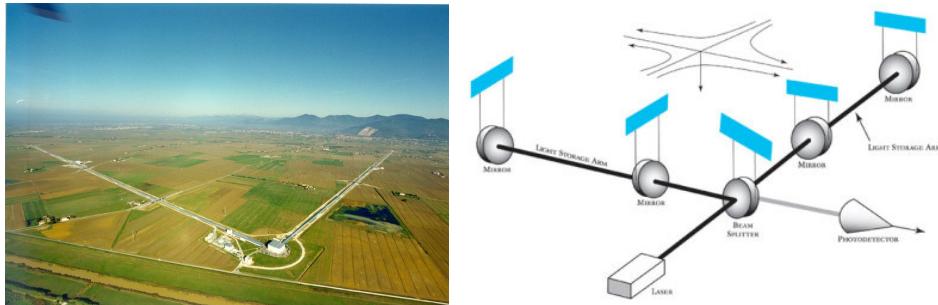


FIGURE 4. – Vue d'interféromètre VIRGO et schéma de l'interféromètre LIGO

Une autre application de l'interférométrie sont les expériences VIRGO et LIGO (fig. 4) dont le but est la détection des ondes gravitationnelles prédictes par la relativité générale d'Einstein. La principe de fonctionnement est basée sur le fait que lorsqu'une onde gravitationnelle passe à un endroit, elle y courbe très légèrement l'espace-temps. La lumière suivant la courbure de l'espace-temps, les installations de VIRGO et LIGO ont pour but de détecter une différence entre la distance parcourue par deux faisceaux lasers.

1. PC1 : Interférences et probabilités

2. PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

Mécanique quantique (PHY 311)
 Pierre Vanhove
 PC du 22 avril 2015

2.1. Propriétés générales de la transformation de Fourier

On définit la transformée de Fourier $f(x)$ de $\tilde{f}(k)$ selon

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk. \quad (1)$$

On suppose que la transformée de Fourier satisfait toutes les conditions pour une bonne définition de l'intégrale. En particulier nous supposons que $f \in L^2(\mathbb{R})$.¹

On peut montrer que la transformation inverse est donnée par

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (2)$$

- a) Montrer que si $f(x)$ est la transformée de Fourier de $\tilde{f}(k)$, alors $f(ax)$ est la transformée de Fourier de $\tilde{f}(k/a)/|a|$ pour $a \in \mathbb{R}^*$.
- b) Montrer que si $\tilde{f}(k)$ est réelle et paire, alors $f(x)$ est réelle et paire. Montrer que si $\tilde{f}(k)$ est réelle et impaire, alors $f(x)$ s'écrit $f(x) = ih(x)$, où $h(x)$ est réelle et impaire.
- c) Quelles sont les transformées de Fourier des dérivées successives $\tilde{f}'(k), \dots, \tilde{f}^{(n)}(k)$?
- d) Isométrie : on considère $f_1(x)$ transformée de Fourier de $\tilde{f}_1(k)$ et $f_2(x)$ transformée de Fourier de $\tilde{f}_2(k)$; montrer que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}_1^*(k) \tilde{f}_2(k) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1^*(x) f_2(x) dx. \quad (3)$$

- e) Déterminer la transformée de Fourier d'un produit de convolution

$$\tilde{f}_3(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \tilde{f}_1(k') \tilde{f}_2(k - k'). \quad (4)$$

1. L'appendice B du livre de cours J.-L. Basdevant et J. Dalibard "Mécanique Quantique" Ecole Polytechnique contient des détails sur les transformées de Fourier.

2. PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

2.2. Transformation de Fourier et inégalités de Heisenberg

On choisit $\tilde{f}(k)$ une fonction normée et centrée à l'origine :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk = 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(k)|^2 k dk = 0. \quad (5)$$

On suppose que sa transformée de Fourier $f(x)$ satisfait les mêmes hypothèses. On définit les variances :

$$(\Delta k)^2 := \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(k)|^2 k^2 dk \text{ et } (\Delta x)^2 := \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 x^2 dx. \quad (6)$$

a) Montrer que $\Delta x \Delta k \geq 1/2$. On pourra étudier pour λ réel, le signe de

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| k\tilde{f}(k) + \lambda \frac{d\tilde{f}}{dk} \right|^2 dk. \quad (7)$$

b) Montrer que si $\Delta x \Delta k = 1/2$ alors $f(x)$ et $\tilde{f}(k)$ sont des gaussiennes. On cherchera par exemple d'abord la forme de $\tilde{f}(k)$ en montrant quelle satisfait une équation différentielle simple que l'on déterminera.

On utilisera l'intégrale suivante pour $\alpha > 0$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha t^2} dt = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (8)$$

c) Réciproquement, montrez que si $\tilde{f}(k)$ est de la forme

$$\tilde{f}(k) = \tilde{f}_0 e^{-\frac{k^2}{2\lambda_0}}, \quad (9)$$

avec \tilde{f}_0 et λ_0 constantes réelles telles que f^2 est normalisée, alors $\Delta k^2 = \lambda_0/2$, et que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

d) En utilisant le lien impulsion-vecteur d'onde en déduire l'inégalité de Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

2.3. Évolution du paquet d'onde libre

On considère le mouvement libre, à une dimension, d'une particule de masse m dont l'état quantique est défini à l'instant t par le paquet d'onde suivant

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(t, p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp. \quad (10)$$

2.4. Relations d'incertitude et physique fondamentale

- a) Rappeler (sans démonstration) l'expression de $\tilde{\psi}(t, p)$ en fonction de $\psi(t, x)$. Quelle est la densité de probabilité de l'impulsion p à l'instant t ? Quelle est la relation entre l'énergie E et l'impulsion p de la particule ?
- b) Rappeler l'expression de la position moyenne $\langle x \rangle(t)$ et de l'impulsion moyenne $\langle p \rangle(t)$ sous forme d'une intégrale sur x , faisant intervenir en particulier la fonction d'onde $\psi(t, x)$.
- c) Calculer la dérivée par rapport au temps de $\langle x \rangle(t)$ et montrer en particulier que

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad (11)$$

- d) Que devient cette relation si la particule évolue dans un potentiel $V(x)$?

2.4. Relations d'incertitude et physique fondamentale

De manière générale la relation d'incertitude d'Heisenberg donne que pour deux observables \hat{A} et \hat{B} , les valeurs $(\Delta a)^2 := \langle \psi | (\hat{A})^2 | \phi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2$ et $(\Delta b)^2 := \langle \psi | (\hat{B})^2 | \phi \rangle - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle^2$ satisfont l'inégalité

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|. \quad (12)$$

Ainsi on peut simultanément mesurer que des observables qui commutent.

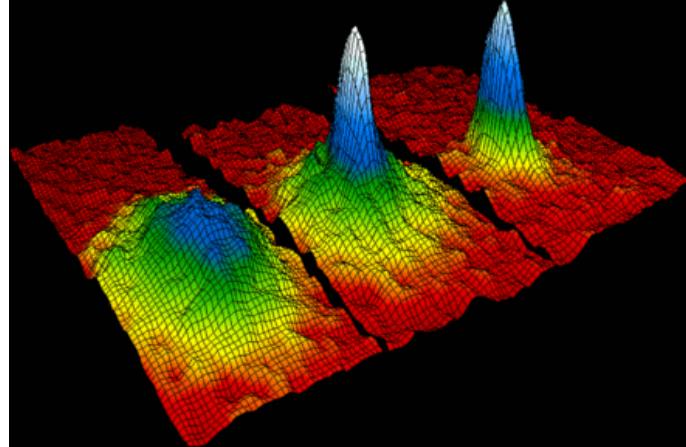


FIGURE 1. – Simulation montrant trois états successifs : les atomes sont de plus en plus denses. De gauche à droite : la température du système étant supérieure à la température critique T_C , la température $T < T_C$, et finalement $T \ll T_C$.

2. PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

Le relation d'incertitude de Heisenberg joue un rôle important dans le mécanisme de piégeage des atomes et les condensats de Bose-Einstein. Une description de ces phénomènes est donnée dans ce texte de Jean Dalibard “La condensation de Bose-Einstein en phase gazeuse” (Images de la physique 2000)

http://www.phys.ens.fr/dalibard/publications/images_physique.pdf

3. PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 6 mai 2015

3.1. L'effet tunnel dans la vie quotidienne

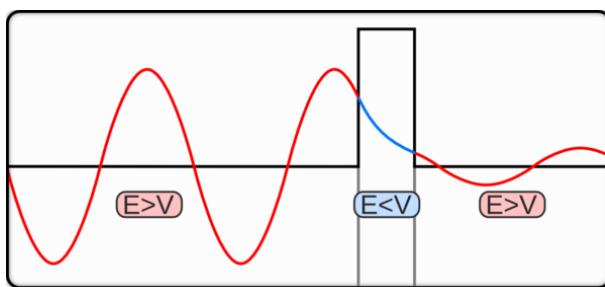


FIGURE 1. – Effet tunnel à travers une barrière de potentiel. L'onde incidente venant de la gauche traverse la barrière de potentiel (en bleu) pour être transmise à droite.

L'effet tunnel désigne la propriété que possède un objet quantique de franchir une barrière de potentiel même si son énergie est inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir classiquement cette barrière. C'est un effet purement quantique, qui ne peut pas s'expliquer par la mécanique classique. Pour une telle particule, la fonction d'onde, dont le carré du module représente la densité de probabilité de présence, ne s'annule pas au niveau de la barrière, mais s'atténue à l'intérieur de la barrière, pratiquement exponentiellement pour une barrière assez large. Si, à la sortie de la barrière de potentiel, la particule possède une probabilité de présence non nulle, elle peut traverser cette barrière. Cette probabilité dépend des états accessibles de part et d'autre de la barrière ainsi que de l'extension spatiale de la barrière.

L'effet tunnel est en jeu dans de nombreux phénomènes physiques

- les molécules : NH₃, par exemple. L'effet tunnel est entre deux minima du potentiel pour les configurations de la molécule d'ammoniaque. Voir figure 2
- les modélisations des désintégrations (fission, radioactivité alpha). C'est Georges Gamow qui a proposé une explication de ce phénomène en 1928. Voir figure 3

3. PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

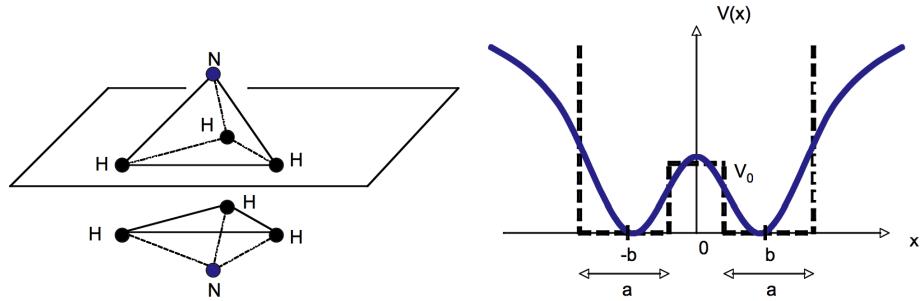


FIGURE 2. – Configurations de la molécule d'ammoniaque et le potentiel décrivant le système

- les diodes à effet tunnel,
- la mémoire MRAM utilisant un effet tunnel magnétique mettant en jeu des électrons,
- les microscopes à effet tunnel,
- l'effet Josephson est l'apparition d'un courant entre deux matériaux supraconducteurs séparés par une couche faite d'un matériau isolant ou métallique non supraconducteur. Ce phénomène prédict par Brian David Josephson en 1962 a été récompensé par le prix Nobel en 1973.

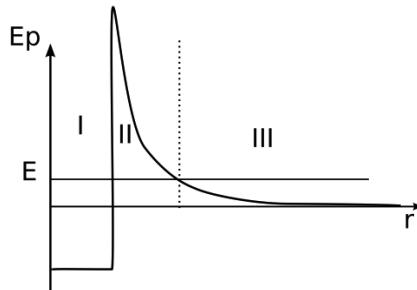


FIGURE 3. – Potentiel subi par la particule α en fonction de sa distance au noyau.

3.2. Conditions de raccordement à l'interface d'un potentiel discontinu.

- a) On considère une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger (à une dimension) de la forme

$$\psi(t, x) = \varphi(x)e^{-i\omega t}. \quad (1)$$

3.3. Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.

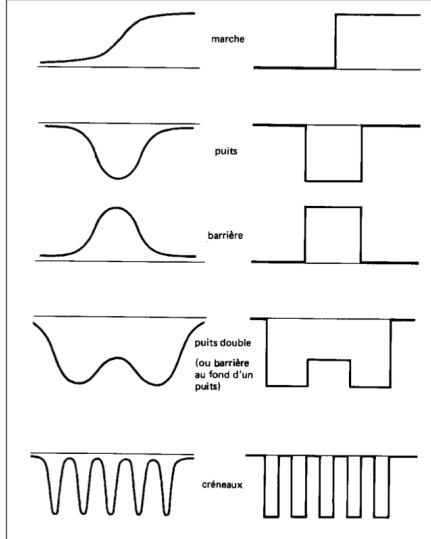


FIGURE 4. – Potentiels physiques et leurs approximations sous forme de puits carrés.

Quel est le lien entre ω et l'énergie associée à l'état stationnaire ?

- b) Si le potentiel V est continu, que dire de la continuité de φ et φ' ?
- c) On suppose que le potentiel V admet une discontinuité en $x = 0$ tout en restant borné. En considérant ce cas comme le cas limite d'un potentiel continu, que peut on dire de la continuité de φ et φ' dans ce cas. Que dire de la continuité de φ'' ?
- d) Que se passe-t-il si le potentiel est une fonction δ de Dirac (un potentiel infiniment haut et infiniment fin) $V(x) = K \delta(x)$?

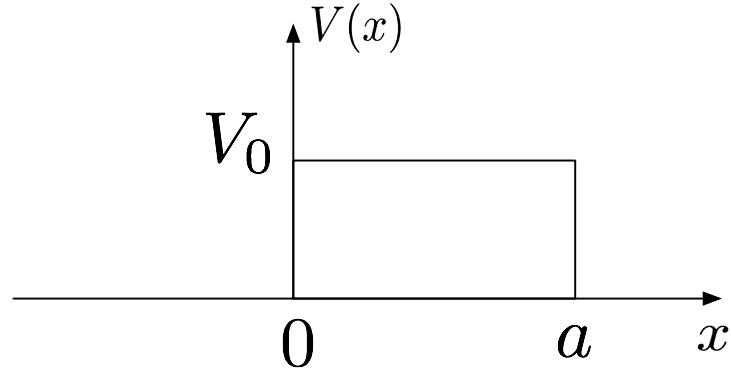
3.3. Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.

On considère le potentiel $V(x)$ tel que $V(x) = 0$ si $x < 0$, $V(x) = V_0 > 0$ si $0 \leq x \leq a$, $V(x) = 0$ si $x > a$, et on cherche une solution stationnaire $\varphi(x)$ de l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m et pour une énergie E telle que $0 < E < V_0$.

- a) Montrer (sans calculer les coefficients A, \dots, G) que $\varphi(x)$ peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} && \text{si } x < 0 \\ \varphi_{II}(x) &= C e^{-qx} + D e^{+qx} && \text{si } 0 < x < a \\ \varphi_{III}(x) &= F e^{ikx} + G e^{-ikx} && \text{si } x > a \end{aligned} \quad (2)$$

3. PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel



où q et k sont des coefficients positifs que l'on précisera en fonction de E , V_0 , m , a et \hbar .

- b) Comment procèderait-on si on voulait déterminer les constantes A, B, C, D, F, G (ne pas essayer de le faire à ce stade). Quelle est la dimension de l'espace vectoriel des solutions à k donné ?
- c) On suppose que la situation physique envisagée correspond à des particules émises par une source située à gauche du potentiel, en $-\infty$. Quel coefficient de $\varphi(x)$ faut-il alors annuler par hypothèse ?
- d) Dans la région $x < 0$, on peut décomposer la fonction d'onde en un terme d'amplitude de module carré J_I correspondant à l'onde incidente et un terme d'amplitude de module carré J_R correspondant à l'onde réfléchie, et on définit les coefficients de réflexion R et de transmission T de la barrière par les relations :

$$R = \left| \frac{J_R}{J_I} \right| \text{ et } T = \left| \frac{J_T}{J_I} \right|. \quad (3)$$

Exprimer R et T en fonction des coefficients non nuls de $\varphi(x)$ où J_T correspond au module carré de l'onde transmise.

- e) En utilisant les relations de continuité de $\varphi(x)$ et de sa dérivée, calculer F et B en fonction de A . Montrer que les facteurs de transmission T et de réflexion R s'écrivent

$$T = \frac{(2qk)^2}{(2qk)^2 \cosh^2(qa) + (q^2 - k^2)^2 \sinh^2(qa)} \text{ et } R = \frac{\sinh^2(qa)(q^2 + k^2)^2}{(2qk)^2 \cosh^2(qa) + (q^2 - k^2)^2 \sinh^2(qa)}. \quad (4)$$

- f) On suppose que $qa \gg 1$ (barrière « épaisse »). Calculer le coefficient de transmission T de la barrière, et montrer qu'il peut se simplifier sous la forme suivante :

$$T \simeq 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2qa}. \quad (5)$$

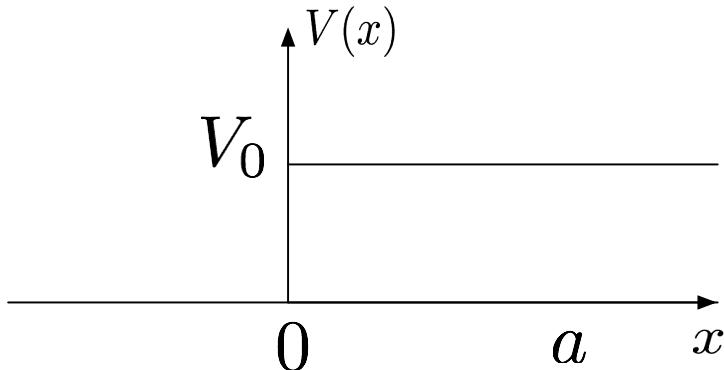
3.4. Application à la marche de potentiel à une dimension.

g) Application numérique :

- i) On considère un électron d'énergie $E = 1 \text{ eV}$ pour une barrière de potentiel avec $V_0 = 2 \text{ eV}$ et d'épaisseur $a = 1 \text{ \AA}$. Calculer la valeur du coefficient de transmission T .
- ii) On considère maintenant le cas d'un proton de même énergie sur la même barrière. Que vaut le coefficient de transmission ?

On pourra se servir des relations utiles : $\hbar c = 197,3 \text{ eV.nm}$ et $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ et $m_p c^2 = 938,272 \text{ MeV}$. Un électron-volt $1 \text{ eV} = 1.783 10^{-36} \text{ kg.c}^2$. Un Ångström $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$.

3.4. Application à la marche de potentiel à une dimension.



On considère maintenant le potentiel $V(x)$ en « marche d'escalier » tel que $V(x) = 0$ si $x \leq 0$ et $V(x) = V_0$ si $x > 0$. Toujours avec $E < V_0$, déduisez des résultats de l'exercice précédent la valeur de R si $0 < E < V_0$? Quel est le profil de la fonction d'onde dans la région $x > 0$.

3.5. Résonance de diffusion

On s'intéresse maintenant à nouveau au cas de la partie 3.3 mais avec l'énergie E prise supérieure à la hauteur V_0 de la barrière. On posera $q' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$.

- a) Écrire l'expression de la fonction d'onde dans les trois régions de l'espace. On remarquera que la grandeur q introduite dans l'exercice 3.3 est maintenant imaginaire pure et que l'on retrouve bien l'expression correcte de la fonction d'onde à condition de poser $q = iq'$.

3. PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

- b) En utilisant directement les résultats de l'exercice 3.3, calculer le coefficient de transmission T , que l'on exprimera en fonction de k , q' et $q'a$, puis de E , V_0 et $q'a$.

On rappelle que $\sinh i\theta = i \sin \theta$ et $\cosh i\theta = \cos \theta$.

- c) Montrer que pour certaines valeurs de l'énergie appelées résonances, on a $T = 1$. Interpréter physiquement la condition de résonance.
- d) Calculer R puis $R + T$.

4. PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 13 mai 2015

4.1. Évolution temporelle

On considère la fonction d'onde $\psi(t, x) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(x)$ où les $\varphi_n(x)$ sont les états propres du hamiltonien $\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$. On démontre en analyse hilbertienne que les états propres d'un opérateur hermitien forment une base orthonormée de l'espace des états, c'est-à-dire qu'une telle décomposition est toujours possible, et que les $\varphi_n(x)$ sont « orthonormés » au sens des fonctions :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) dx = \delta_{nm}. \quad (1)$$

a) Montrer en utilisant l'équation de Schrödinger que l'on a :

$$\psi(t, x) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(x). \quad (2)$$

4.2. Invariance par parité

- a) On considère une particule dans un potentiel invariant par parité : $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$. Soit $\psi(\mathbf{r})$ un état propre de \hat{H} . Montrer que $\psi(-\mathbf{r})$ est aussi état propre, pour la même valeur propre.
- b) En déduire que l'on peut chercher les états propres donnés par des fonctions paires ou impaires.
- c) Dans le cas où les niveaux d'énergie sont non dégénérés, montrer que les états propres sont nécessairement pairs ou impairs.
- d) À la lumière de ces considérations expliquez la forme des fonctions d'ondes du puits carré infini données cours numéro 3. Le puits carré infini est défini par $V(x) = 0$ pour $x \in [0, L]$ et $+\infty$ pour $x < 0$ et $x > L$. Les fonctions d'ondes sont $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$.

4.3. Etats isotropes de l'atome d'hydrogène

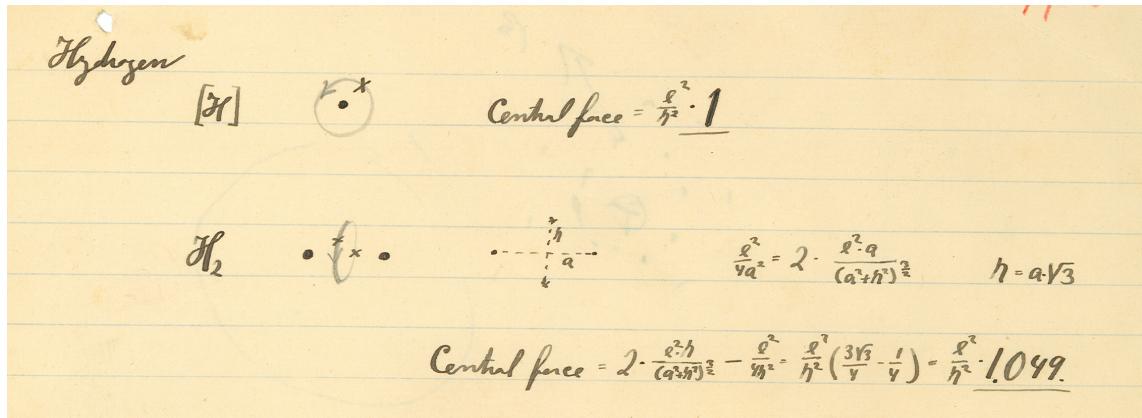


FIGURE 1. – manuscrit de l'article de Niels Bohr de juillet 1913 (avec la permission de l'« Archive Niels Bohr », Copenhague)

Les niveaux d'énergie des états à symétrie sphérique de l'atome d'hydrogène peuvent s'obtenir par un calcul à une seule dimension en factorisant la dépendance angulaire. On considère un électron de masse m dans un potentiel $V(x)$ tel que :

$$V(x) = \infty \quad \text{si } x \leq 0; \quad V(x) = -\frac{\alpha \hbar c}{x} \quad \text{si } x > 0, \quad (3)$$

où $\alpha = q^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \simeq 1/137$ (constante sans dimension), c est la vitesse de la lumière et q est la charge élémentaire.

- a) Montrer que la fonction d'onde $\psi(x) = Cxe^{-x/a_0}$ pour $x \geq 0$ et $\psi(x) = 0$ pour $x < 0$ est fonction propre de l'hamiltonien pour une valeur de a_0 que l'on déterminera. Calculer la valeur propre E_1 correspondante. On exprimera E_1 et a_0 en fonction de m , α , \hbar et c .
- b) Calculer numériquement E_1 et a_0 . On utilisera que $\hbar c = 197,3$ eV.nm et $mc^2 = 0,511$ MeV.
- c) Déterminer la constante de normalisation C en fonction de a_0 .
- d) Calculer la valeur moyenne de $1/x$ dans l'état $|\psi\rangle$ et en déduire la valeur moyenne de l'énergie potentielle. Calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique. Quelle relation, valable en mécanique classique, y a-t-il entre ces deux quantités ?
- e) Plus généralement, on cherche maintenant des solutions sous la forme $\psi_n(x) = \exp(-x\lambda_n/a_0)y_n(x/a_0)$ correspondant à l'énergie propre E_n , avec les changements de variable $\lambda_n = \sqrt{E_n/E_1}$. À quelle équation différentielle doit obéir $y_n(x)$?

4.3. Etats isotropes de l'atome d'hydrogène

- f) On suppose que $y_n(x) = (x/a_0)^s \sum_{q=0}^{\infty} c_q (x/a_0)^q$ avec $c_0 \neq 0$. Montrer que $s = 1$ et que la série est forcément finie. En déduire les niveaux d'énergie E_n possibles. Combien y en a-t-il ?

4. PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés

5. PC5 : L'oscillateur harmonique

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 27 mai 2015

5.1. Notations de Dirac et relations de commutation dans l'espace des états

- Les éléments de l'espace de Hilbert \mathcal{E}_H sont appelés *kets* et notés $|\psi\rangle$.
- À tout ket $|\chi\rangle$ de \mathcal{E}_H on associe l'application linéaire complexe suivante

$$\begin{aligned}\chi : \mathcal{E}_H &\rightarrow \mathbb{C} \\ |\phi\rangle &\mapsto \chi(|\phi\rangle)\end{aligned}\tag{1}$$

- Cette application définit une forme linéaire telle que pour deux nombres complexes λ_1 et λ_2 quelconques et deux kets $|\phi_1\rangle$ and $|\phi_2\rangle$ de l'espace de Hilbert on a

$$\chi(\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle) = \lambda_1\chi(|\phi_1\rangle) + \lambda_2\chi(|\phi_2\rangle).\tag{2}$$

- L'ensemble de ces applications linéaires constituent un espace vectoriel, dit espace dual, \mathcal{E}_H^* . Les éléments sont appelés des *bra* et sont notés $\langle\chi|$. On utilise la notation suivante

$$\chi(|\phi\rangle) := \langle\chi|\phi\rangle.\tag{3}$$

Ainsi un bra et un ket forment un *bracket* c'est-à-dire une « parenthèse ».

- La relation entre l'espace de Hilbert et son dual se traduit par la relation

$$(\chi(|\phi\rangle))^* = (\langle\chi|\phi\rangle)^* = \langle\phi|\chi\rangle = \phi(|\chi\rangle)\tag{4}$$

qui implique

$$(|\chi\rangle)^\dagger = \langle\chi|\tag{5}$$

- Si en général on peut toujours associer un bra dual $\langle\phi|$ au ket $|\phi\rangle$, il n'existe pas toujours de ket dual à un bra donné. En général les espaces de Hilbert sont de dimensions infinies et $(\mathcal{E}_H^*)^* \neq \mathcal{E}_H$ le dual du dual n'est pas l'espace d'origine.
- On dispose d'opérateurs linéaires sur \mathcal{E}_H , notés \hat{A}, \hat{B}, \dots et on suppose que l'on peut définir un produit (interne) entre ces opérateurs noté simplement $\hat{A} \cdot \hat{B}$.

5. PC5 : L'oscillateur harmonique

On suppose ce produit associatif par rapport à l'action d'un opérateur sur un ket (noté $\hat{A}|\psi\rangle$), c'est-à-dire que l'on a

$$(\hat{A} \cdot \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}(|\psi\rangle)) = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) \quad (6)$$

- Étant donné un opérateur \hat{A} , son hermitique conjugué (ou adjoint) \hat{A}^\dagger vérifie

$$\psi(\hat{A}^\dagger|\phi\rangle) = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = (\phi|\hat{A}|\psi\rangle)^*. \quad (7)$$

Un opérateur \hat{A} est dit hermitien si et seulement si $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

- Vérifier que les définitions (2) et (4) impliquent que $\langle\chi|\phi\rangle$ définit un produit scalaire linéaire à droite et anti-linéaire à gauche.
- Montrer que si λ est un nombre complexe alors $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$. Comment s'exprime $\langle\lambda\psi|$ en fonction de λ^* et $\langle\psi|$?
- On considère le ket $\hat{A}|\psi\rangle$, montrer que le bra associé peut s'écrire $\langle\psi|\hat{A}^\dagger$.
- Montrer que l'on a $(\hat{A} \cdot \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \cdot \hat{A}^\dagger$
- En considérant l'action des observables position et impulsion sur une fonction d'onde quelconque $\psi(x)$, montrer que :
 - Les opérateurs \hat{x} et \hat{p} sont hermitiens ;
 - on a dans l'espace des états la relation générale : $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{x} = i\hbar\mathbb{I}$.

Par la suite, l'opérateur identité \mathbb{I} sera le plus souvent sous-entendu.

5.2. L'oscillateur harmonique

On considère le mouvement à une dimension d'une particule soumise à une force de rappel en $-Kx$, donc à un potentiel en $\frac{1}{2}Kx^2$ (oscillateur harmonique). L'hamiltonien s'écrit donc :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}K\hat{x}^2, \text{ avec } K = m\Omega^2. \quad (8)$$

- Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour la fonction d'onde $\phi(x)$.

Les solutions de cette équation et les valeurs propres associées, représentées du la figure 1, ne sont a priori pas évidentes. Le but de cet exercice est de montrer qu'on peut déterminer complètement les énergies et les états propres du hamiltonien par une méthode purement algébrique (due à Dirac), en travaillant directement dans l'espace des états, et non dans celui des fonctions d'onde. Cette méthode est basée sur l'utilisation de la relation de commutation entre observables $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

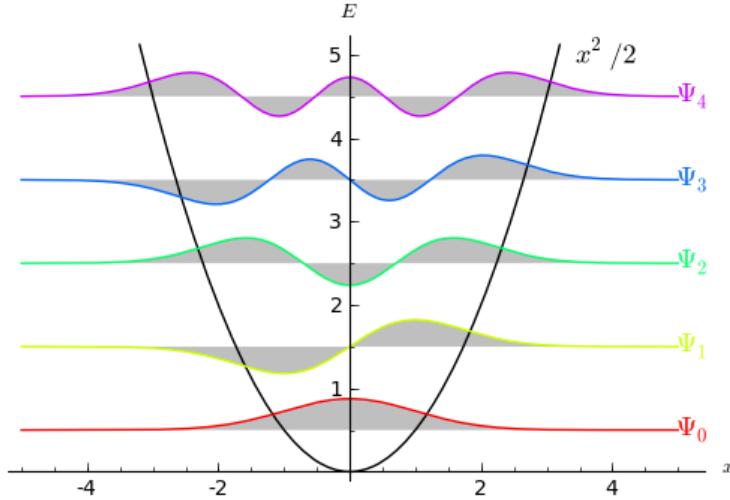


FIGURE 1. – Les cinq premiers niveaux d'énergie et profil des fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique.

- b) En considérant l'expression de l'opérateur sans dimension $\hat{H} = \frac{\hat{H}_0}{\hbar\Omega}$, montrer que les opérateurs $\hat{X} = \sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}}\hat{x}$ et $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\Omega}}$ sont sans dimensions, et que $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{\hat{X}^2}{2}$ avec $[\hat{X}, \hat{P}] = i$.
- c) L'astuce de Dirac a été de définir les opérateurs $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$ et $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$. Ces opérateurs sont-ils hermitiens ? Calculer le commutateur $[\hat{a}, \hat{a}^+]$. Calculer $[\hat{N}, \hat{a}]$ et $[\hat{N}, \hat{a}^+]$. On pose $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$. Montrer que \hat{N} est hermitien et que $\hat{H} = \hat{N} + \frac{1}{2}$.
- d) Soit ν une valeur propre de \hat{N} , de vecteur propre associé $|\phi_\nu\rangle : \hat{N}|\phi_\nu\rangle = \nu|\phi_\nu\rangle$.
 - i) Montrer en calculant la norme de $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$ que $\nu \geq 0$, et que $\hat{a}|\phi_\nu\rangle = 0$ si et seulement si $\nu = 0$.
 - ii) Montrer en calculant la norme de $\hat{a}^+|\phi_\nu\rangle$ que $\hat{a}^+|\phi_\nu\rangle \neq 0$.
 - iii) Montrer que si $\nu > 0$, alors $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$ est vecteur propre de \hat{N} avec la valeur propre $(\nu - 1)$.
 - iv) Montrer que les propriétés qui viennent d'être démontrées ne peuvent être satisfaites simultanément que si ν est un entier naturel. On posera dans la suite $\nu = n$.

5. PC5 : L'oscillateur harmonique

- e) Montrer que $\hat{a}^+ |\phi_n\rangle$ est vecteur propre de \hat{N} avec la valeur propre $(n + 1)$, et en déduire que tous les entiers naturels sont valeurs propres de \hat{N} . Quelles sont les énergies possibles de la particule ? Comment peut-on “interpréter” les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+ ?
- f) Quelle est la valeur de l'énergie de l'état fondamental ? Déterminer la fonction d'onde $\phi_0(x)$ en explicitant l'équation opératorielle $\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$
 - i) Montrer en utilisant les propriétés de \hat{N} et la normalisation des états $|\phi_n\rangle$ que l'on a (à un facteur de phase arbitraire près) : $\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$ et $\hat{a}^+|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$.
 - ii) Donner l'expression de $|\phi_n\rangle$ en fonction de $|\phi_0\rangle$. Montrer en revenant aux fonctions d'onde en « représentation x » que l'on peut ainsi déterminer tous les $\phi_n(x)$. On a donc complètement résolu l'équation différentielle écrite ci-dessus.
 - iii) Montrer que $\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a})$ et $\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a})$. Utiliser ce résultat pour déterminer les valeurs de $\langle \hat{X} \rangle$, $\langle \hat{P} \rangle$, $\langle \hat{X}^2 \rangle$ et $\langle \hat{P}^2 \rangle$ dans le niveau $|\phi_n\rangle$. En déduire Δx et Δp , et comparer la valeur du produit $\Delta x \Delta p$ avec la limite donnée par le principe d'incertitude de Heisenberg.

6. PC6 : Expérience de Stern et Gerlach

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove
PC du 3 juin 2015

6.1. Théorème d'Ehrenfest

On considère une observable \hat{A} et sa valeur moyenne dans l'état $|\psi\rangle$: $\langle \hat{A} \rangle := \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

- a) Montrer que si \hat{A} ne dépend pas explicitement du temps alors

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle. \quad (1)$$

Ce résultat constitue le théorème d'Ehrenfest qui permet de faire le lien entre mécanique quantique et mécanique classique.

Comme application considérons le cas d'une particule de masse m évoluant dans un potentiel unidimensionnel $V(x)$.

- b) Établir les équations du mouvement pour les valeurs moyennes $\langle \hat{X} \rangle$ et $\langle \hat{P} \rangle$.
- c) On rappelle que la forme générale de la relation d'incertitude d'Heisenberg est donnée par $\Delta a E \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle|$. On définit $\tau = \Delta a / |v|$ où $v = d\langle \hat{A} \rangle / dt$. À quoi correspond le temps τ ? Et quelle relation satisfont τ et l'énergie ?

6.2. Moment magnétique

6.2.1. Description classique : précession de Larmor

On considère un électron décrivant une orbite circulaire à vitesse constante.

- a) Quel est le rapport, noté γ , entre son moment magnétique $\vec{\mu}$ et son moment cinétique \vec{L} .

On admet qu'en présence de champ magnétique (sans champ électrique), lorsque l'énergie d'interaction entre le champ et le dipole magnétique est suffisamment faible, on peut encore utiliser la relation précédente entre $\vec{\mu}$ et \vec{L} .

6. PC6 : Expérience de Stern et Gerlach

- b) Comment évolue un dipôle magnétique dans un champ magnétique uniforme ? Peut-on avoir un champ magnétique $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ avec B_z non constant ?
- c) Pour un faisceau de particules incidentes de vitesse $\vec{v} = v_y \vec{e}_y$ et de moments magnétiques $\vec{\mu} = \mu_z \vec{e}_z$ orientés positivement et négativement selon l'axe des $(\mathcal{O}z)$, qu'observe-t-on pour un champ magnétique tel que $\partial_z B_z \neq 0$?

6.2.2. Description quantique

Dans l'expérience de Stern et Gerlach l'espace des états est exprimé en termes des vecteurs représentants les projections du spin $|+\rangle := |S_z, +\rangle$ et $|-\rangle := |S_z, -\rangle$ selon l'axe $(\mathcal{O}z)$. Dans cette base l'opérateur moment magnétique prend la forme

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mu}_y = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

- d) Soit le vecteur unitaire \vec{u} repéré par les angles polaires θ et φ . Quelles sont les valeurs propres de $\hat{\mu}_{\vec{u}} := \hat{\mu} \cdot \vec{u}$?
- e) On suppose le système dans l'état $|+\rangle$. Quels sont les résultats possibles d'une mesure de $\hat{\mu}_x$? Avec quelles probabilités ? Quel est l'état du système immédiatement après la mesure ?
- f) À un instant immédiatement ultérieur, on mesure $\hat{\mu}_y$. Quels sont les résultats possibles ? Avec quelles probabilités ?

On souhaite maintenant étudier la dynamique du moment magnétique dans un champ magnétique constant \vec{B}_0 parallèle à $(\mathcal{O}z)$. Le hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\hat{\mu}_z B_0 \quad (3)$$

À l'instant $t = 0$, le moment magnétique est préparé dans un état propre $|+\rangle_{\vec{u}}$ de $\hat{\mu}_{\vec{u}}$ avec la valeur propre $+\mu_0$.

- g) Écrire le théorème d'Ehrenfest pour $\langle \hat{\mu}_{\vec{u}} \rangle$ et montrer que la valeur moyenne du moment magnétique obéit aux équations classiques.
- h) On s'intéresse à présent plus généralement à l'évolution du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ que l'on décompose sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t) |+\rangle + c_-(t) |-\rangle. \quad (4)$$

- i) Donner l'expression des coefficients $c_\alpha(t)$ en fonction de leurs valeurs à $t = 0$.
- ii) Montrer qu'à l'instant t , $|\psi(t)\rangle$ est de la forme $|+\rangle_{\vec{u}(t)}$, pour un vecteur $\vec{u}(t)$ dont on précisera les angles polaires $\theta(t)$ et $\varphi(t)$.
- iii) Interprétation physique ?

7. PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 10 juin 2015

7.1. Oscillation de Rabi

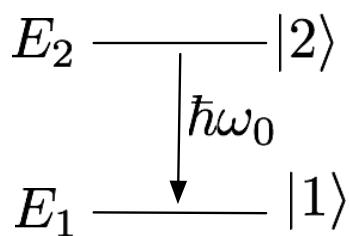


FIGURE 1. – Système à deux niveaux

On considère un atome à deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 tels que $E_2 - E_1 = -\hbar\omega_0 > 0$ (voir figure 1), correspondant à deux états normés et orthogonaux que nous noterons $|1\rangle$, considéré comme l'état fondamental, et $|2\rangle$, représentant l'état excité. On supposera que les seuls états accessibles pour cet atome sont décrits par les vecteurs normés de l'espace de Hilbert à deux dimensions engendrés par la base $\mathcal{B} = \{|1\rangle, |2\rangle\}$. Le hamiltonien qui régit l'évolution temporelle de l'état de cet atome s'écrit donc simplement :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} (|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|). \quad (1)$$

Cet atome est soumis à une excitation laser décrite par un champ électrique classique $E(t) = E_0 \cos(\omega t + \phi)$. Le système étant dans l'état fondamental $|1\rangle$, on applique à l'instant $t = 0$ une perturbation monochromatique $\hat{V}(t)$ donnée par

$$\hat{V}(t) = \frac{\hbar\omega_1}{2} (e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1|). \quad (2)$$

- a) Montrez que $\hat{H}(t) := \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ peut se mettre sous la forme $\hat{H}(t) = \hat{R}(t) \hat{\tilde{H}}_1 \hat{R}^\dagger(t)$ où $\hat{\tilde{H}}_1$ est un Hamiltonien indépendant du temps et $\hat{R}(t)$ est une transformation unitaire dépendant du temps.

7. PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux

- b) Soit $\hat{R}(t)$ un opérateur unitaire, c'est-à-dire que $\hat{R}(t)\hat{R}(t)^\dagger = \mathbb{I}$ quelque $|\psi(t)\rangle = \hat{R}(t)|\chi(t)\rangle$. Montrer que si $|\psi(t)\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$ alors $|\chi\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d|\chi\rangle}{dt} = \left(\hat{R}(t)^\dagger \hat{H} \hat{R}(t) - i\hbar \hat{R}(t)^\dagger \frac{d\hat{R}(t)}{dt} \right) |\chi\rangle. \quad (3)$$

- c) On suppose maintenant l'opérateur d'évolution $U(t)$ tel que $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$. Montrer que $\hat{U}(t)$ satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}(t)\hat{U}(t). \quad (4)$$

- d) Si \hat{H} est indépendant du temps montrer que l'opérateur d'évolution est donné par

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right). \quad (5)$$

- e) Pour le système de Rabi avec

$$\hat{R}(t) := \exp\left(-i\frac{\omega t}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right). \quad (6)$$

Montrer que

$$\hat{H}_{\text{eff}} := \hat{R}(t)^\dagger \hat{H} \hat{R}(t) - i\hbar \hat{R}(t)^\dagger \frac{d\hat{R}(t)}{dt} \quad (7)$$

est indépendant du temps.

- f) Trouver l'opérateur d'évolution \hat{U}_{eff} pour cet Hamiltonien effectif. On posera $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$ la fréquence de Rabi.

- g) Mettre $U(t)$ sous la forme

$$\hat{U}(t) = \hat{R}(t) \begin{pmatrix} u_0(t) + u_z(t) & u_x(t) \\ u_x(t) & u_0(t) - u_z(t) \end{pmatrix} \quad (8)$$

- h) En déduire l'expression exacte de la probabilité de transition $P_{12}(t)$ entre l'état $|1\rangle$ et l'état $|2\rangle$. Analyser les cas suivants

- i) $\omega \gg \omega_0$
- ii) $\omega = \omega_0$
- iii) $\omega \ll \omega_0$

8. PC8 : Cryptographie quantique

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 17 juin 2014

8.1. Motivation

Le but de la cryptographie est d'envoyer à un correspondant un message en minimisant les risques de voir ce message intercepté par un tiers. Ce problème montre comment la mécanique quantique peut fournir une procédure répondant à ce besoin. Plus précisément, on suppose ici qu'Alice (A) souhaite envoyer à Bernard (B) une certaine information que l'on suppose codée en binaire, par exemple :

$$+ + - - + + - - + \dots \quad (1)$$

On notera n le nombre de bits de ce message. Alice ne veut transmettre ce message que si elle s'est préalablement assurée que la communication n'est pas écoutée par un « espion ».

8.2. États de spin $\frac{1}{2}$

On s'intéresse à une particule de spin $\frac{1}{2}$. L'observable de spin est $\hat{\vec{S}} = \hbar\hat{\vec{\sigma}}/2$ où les σ_i sont les matrices de Pauli donnée par

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

On note $|\sigma_z = \pm 1\rangle$ les états propres de \hat{S}_z avec valeurs propres respectives $\pm\hbar/2$. Considérons une particule dans l'état de spin $|\sigma_z = +1\rangle$. On effectue la mesure de la composante du spin suivant un axe u situé dans le plan xOz et défini par le vecteur unitaire :

$$\vec{e}_u = \cos \theta \vec{e}_z + \sin \theta \vec{e}_x \quad (3)$$

- a) Rappeler l'observable $\hat{S}_{\vec{u}} := \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_u$ associée à cette mesure.
- b) Montrer que les résultats de mesure possibles sont $\pm\hbar/2$.
- c) Montrer que les états propres de l'observable $\hat{S}_{\vec{u}}$ sont de la forme

$$|\sigma_u = +1\rangle = \cos \varphi |\sigma_z = +1\rangle + \sin \varphi |\sigma_z = -1\rangle \quad (4)$$

$$|\sigma_u = -1\rangle = -\sin \varphi |\sigma_z = +1\rangle + \cos \varphi |\sigma_z = -1\rangle \quad (5)$$

Exprimer φ en fonction de θ . En déduire les probabilités p_u^\pm de trouver $\pm \hbar/2$.

- d) Quels sont les états de spin après une mesure ayant donné $\pm \hbar/2$?
- e) Immédiatement après cette mesure, on mesure la composante du spin suivant l'axe z .
 - i) Donner les résultats possibles et leurs probabilités en fonction du résultat obtenu précédemment le long de u .
 - ii) Montrer que la probabilité de retrouver la même valeur $S_z = +\hbar/2$ que dans l'état initial $|\sigma_z = +\rangle$ est $P_{++}(\theta) = (1 + \cos^2 \theta)/2$.
 - iii) En supposant maintenant que l'état initial est $|\sigma_z = -1\rangle$, quelle est, dans la même séquence de mesures, la probabilité $P_{--}(\theta)$ de retrouver $-\hbar/2$ dans la seconde mesure ? Que vaut $P_{+-}(\theta)$? Commentez les résultats.

8.3. État intriqué de deux spins

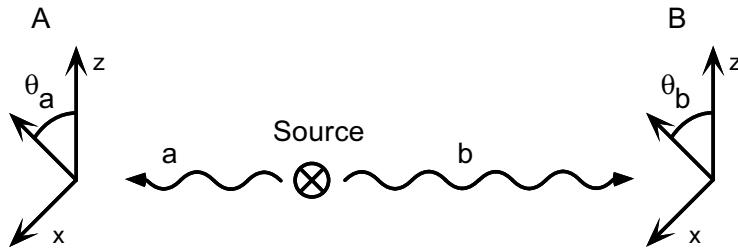


FIGURE 1. – Source \mathcal{S} émettant une paire (a, b) de particules de spin $\frac{1}{2}$. Alice mesure la composante du spin a suivant un axe θ_a , et Bernard mesure la composante du spin b suivant un axe θ_b .

On dispose d'une source \mathcal{S} qui produit une paire (a, b) de particules de spin $\frac{1}{2}$, préparée dans l'état $|\Sigma\rangle = \varphi(\vec{r}_a, \vec{r}_b)|\Sigma\rangle$, c'est-à-dire que les variables spatiales et les variables de spin sont indépendantes. L'état de spin des deux particules est :

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^b = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^b = -1\rangle \right] \quad (6)$$

Dans tout le problème, on ne s'intéresse qu'aux mesures de spin. Dans l'expression (6), $|\sigma_u^a = \pm 1\rangle$ (en l'occurrence $u = z$) désignent les états propres de la composante le long de u du spin de la particule a , de même pour b .

8.3. État intriqué de deux spins

a) Montrer que cet état peut également s'écrire :

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\sigma_x^a = +1\rangle \otimes |\sigma_x^b = +1\rangle + |\sigma_x^a = -1\rangle \otimes |\sigma_x^b = -1\rangle \right] \quad (7)$$

b) La paire de particules (a, b) étant préparée dans l'état de spin (6)-(7), ces particules sont séparées spatialement (figure 1) *sans que l'état de spin soit affecté* (avant qu'une mesure n'intervienne).

i) Alice mesure *d'abord* la composante du spin de a , suivant un axe u_a , d'angle θ_a . Quels sont les résultats de mesure et les probabilités correspondantes dans les deux cas $\theta_a = 0$ (axe z) et $\theta_a = \pi/2$ (axe x) ?

ii) Justifier qu'après cette mesure, l'état de spin des deux particules est :

Axe	Résultat	État
z	$+\hbar/2$	$ \sigma_z^a = +1\rangle \otimes \sigma_z^b = +1\rangle$
z	$-\hbar/2$	$ \sigma_z^a = -1\rangle \otimes \sigma_z^b = -1\rangle$
x	$+\hbar/2$	$ \sigma_x^a = +1\rangle \otimes \sigma_x^b = +1\rangle$
x	$-\hbar/2$	$ \sigma_x^a = -1\rangle \otimes \sigma_x^b = -1\rangle$

En déduire qu'on peut désormais ignorer la particule a , pour ce qui concerne les mesures de spin sur b .

c) Après cette mesure d'Alice, Bernard mesure la composante du spin de b suivant un axe u_b , d'angle θ_b . Déterminer les résultats de mesure possibles de Bernard et leurs probabilités, en fonction du résultat d'Alice, dans, les quatre configurations suivantes

- i) $\theta_a = 0, \theta_b = 0,$
- ii) $\theta_a = 0, \theta_b = \pi/2,$
- iii) $\theta_a = \pi/2, \theta_b = 0,$
- iv) $\theta_a = \pi/2, \theta_b = \pi/2,$

Dans quel(s) cas la mesure sur a , et, celle sur b donnent-elles avec certitude le même résultat ?

d) On se place dans la situation $\theta_a = 0$. On suppose qu'un « espion », situé entre la source S et Bernard, mesure la composante du spin b suivant un axe u_e , d'angle θ_e , (figure 2).

- i) Quels sont en fonction de θ_e , et du résultat de mesure d'Alice, les résultats de mesure de l'espion et leurs probabilités ?
- ii) Après cette mesure de l'espion, Bernard mesure le spin de b suivant l'axe défini par $\theta_b = 0$. Que trouve-t-il et avec quelle probabilité, en fonction du résultat trouvé par l'espion ?

8. PC8 : Cryptographie quantique

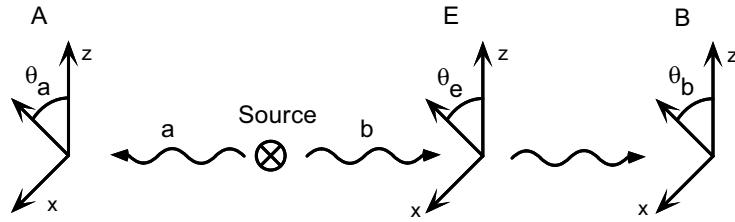


FIGURE 2. – Un espion, situé entre la source S et Bernard, fait une mesure d'une composante du spin b suivant un axe θ_c avant que Bernard ne mesure la composante de ce spin suivant l'axe θ_b .

- iii) Quelle est la probabilité, $P(\theta_e)$ qu'Alice et, Bernard trouvent le même résultat ?
- iv) Quelle est la moyenne de $P(\theta_e)$ si l'espion choisit au hasard θ_e , avec une probabilité uniforme sur $[0, \pi]$? Quelle est cette moyenne s'il choisit seulement les deux valeurs $\theta_e = 0$ et $\theta_e = \pi/2$ de façon équirépartie ?

8.4. Contexte physique



La crevette-mante à la propriété remarquable de voir la lumière polarisée linéaire ou circulaire Pour plus d'information nous référons à la page wikipedia : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Stomatopoda>

8.5. Protocole de codage de messages confidentiels

section non traitée en PC

On souhaite utiliser les résultats qui précédent à la transmission confidentielle d'information. Alice et Bernard utilisent alors la procédure détaillée dans l'encadré donné en figure 3. Commenter cette procédure, en s'attachant plus particulièrement à répondre aux questions suivantes :

- a) Comment Alice peut-elle se convaincre de la présence d'un espion ?

1. Alice et Bernard décident d'un choix d'axes x et z qui leur serviront de direction d'analyse.
2. Alice, qui dispose de la source S , prépare une séquence ordonnée de N paires de spins $\frac{1}{2}$ dans l'état (4) (n : nombre de bits du message). Elle envoie les spins a à Bernard et garde les spins b .
3. Alice et Bernard font, pour chacun des spins dont ils disposent, la mesure de la composante x ou z . Le choix entre x et z se fait de manière aléatoire et équiprobable pour chaque spin et il n'y a pas de corrélation, pour un spin donné, entre la composante choisie par Alice et celle choisie par Bernard. Ils stockent chacun l'ensemble de leurs résultats.
4. Bernard sélectionne une partie FN de ses mesures et il communique publiquement à Alice (par radio, www, etc.) la direction d'analyse choisie et le résultat obtenu pour chacune des mesures de cet ensemble. En pratique, $F \sim 0,5$.
5. Alice compare pour cet ensemble FN ses directions et ses résultats avec ceux que vient de lui communiquer Bernard. Elle peut alors détecter la présence éventuelle d'un espion. Si un espion est repéré, la procédure s'arrête et une recherche "physique" de l'espion doit avoir lieu. Sinon :
6. Alice annonce publiquement qu'elle est convaincue de ne pas avoir été écouteée, et, Bernard lui transmet toujours publiquement ses directions d'analyse pour les $(1 - F)N$ spins restants. En revanche, il ne communique pas les résultats correspondants.
7. ...

FIGURE 3. – Protocole pour la cryptographie quantique.

8. PC8 : Cryptographie quantique

- b) Quelle est la probabilité qu'un espion présent ne soit pas détecté ? On évaluera numériquement celle probabilité pour $FN = 200$.
- c) L'espion gagne-t-il en "invisibilité" s'il connaît le système d'axes Oxy retenu par Alice et Bernard pour effectuer leur mesure ?
- d) Compléter la phrase manquante en indiquant comment Alice peut envoyer son message à Bernard, sans utiliser d'autres paires de spins que les N paires déjà produites et analysées par Bernard et elle-même.

8.6. Le théorème de non-clonage quantique

On pourrait imaginer que l'espion cherche à obtenir une information sur un des photons émis, en clonant son état. Supposons ainsi qu'il dispose d'un deuxième photon, placé dans un état $|i\rangle$ et que l'interaction de ce photon copie l'état du photon d'Alice et Bernard sur l'état du photon espion, sans modifier l'état du photon original.

1. Soit U l'opérateur d'évolution des deux photons. On note $|\sigma\rangle$ l'état du photon intercepté par l'espion. Donner l'expression de $U(t)|\sigma\rangle \otimes |i\rangle$, où t est choisi postérieur à l'interaction entre les deux photons.
2. Calculer $\langle \sigma', i | U^\dagger(t)U(t)|\sigma\rangle \otimes |i\rangle$ et en déduire que l'opération décrite ci-dessus est impossible à réaliser.

9. PC9 : Molécule de Benzène

Mécanique quantique (PHY 311)

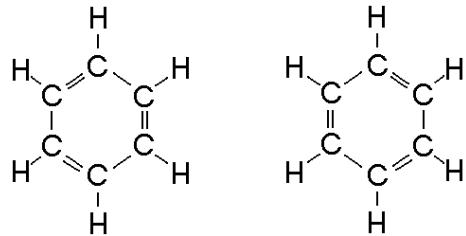
Pierre Vanhove

PC du 24 juin 2015

Lemme : commutation d'opérateurs

On considère deux opérateurs \hat{G} et \hat{H} qui commutent : $\hat{G}\hat{H} = \hat{H}\hat{G}$. L'ensemble $\{|\phi_n\rangle\}$ est une base propre de \hat{G} et on note g_n les valeurs propres correspondantes. On suppose pour simplifier que ces valeurs propres ne sont pas dégénérées. Montrer que les $|\phi_n\rangle$ sont états propres de \hat{H} .

9.1. Un modèle simple pour la molécule de benzène



On considère les états d'un électron dans une molécule hexagonale C_6 formée de 6 atomes équidistants. On désigne par $|n\rangle$ ($n = 1, \dots, 6$) les états de l'électron localisés respectivement au voisinage des atomes $n = 1, \dots, 6$. On suppose que les états forment une base orthonormée $\langle n|m \rangle = \delta_{n,m}$.

L'hamiltonien \hat{H} de ce système est défini dans la base $\{|n\rangle\}$, par $\hat{H} = E_0\mathbb{I} + \widehat{W}$, où \mathbb{I} est la matrice identité et \widehat{W} vaut :

$$\widehat{W} = -A \sum_{n=1}^6 (|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|) , \quad (1)$$

avec $A > 0$. Nous utilisons ici les conditions cycliques $|7\rangle \equiv |1\rangle$ et $|0\rangle \equiv |6\rangle$. Nous allons chercher les états propres $|\phi_k\rangle$ ($k = 1, \dots, 6$) de \hat{H} et les valeurs propres correspondantes E_k .

- a) Démontrer que pour N entier strictement positif, et q entier positif ou négatif :

9. PC9 : Molécule de Benzène

$$\sum_{k=1}^N e^{2i\pi kq/N} = \begin{cases} N & \text{si } q = \ell N, \ell \in \mathbb{Z} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} . \quad (2)$$

- b) Comment peut-on justifier la forme du Hamiltonien \hat{H} ?
- c) On définit l'opérateur de « rotation » \hat{R} par $\hat{R}|n\rangle = |n+1\rangle$. Montrer que les valeurs propres de \hat{R} sont nécessairement dans l'ensemble $\{\lambda_k = e^{ik\pi/3}, k = 1, \dots, 6\}$.
- d) On note $|\phi_k\rangle = \sum_{p=1}^6 c_{k,p}|p\rangle$ le vecteur propre (éventuel) de \hat{R} associé à λ_k . Écrire une relation de récurrence pour les coefficients $c_{k,p}$ et déterminer ces coefficients en normalisant $|\phi_k\rangle$.
- e) Montrer que les kets $|\phi_k\rangle$ sont deux à deux orthogonaux.
- f) Écrire l'opérateur de rotation \hat{R} sous forme matricielle. Montrer que \hat{H} et \hat{R} commutent.
- g) En déduire les vecteurs propres de \hat{H} et les valeurs propres correspondantes. Discuter la dégénérence des niveaux.
- h) Un électron est initialement sur l'atome $|1\rangle$, c'est-à-dire $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Développer ce vecteur d'état sur la base des états propres de l'hamiltonien.
- i) Quelle est la probabilité de trouver l'électron sur l'atome 1 à un instant ultérieur ? Y a-t-il des instants auxquels on est certain du résultat ? On posera $\omega = A/\hbar$.
- j) Comment se répartissent les 6 électrons dans l'état fondamental de la molécule de benzène, compte tenu du principe de Pauli ? On négligera la répulsion entre électrons.

9.2. La molécule de cyclooctatétraène



FIGURE 1. – Configuration pour la molécule de cyclooctatétraène est un dérivé insaturé du cyclooctane avec comme formule brute C_8H_8 .

On considère maintenant une chaîne fermée de huit atomes répartis régulièrement (molécule cyclooctatétraène).

9.2. La molécule de cyclooctatétraène

- a) En utilisant une méthode semblable à celle qui précède, donner les niveaux d'énergie d'un électron en mouvement sur cette chaîne. Quelle est la dégénérescence de ces niveaux ?
- b) À l'instant $t = 0$, l'électron est localisé sur le site $n = 1$: $|\psi(t = 0)\rangle = |1\rangle$. Développer ce vecteur d'état sur la base des états propres de l'hamiltonien.
- c) Calculer la probabilité $p_1(t)$ de trouver l'électron sur le site $n = 1$ à un instant t ultérieur ; on posera $\omega = A/\hbar$.
- d) Existe-t-il un instant $t \neq 0$ pour lequel $p_1(t) = 1$? La propagation d'un électron sur cette chaîne est-elle périodique ?

9. PC9 : Molécule de Benzène

10. Devoir Maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove
PC du 22 avril 2015

Ce texte prolonge la PC2 et doit être traité à la maison. Un corrigé sera distribué en PC3. Vous ne rendez pas de copies.

10.1. Particule libre

On considère une particule libre de fonction d'onde $\psi(t, x)$ et de transformée de Fourier $\tilde{\psi}(t, p)$ selon les notation de la PC2.

- Écrire l'équation d'évolution dont est solution $\tilde{\psi}(t, p)$. En déduire $\tilde{\psi}(t, p)$ à l'aide de $\tilde{\psi}(0, p)$.
- On appelle p_0 et Δp_0 respectivement la valeur moyenne et l'écart quadratique moyen de l'impulsion à l'instant $t = 0$. Calculer $\langle p \rangle(t)$ et $\Delta p(t)$ à tout instant t . Interpréter physiquement le résultat obtenu.
- A l'aide du résultat de la PC2 exprimer $\langle x \rangle(t)$ en fonction du temps. Comment ce résultat se compare-t-il à celui obtenu par la méthode de la question 2.3c de la PC2 ?

Dans toute la suite, on supposera que l'origine de l'axe des x est choisie telle que la valeur moyenne de la position à l'instant initial soit nulle : $\langle x \rangle(0) = 0$.

- De même, écrire l'expression de $\langle x^2 \rangle(t)$ à l'aide de la fonction $\tilde{\psi}(t, p)$ et de sa dérivée par rapport à p , puis montrer que l'on obtient un polynôme du second degré en t . Pour simplifier la suite des calculs, on supposera que ce polynôme atteint son extremum en $t = 0$ et on déterminera le coefficient du terme en t^2 . En déduire la variance $\Delta x(t)^2$, que l'on exprimera à l'aide de $\Delta x_0 = \Delta x(0)$ et de Δp_0 .
- Donner une valeur approximative de $\Delta x(t)$ lorsque $t \rightarrow +\infty$. Interpréter physiquement le résultat obtenu.

10.2. Oscillateur harmonique

On considère dans cette partie le cas d'un potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

- a) Écrire les deux équations dont sont respectivement solutions les fonctions $\psi(x, t)$ et $\tilde{\psi}(t, p)$.
- b) En exploitant l'analogie entre les deux équations obtenues à la question précédente, montrer que

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(t, p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} dp \quad (1)$$

Il sera utile de considérer la variable $X = \frac{p}{m\omega}$ ainsi que la fonction $\Phi(t, X) = \sqrt{m\omega}\tilde{\psi}(t, m\omega X)$.

- c) En déduire une relation entre $d\langle p \rangle/dt$ et $\langle x \rangle$. Comment cette relation se compare-t-elle au résultat obtenu en mécanique classique ?

11. Premier devoir à la maison

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

donné le 13 mai 2015 - à rendre le 27 mai 2015

1. Courant de probabilité

En électrodynamique classique on définit les densité de charge ρ et de courant $\mathbf{J} = \rho\mathbf{v}$, qui obéissent à la relation de conservation de la charge :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1)$$

- a) Par analogie, on définira en mécanique quantique une densité de probabilité ρ et un courant de probabilité \mathbf{J} . Montrer que la densité et le courant de probabilité obéissent aussi à la relation ci-dessus (relation de conservation de la probabilité) si on prend pour ρ et \mathbf{J} les expressions suivantes, définies pour une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel $V(\mathbf{r})$:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \text{Re} \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \psi(\mathbf{r}, t) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)]. \end{aligned} \quad (3)$$

- b) On recherche des solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme $\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\chi(t)$. Montrer que $\varphi(\mathbf{r})$ et $\chi(t)$ vérifient les équations :

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} = E\chi(t), \quad (4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}), \quad (5)$$

avec E constante. Montrer que l'on a $\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ et exprimer ω en fonction de l'énergie E de la particule. On dit alors que $\psi(\mathbf{r}, t)$ est une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger, et que $\varphi(\mathbf{r})$ est une solution de l'équation de Schrödinger "indépendante du temps".

- c) Montrer que pour une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger la relation de conservation de la probabilité s'écrit simplement $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. En déduire que

11. Premier devoir à la maison

pour une solution stationnaire à une seule dimension d'espace, la valeur du courant de probabilité est une constante.

- d) On se place maintenant dans un espace à une dimension, et on suppose $V(x) = V_0$ constant. Montrer que pour $E > V_0$ l'équation de Schrödinger admet comme solution stationnaire :

$$\psi_k(t, x) = \left(A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \quad (6)$$

et donner la relation entre k , E et les autres données du problème.

- e) Calculer l'expression de J_x (composante de \mathbf{J} suivant l'axe des x) en fonction de A et de B (et des autres paramètres du problème) ? Quelle partie de ce courant de probabilité peut-on attribuer à une onde progressive se « déplaçant » dans le sens des $x > 0$? Dans la suite du problème, on dira qu'une telle onde est incidente ou transmise selon les cas (à gauche et à droite de la marche ou de la barrière de potentiel).
- f) La fonction $\psi_k(t, x)$ est-elle normalisable ? Comment interpréter ce résultat ?
- g) On considère deux solutions stationnaires $\psi_{k_1}(t, x)$ et $\psi_{k_2}(t, x)$ données respectivement par

$$\psi_{k_1}(t, x) = \left(A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \right) \exp\left(-i \frac{E_1 t}{\hbar}\right) \quad (7)$$

$$\psi_{k_2}(t, x) = \left(A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \right) \exp\left(-i \frac{E_2 t}{\hbar}\right) \quad (8)$$

La fonction d'onde $\psi(t, x) = \psi_{k_1}(t, x) + \psi_{k_2}(t, x)$ est-elle une solution de l'équation de Schrödinger ? Le courant de probabilité et la densité de probabilité associés à cette fonction d'onde dépendent-il du temps ?

2. Marche de potentiel à une dimension.

On considère le potentiel $V(x)$ en « marche d'escalier » tel que $V(x) = 0$ si $x \leq 0$ et $V(x) = V_0 \geq 0$ si $x > 0$ (voir figure 1), et on cherche une solution stationnaire $\varphi(x)$ de l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m et pour une énergie E telle que $0 < E < V_0$.

- a) Montrer (sans calculer les coefficients A, B, C, D) que $\varphi(x)$ peut se mettre sous la forme :

$$\varphi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{si } x \leq 0 \quad (9)$$

$$\varphi_{II}(x) = C e^{-qx} + D e^{+qx} \quad \text{si } x > 0 \quad (10)$$

2. Marche de potentiel à une dimension.

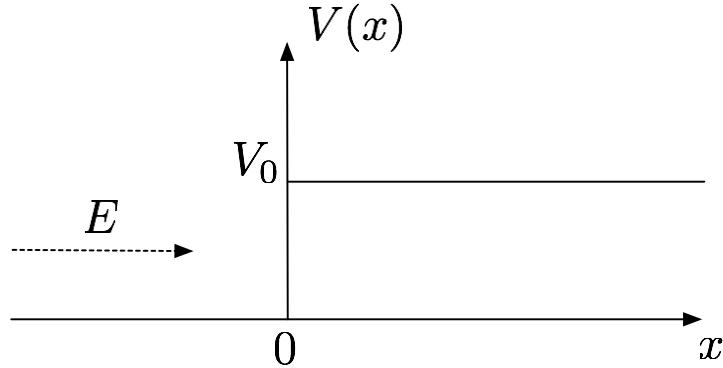


FIGURE 1. – Marche de potentiel avec une onde incidente de $x = -\infty$ d'énergie $E < V_0$.

où q et k sont des coefficients positifs que l'on précisera en fonction de E , V_0 , m , a et \hbar .

- b) Quelles conditions de raccordement $\varphi_I(x)$ et $\varphi_{II}(x)$ doivent-elles vérifier si V_0 est fini ?
- c) Expliquez pour quelle(s) raison(s) on doit choisir $D = 0$ dans la solution pour $x > 0$. Exprimer ensuite B et C en fonction de A .
- d) Le choix $D = 0$ est-il en accord avec l'hypothèse (que l'on fera par la suite) de ne considérer des particules incidentes que depuis $x = -\infty$ (et non $x = +\infty$) ? À quelle partie de la solution $\varphi_I(x)$ peut correspondre une « onde incidente ». Même question pour une « onde réfléchie ».
- e) Que vaut le coefficient de réflexion R défini comme le rapport des courants de probabilité des ondes réfléchies et incidentes ?
- f) Que vaut le courant de probabilité en $x > 0$? La probabilité de présence de la particule est-elle nulle dans la région $x > 0$?
- g) Calculer le déphasage de l'onde réfléchie par rapport à l'onde incidente.
- h) Que deviennent les relations trouvées en c) quand V_0 tend vers l'infini ? Les hypothèses de continuité faites en b) restent-elles vérifiées dans ce cas ?
- i) On considère maintenant le cas $E > V_0$. Calculer les coefficients de réflexion R et de transmission T pour des particules incidentes depuis $x = -\infty$, ainsi que $R+T$.
- j) Que deviennent R et T si on pose $\frac{n_1}{n_2} = \sqrt{\frac{E}{E - V_0}}$? Interpréter ce résultat par analogie avec la réflexion sur un dioptre en optique ?

3. Demi-tour devant un précipice

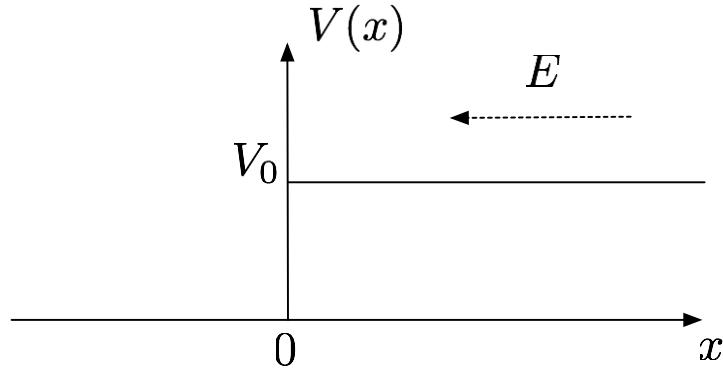


FIGURE 2. – Marche de potentiel avec une onde incidente de $x = +\infty$ d'énergie $E > V_0$.

On considère maintenant un faisceau monochromatique de particules de masse m émises par une source située en $x = +\infty$ (de la droite) pour le même potentiel en marche considéré dans l'exercice précédent (voir figure 2).

- a) Calculer le coefficient de réflexion R .
- b) Analyser le comportement du facteur de réflexion en fonction de l'énergie des particules $E \geq V_0$.
- c) Analyser le comportement pour $E \rightarrow V_0$ par valeur supérieure. Commenter en comparant avec le comportement de particules classiques.

4. Étalement du paquet d'onde

- a) À l'instant $t = 0$, la particule libre est décrite par un paquet d'onde $\psi(x)$ dont on ne précisera pas l'expression. On suppose seulement que sa transformée de Fourier $\hat{\psi}(k)$ est concentrée en $k \simeq k_0$. Le paquet d'onde évolue librement sur tout l'axe x .

On note $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ le Hamiltonien du système sans potentiel. Déterminer l'expression de $\hat{\psi}(p, t)$ à l'instant t à partir de $\hat{\psi}(p, 0)$.

- b) On supposera que la fonction d'onde $\hat{\psi}(p, t)$ est concentrée autour de la valeur p_0 . En développant l'énergie du système au premier ordre en p

$$E(p) \simeq E(p_0) + (p - p_0) \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right) |_{p=p_0}. \quad (11)$$

4. Étalement du paquet d'onde

En exprimant la fonction d'onde $\psi(t, x)$ comme la transformée de Fourier de $\hat{\psi}(p, t)$ et en utilisant les résultats de la PC2, déduisez en l'expression de $\psi(x, t)$ à l'instant t à partir de $\psi(x, 0)$. Que déduisez-vous de l'évolution de la fonction d'onde ?

- c) Même question que précédemment en poussant le développement jusqu'au second ordre en p , et en considérant cette fois-ci le cas particulier d'un paquet d'onde Gaussien discuté en PC2

$$\hat{\psi}(p, 0) = \frac{1}{(\pi\sigma^2\hbar^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\sigma^2\hbar^2}}. \quad (12)$$

Quelles conclusions tirez-vous ?

11. Premier devoir à la maison

12. Second devoir à la maison

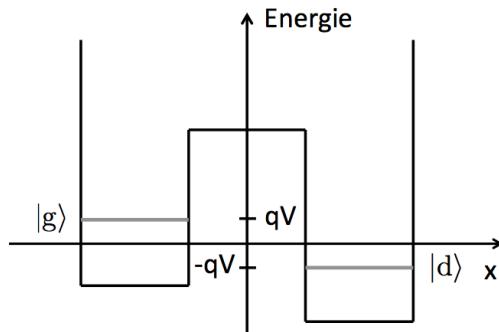
Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

donné le 10 juin 2015 - à rendre le 17 juin 2015

1. Effet tunnel résonnant et contrôle de la transmission d'un électron à travers une barrière

On considère deux boîtes quantiques que l'on décrit par deux puits semi-infinis couplés par une barrière tunnel. On s'intéresse au niveau d'énergie le plus élevé de chaque puits, d'énergie $E_0 = 0$. A l'aide d'électrodes on peut appliquer un potentiel électrostatique V sur le puits de droite et $-V$ sur le puits de gauche. On note $|g\rangle$ et $|d\rangle$ les états localisés respectivement dans les puits de gauche et de droite. On suppose $\langle g|d\rangle = 0$. On appelle $A > 0$ la constante de couplage tunnel. L'hamiltonien de couplage s'écrit $-A(|g\rangle\langle d| + |d\rangle\langle g|)$. On place un électron de charge $-q$ ($q > 0$) dans le puits de gauche.



- Écrire la matrice du hamiltonien dans la base $(|g\rangle, |d\rangle)$ lorsqu'une tension V est appliquée.
- Écrire H en fonction de $\cos 2\theta = qV/\sqrt{q^2V^2 + A^2}$ et $\sin 2\theta = -A/\sqrt{q^2V^2 + A^2}$.
- Trouver les énergies propres E_+ et E_- et les états propres de l'hamiltonien en fonction de $\cos \theta$ et $\sin \theta$.
- Tracer les énergies propres en fonction de qV .

12. Second devoir à la maison

- e) Quelle est la probabilité $P_d(t)$ de trouver l'électron dans le puits de droite après une durée t ?
- f) Que vaut la probabilité maximale de passage du puit de gauche vers le puits de droite et montrer que l'on peut contrôler le passage de l'électron à travers la barrière.
- g) Que vaut $P_d(t)$ pour $V = 0$ et $qV \gg A$.
- h) Expliquer comment on peut contrôler le passage de l'électron du puits de gauche vers celui de droite.

2. États quasi-classique d'un oscillateur harmonique

On considère l'oscillateur harmonique à une dimension, de masse m et de fréquence Ω de la PC5. On rappelle que le hamiltonien possède des états propres $|\phi_n\rangle$, associé aux énergies propres $E_n = \hbar\Omega(n + \frac{1}{2})$. On introduit les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+ , reliés à l'opérateur position \hat{x} par $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$. On rappelle finalement que $\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$.

On construit l'état (α est complexe)

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle .$$

Le but de l'exercice est de montrer que cet état reproduit le mouvement d'oscillation classique de l'oscillateur harmonique.

- a) Montrer que $|\alpha\rangle$ est état propre de \hat{a} avec la valeur propre α . Ce fait implique que $\langle\alpha|\hat{a}^+ = \langle\alpha|\alpha^*$.
- b) On prépare à $t = 0$ l'état $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$. Calculer l'état $|\psi(t)\rangle$ et montrer que l'évolution revient à remplacer α par $\alpha e^{-i\Omega t}$.
- c) Calculer $\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle$ et montrer qu'il correspond au mouvement classique.
- d) Calculer $\langle\psi(t)|\hat{x}^2|\psi(t)\rangle$ et en déduire l'écart-type Δx en fonction de \hbar , m et Ω . Le comparer à celui de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique vu en PC5.
- e) Pourquoi dit-on que l'état $|\alpha\rangle$ oscille sans se déformer ? On l'appelle « quasi-classique ». Pourquoi « quasi » ?

Deuxième partie .

**Corrigés des petites classes et
des devoirs**

13. Corrigé PC1 : Interférences et probabilités

Mécanique quantique (PHY 311)
 Pierre Vanhove
 PC du 15 avril 2015

1. Interférences, relation d'incertitude, ondes de matière

1.1. Nature ondulatoire des photons

- a) On considère une onde incidente monochromatique cohérente. La source est cohérente, c'est-à-dire que l'on peut négliger les effets de retard entre les différents points des sources. Seul le déphasage après les fentes importe. On reste aussi dans un voisinage de l'axe (Oz). Pour les fentes d'Young on fait diffuser des fronts d'onde d'ouverture angulaire $\alpha = \frac{a}{D}$. On observera des franges d'interférence lorsque $\alpha \geq \alpha_{cor}$ soit pour $a\lambda \geq hD$.

Les deux trous diffractent des ondes sphériques donc

$$E = E_0 (\cos(\omega t - kL_1) + \cos(\omega t - kL_2)) \quad (1)$$

avec

$$L_1 = \sqrt{D^2 + (x + \frac{a}{2})^2} \simeq D + \frac{(x + \frac{a}{2})^2}{2D} + O(1/D^2) \quad (2)$$

$$L_2 = \sqrt{D^2 + (x - \frac{a}{2})^2} \simeq D + \frac{(x - \frac{a}{2})^2}{2D} + O(1/D^2). \quad (3)$$

Le déphasage est donc donné par

$$\Delta\varphi = k(L_1 - L_2) \simeq \frac{kxa}{D} \quad (4)$$

L'interfrange est défini comme la variation de x lorsque φ varie de 2π donc

$$\Delta\varphi = 2\pi = \frac{kia}{D} \implies i = \frac{\lambda D}{a}. \quad (5)$$

- b) L'intensité du champ sur l'écran est donné par la valeur moyenne temporelle de la norme carrée du champ électrique (en fait du vecteur Poynting $\vec{\pi} = \vec{E} \times \vec{B}$ car

13. Corrigé PC1 : Interférences et probabilités

pour une onde électromagnétique $|B| = |E|$)

$$I \propto \langle |E|^2 \rangle_t = |E_0|^2 \langle |\cos(\omega t - kL_1) + \cos(\omega t - kL_2)|^2 \rangle_t. \quad (6)$$

Cette valeur moyenne est calculée par le détecteur sur des temps longs, $T_{\text{détecteur}} \sim 10^{-1} \text{ s}$, devant la période typique d'une onde lumineuse $T_{\text{onde}} \sim 10^{-4} \text{ s}$.

En utilisant que

$$\cos(\omega t - kL_1) + \cos(\omega t - kL_2) = 2 \cos\left(\omega t - k \frac{L_1 + L_2}{2}\right) \cos\left(k \frac{L_1 - L_2}{2}\right) \quad (7)$$

et que

$$\langle \cos(\omega t - x)^2 \rangle_t = \frac{1}{2} \quad (8)$$

on en déduit que

$$I \propto 2|E_0|^2 \left(\cos\left(\frac{\pi x}{i}\right) \right)^2. \quad (9)$$

c) La quantité de mouvement des photons incidents est

$$\vec{p}_{\text{incident}} = \hbar \vec{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \vec{e}_z = \frac{h}{\lambda} \vec{e}_z. \quad (10)$$

d) Les impulsions des photons transmis sont données par

$$\vec{p}_1 = \frac{h}{\lambda} \vec{e}_1; \quad \vec{e}_1 := \begin{pmatrix} \frac{x+\frac{a}{2}}{L_1} \\ 0 \\ \frac{D}{L_1} \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\vec{p}_2 = \frac{h}{\lambda} \vec{e}_2; \quad \vec{e}_2 := \begin{pmatrix} \frac{x-\frac{a}{2}}{L_2} \\ 0 \\ \frac{D}{L_2} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Bien sûr les vecteurs \vec{e}_1 et \vec{e}_2 sont de norme unité. Donc

$$p_x^1 = \frac{h}{\lambda} \frac{x + \frac{a}{2}}{L_1} \quad \text{et} \quad p_x^2 = \frac{h}{\lambda} \frac{x - \frac{a}{2}}{L_2} \quad (13)$$

donc

$$|\Delta p_x| := |p_x^1 - p_x^2| = \frac{h}{\lambda} \left(\frac{x + \frac{a}{2}}{L_1} - \frac{x - \frac{a}{2}}{L_2} \right) \simeq \frac{h}{\lambda} \frac{a}{D} \quad (14)$$

où nous avons utilisé que $L_1 \simeq L_2 \simeq D$ car l'écran est supposé être placé loin des fentes et que $D \gg x$.

e) La relation d'incertitude d'Heisenberg

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (15)$$

2. Loi de désintégration exponentielle

donne que

$$\Delta x \geq \frac{\lambda D}{4\pi a} = \frac{i}{4\pi} \simeq 0.0796 i. \quad (16)$$

Pour connaitre l'impulsion des particules il faut connaitre $\Delta p_{x,\text{écran}} \ll \Delta p$, et pour avoir des franges d'interférence il faut avoir $\Delta x_{\text{écran}} \ll i$. On voit donc que connaitre précisément l'impulsion déduit les franges car on suit la trajectoire classique de la particule.

1.2. Ondes de matière

- f) Pour calculer la longueur d'onde de de Broglie des atomes on utilise les relations sur l'impulsion

$$p = mv = \hbar k = \frac{h}{\lambda_{dB}} \implies \lambda_{dB} = \frac{h}{mv} = 1.03 \cdot 10^{-10} m = 1.03 \text{ Å}. \quad (17)$$

La longueur d'onde de de Broglie est environ d'un Ångström.

- g) L'interfrange mesurée est $i = \frac{\lambda_{dB} D}{a} = 0.824 \cdot 10^{-5} m$.

2. Loi de désintégration exponentielle

- a) Par définition la probabilité que la durée de vie soit supérieure à $t_1 + t_2$ s'écrit $F(t_1 + t_2) = P(t > t_1 + t_2) = P(t > t_1 + t_2 | t > t_1)P(t > t_1)$ comme le produit de la probabilité conditionnelle d'une durée de vie au-delà de l'instant $t_1 + t_2$ fois la probabilité de la durée de vie au delà de l'instant t_1 . Comme nous avons une loi sans vieillissement $P(t > t_1 + t_2 | t > t_1) = P(t > t_2)$. On trouve donc que $F(t_1 + t_2) = P(t > t_1)P(t > t_2) = F(t_1)F(t_2)$.
- b) On doit résoudre l'équation fonctionnelle $F(x + y) = F(x)F(y)$ pour tous $x, y \in \mathbb{R}^+$. Pour entier naturel n on a que $F(n) = F(n - 1)F(1)$ donc $F(n) = F(1)^n$. Pour tout nombre rationnel $r = \frac{p}{q} \in \mathbb{Q}$, $F(p) = F(rq) = F(r)^q = F(1)^p$ donc $F(r) = F(1)^r$. La loi de probabilité est une fonction continue, par densité des rationnels dans les réels on déduit que $F(x) = F(1)^x = \exp(-x/\tau)$ pour tout $x \in \mathbb{R}^+$. Comme la particule n'existe qu'à partir de l'instant t_0 , on applique ce résultat à $x = t - t_0$ et donc

$$F(t) = \begin{cases} e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} & t \geq t_0 \\ 0 & t < t_0 \end{cases}. \quad (18)$$

On remarque le temps caractéristique $\tau = -\log(F(1)) > 0$ car la probabilité satisfait à $0 < F(x) < 1$. On vérifie bien sûr la propriété d'absence de mémoire $P(t > t + t_0 | t > t_0) = P(t > t + t_0)/P(t > t_0) = F(t)/F(t_0) = \exp(-t/\tau)$ implique que le point d'origine importe peu.

13. Corrigé PC1 : Interférences et probabilités

- c) Pour une loi de probabilité $f(t)$ la valeur moyenne de la fonction $g(t)$ est donnée par

$$\langle g(t) \rangle := \int_0^{+\infty} g(t) f(t) dt. \quad (19)$$

On remarque que $\int_{t_0}^{+\infty} F(t) dt = \tau$. On calcule donc

$$\langle (t - t_0) \rangle := \int_{t_0}^{+\infty} (t - t_0) e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \frac{dt}{\tau} = \tau \int_0^{+\infty} x e^{-x} dx = \tau. \quad (20)$$

Pour le calcul de l'écart type on remarque que (en utilisant que $T = \tau$)

$$\langle (\Delta T)^2 \rangle := \langle (t - t_0 - \tau)^2 \rangle = \langle (t - t_0)^2 \rangle - 2\tau \underbrace{\langle (t - t_0) \rangle}_{\tau} + \tau^2 \underbrace{\langle 1 \rangle}_1 \quad (21)$$

$$= \langle (t - t_0)^2 \rangle - \tau^2. \quad (22)$$

Ainsi

$$\langle (\Delta T)^2 \rangle = -\tau^2 + \int_{t_0}^{+\infty} (t - t_0)^2 e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \frac{dt}{\tau} = -\tau^2 + \tau^2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-x} dx = \tau^2. \quad (23)$$

Donc la dispersion des événements $\Delta T = \tau$ est donnée par le temps caractéristique car le processus est sans mémoire.

- d) Par définition la probabilité $p(t) = \int_{t_0}^t w(x) dx$ et $q(t) = 1 - p(t) = \int_{t_0}^{+\infty} w(x) dx - \int_{t_0}^t w(x) dx = \int_t^{+\infty} w(x) dx$.
- e) La probabilité que la particule se désintègre entre t et $t + dt$ est donnée par $P(t < X < t + dt) = w(t)dt$. Mais cette quantité est la probabilité que la particule a vécue jusqu'à l'instant t et s'est désintégrée donc $P(t < X < t + dt) = q(t)P(t_0 < X < t_0 + dt)$ mais $P(t_0 < X < t_0 + dt) = w(t_0)dt$ par la propriété d'absence de mémoire. Ainsi $w(t)dt = q(t)w(t_0)dt$ donc $w(t) = w(t_0) \int_t^{+\infty} w(x) dx$. On résout cette équation en différentiant $w'(t) = -w(t_0)w(t)$ donc $w(t) = \exp(-(t - t_0)/\tau)$ avec $\tau = -\log w(t_0)$.
- f) Si on a N particules identiques indépendantes chacune suivant la loi $f(t)$ alors le nombre de particule en fonction du temps est donné par $N(t) = N f(t) = N_0 \exp(-(t - t_0)/\tau)$. Le temps de demi-vie est donné par $N(\delta + t_0) = N_0/2$ soit $\delta = \tau \ln 2$.
- g) Pour l'iode $\langle t \rangle_{\text{iode}} = \tau = \delta / \ln 2 = 11.57$ jours.

14. Corrigé PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

Mécanique quantique (PHY 311)
 Pierre Vanhove
 PC du 22 avril 2015

1. Propriétés générales de la transformation de Fourier

a) Par définition on a

$$f(ax) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{ikax} dx = \frac{1}{|a|\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}\left(\frac{k}{a}\right) e^{ikx} dx, \quad (1)$$

donc $f(ax)$ est la transformée de Fourier de $\tilde{f}(k/a)/|a|$.

b) On suppose que $\tilde{f}(k) = \tilde{f}^*(k) \in \mathbb{R}$ et $\tilde{f}(-k) = \tilde{f}(k)$ alors

$$\begin{aligned} f^*(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}^*(k) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(-k) e^{ikx} dx = f(x). \end{aligned} \quad (2)$$

On a aussi que

$$f(-x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(-k) e^{ikx} dx = f(x). \quad (3)$$

On en déduit donc que $f(x)$ est réelle et paire.

Si maintenant la transformée de Fourier est réelle $\tilde{f}^*(k) = \tilde{f}(k)$ et impaire $\tilde{f}(-k) = -\tilde{f}(k)$ alors on en déduit que $f^*(x) = -f(x)$ et $f(-x) = -f(x)$ donc $f(x) = ih(x)$ où $h(x)$ est une fonction réelle impaire.

c) Par intégration par partie on montre que

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}'(k) e^{ikx} dx = -ix \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{ikx} dx + \underbrace{\left[\tilde{f}(k) e^{ikx} \right]_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} = -ix f(x). \quad (4)$$

Les termes de bords s'annulent car on suppose que la fonction $\tilde{f}(k)$ est à décroissance rapide à l'infini (qui est une condition d'existence de la transformée de

14. Corrigé PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

Fourier). Par récurrence on montre aisément que

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}^{(n)}(k) e^{ikx} dx = (-ix)^n f(x). \quad (5)$$

d) On veut montrer l'identité de Parseval

$$\int_{\mathbb{R}} f_1^*(x) f_2(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_1^*(k) f_2(x) e^{-ikx} dk dx = \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_1^*(k) \tilde{f}_2(k) dk. \quad (6)$$

Où on a utilisé la définition de la transformée de Fourier inverse.

e) La transformée d'un produit de convolution est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_3(k) e^{ikx} dk &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_1(k') \tilde{f}_2(k-k') e^{ikx} dk dk' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_1(k') e^{ikx} dk \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}_2(k') e^{ik'x} dk' \\ &= f_1(x) f_2(x). \end{aligned} \quad (7)$$

2. Transformation de Fourier et inégalités de Heisenberg

a) On développe la fonctionnelle $I(\lambda)$

$$I(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} |k\tilde{f}(k)|^2 dk + \lambda \int_{\mathbb{R}} \left(k\tilde{f}(k) \frac{d\tilde{f}^*(k)}{dk} + k\tilde{f}^*(k) \frac{df(k)}{dk} \right) dk + \lambda^2 \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d\tilde{f}(k)}{dk} \right|^2 dk. \quad (8)$$

Par définition $(\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} |k\tilde{f}(k)|^2 dk$. Également $(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} |ixf(x)|^2 dx$ mais par le théorème de Plancherel nous avons que $(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} |d\tilde{f}(k)/dk|^2 dk$. Finalement

$$\int_{\mathbb{R}} \left(k\tilde{f}(k) \frac{d\tilde{f}^*(k)}{dk} + k\tilde{f}^*(k) \frac{df(k)}{dk} \right) dk = \left[k|\tilde{f}(k)|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} |\tilde{f}(k)|^2 dk = -1. \quad (9)$$

On remarque que cette fonctionnelle est un polynôme de degré deux en λ ne prenant que des valeurs positives

$$I(\lambda) = (\Delta k)^2 + \lambda^2 (\Delta x)^2 - \lambda \geq 0 \quad \text{pour tout } \lambda, \quad (10)$$

donc le discriminant de cette équation du second ordre est négatif ou nul

$$(-1)^2 - 4(\Delta x \Delta k)^2 \leq 0 \iff \Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}. \quad (11)$$

b) Si $\Delta x \Delta k = 1/2$ on a une racine double $\lambda_0 = 1/(2(\Delta x)^2) = 2(\Delta k)^2$ telle que

2. Transformation de Fourier et inégalités de Heisenberg

$I(\lambda_0) = 0$. Donc

$$k\tilde{f}(k) + \lambda_0 \frac{d\tilde{f}(k)}{dk} = 0 \quad (12)$$

Ce qui s'intègre en une Gaussienne que l'on prend centrée (symétrique) par rapport à l'origine

$$\tilde{f}(k) = \tilde{f}_0 e^{-\frac{k^2}{2\lambda_0}}. \quad (13)$$

La transformée de Fourier d'une Gaussienne est une Gaussienne

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk = \frac{\tilde{f}_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ikx - \frac{k^2}{2\lambda_0}} dk \\ &= \frac{\tilde{f}_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\lambda_0 x^2}{2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\tilde{k}^2}{2\lambda_0}} d\tilde{k} = \sqrt{\lambda_0} \tilde{f}_0 e^{-\frac{\lambda_0 x^2}{2}}. \end{aligned} \quad (14)$$

On a fait le changement de variable suivant

$$ikx - \frac{k^2}{2\lambda_0} = -\frac{1}{2\lambda_0} (k - ix\lambda_0) - \frac{\lambda_0 x^2}{2} \quad (15)$$

et l'on a posé $\tilde{k} = k - ix\lambda_0$. La condition de normalisation de la fonction $\tilde{f}(k)$ implique que

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |\tilde{f}(k)|^2 dk = |\tilde{f}_0|^2 \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{k^2}{\lambda_0}} dk = \sqrt{\pi\lambda_0} |\tilde{f}_0|^2. \quad (16)$$

Comme on peut choisir \tilde{f}_0 réel positif (une phase constante n'est pas physiquement observable), cette équation détermine la normalisation.

c) Pour la réciproque, on calcule

$$(\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} |k\tilde{f}(k)|^2 dk = \tilde{f}_0^2 \int_{\mathbb{R}} k^2 e^{-\frac{k^2}{\lambda_0}} dk = \frac{\sqrt{\pi} \tilde{f}_0^2 \lambda_0^{\frac{3}{2}}}{2}. \quad (17)$$

En utilisant la condition de normalisation de la fonction calculée dans la question précédente on trouve

$$(\Delta k)^2 = \frac{\lambda_0}{2}. \quad (18)$$

Pour calculer $(\Delta x)^2$ on a

$$(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} |xf(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d\tilde{f}(k)}{dk} \right|^2 dk = \frac{1}{\lambda_0^2} \tilde{f}_0^2 \int_{\mathbb{R}} k^2 e^{-\frac{k^2}{\lambda_0}} dk = \frac{(\Delta k)^2}{\lambda_0^2}. \quad (19)$$

On trouve donc

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\lambda_0}}; \quad \Delta k = \sqrt{\frac{\lambda_0}{2}}; \quad \Delta x \Delta k = \frac{1}{2}. \quad (20)$$

14. Corrigé PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

d) Comme l'impulsion est donnée par $p = \hbar k$ on en déduit que $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

3. Évolution du paquet d'onde libre

a)

$$\tilde{\psi}(t, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t, x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx. \quad (21)$$

La densité de probabilité est $|\tilde{\psi}(t, p)|^2$.

L'équation de Schrödinger s'écrit

$$E\tilde{\psi}(t, p) = \hat{H}\tilde{\psi}(t, p). \quad (22)$$

Comme nous avons une particule libre

$$\hat{H}\tilde{\psi}(t, p) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(t, p) \quad (23)$$

donc

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (24)$$

b) Nous avons

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(t, x)|^2 dx, \quad (25)$$

et

$$\langle p \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p|\tilde{\psi}(t, p)|^2 dp = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\psi(t, x)}{\partial x} \psi^*(t, x) dx, \quad (26)$$

où nous avons utilisé la propriété d'isométrie et que la transformée Fourier de $p\tilde{\psi}(t, p)$ est $-i\hbar\partial_x\psi(t, x)$. (Ici nous travaillons avec $p = \hbar k$ d'où un facteur \hbar).

c)

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d|\psi(t, x)|^2}{dt} dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\frac{d\psi(t, x)}{dt} \psi^*(t, x) + \frac{d\psi^*(t, x)}{dt} \psi(t, x) \right) dx. \end{aligned} \quad (27)$$

Comme pour une particule libre

$$i\hbar \frac{d\psi(t, x)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(t, x)}{\partial x^2}, \quad -i\hbar \frac{d\psi^*(t, x)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi^*(t, x)}{\partial x^2}. \quad (28)$$

donc

$$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\frac{\partial^2\psi(t, x)}{\partial x^2} \psi^*(t, x) - \frac{\partial^2\psi^*(t, x)}{\partial x^2} \psi(t, x) \right) dx$$

3. Évolution du paquet d'onde libre

$$\begin{aligned}
&= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \psi(t, x)}{\partial x} \psi^*(t, x) - \frac{\partial \psi^*(t, x)}{\partial x} \psi(t, x) \right) dx \\
&= -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial x} \psi^*(t, x) dx. \tag{29}
\end{aligned}$$

où nous avons fait des intégrations par parties. On reconnaît dans la dernière ligne le définition de $\langle p \rangle(t)$ donc

$$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \frac{\langle p \rangle(t)}{m} \tag{30}$$

On remarquera que $d\langle x \rangle(t)/dt$ est donné par l'intégrale du courant de probabilité étudié dans le premier devoir à la maison.

- d) Pour une particule dans un potentiel $V(x)$ le même manipulations s'appliquent car le potentiel est réel et l'on trouve la même relation $d\langle x \rangle(t)/dt = \langle p \rangle(t)/m$.

14. Corrigé PC2 : Transformée de Fourier et relation d'incertitude

15. Corrigé PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove
PC du 6 mai 2015

2. Conditions de raccordement à l'interface d'un potentiel discontinu.

- a) On considère une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger (à une dimension) de la forme

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}. \quad (1)$$

L'équation de Schrödinger donne que

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hbar\omega \psi(x, t) = E \psi(x, t) \quad (2)$$

donc $E = \hbar\omega$.

- b) La fonction d'onde est alors continue (ce qui est une condition nécessaire pour la continuité de la densité de probabilité) et la dérivée est continue. La continuité de la dérivée implique la continuité du courant de probabilité. Pour voir cela il suffit d'intégrer l'équation de Schrödinger de part et d'autre de la discontinuité

$$\begin{aligned} E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x). \end{aligned} \quad (3)$$

Comme la fonction d'onde est continue, et que le potentiel est continu les intégrales tendent vers 0 lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. Donc $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) = 0$.

- c) Dans ce cas φ et φ' sont continues, que l'on peut voir en intégrant l'équation de Schrödinger de part et d'autre d'une discontinuité. Mais φ'' est discontinue, car si le potentiel varie l'énergie cinétique doit varier. À énergie constante cela implique une discontinuité dans la dérivée seconde.
- d) Si le potentiel est une fonction delta de Dirac $V(x) = K\delta(x)$ alors φ' n'est plus

15. Corrigé PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

continue car dans ce cas

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi(x) = K \psi(0). \quad (4)$$

donc $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) = -\frac{2mK}{\hbar^2} \psi(0)$. Mais φ est toujours continue.

3. Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.

- a) Dans chacune des régions la fonction d'onde $\psi(x, t)$ satisfait l'équation de Schrödinger d'une particule libre dans un potentiel constant ou nul

$$H\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = E\psi(x, t) \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \quad (5)$$

$$H\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \psi(x, t) = E\psi(x, t) \quad \text{pour } 0 < x < a. \quad (6)$$

Pour une solution stationnaire donnée par une onde plane $\psi(x, t) = \exp(ikx - iEt/\hbar)$ on a donc

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \quad (7)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a. \quad (8)$$

Soit

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \quad (9)$$

$$ik = q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{pour } 0 < x < a. \quad (10)$$

On a donc dans chacune des régions en posant $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} && \text{si } x < 0 \\ \varphi_{II}(x) &= C e^{-qx} + D e^{+qx} && \text{si } 0 < x < a \\ \varphi_{III}(x) &= F e^{ikx} + G e^{-ikx} && \text{si } x > a \end{aligned} \quad (11)$$

- b) On a six constantes inconnues. On a deux fois deux équations de continuité (pour la fonction d'onde et sa dérivée). Il nous reste donc $6 - 4 = 2$ inconnues. En choisissant la normalisation de $\psi(t, x)$ on peut toujours poser $A = 1$ ce qui nous laisse une inconnue.
- c) Si on veut une particule venant de $-\infty$, il faut poser $G = 0$. Car ce coefficient correspond à une particule venant de la droite $x = +\infty$.
- d) Par définition $J_I = |A|^2$, $J_R = |B|^2$ et $J_T = |F|^2$ donc $R = |B|^2$ et $T = |F|^2$.

3. Barrière de potentiel à une dimension - Effet tunnel.

e) La continuité de φ implique les relations suivantes

$$A + B = C + D \quad (x = 0) \quad (12)$$

$$Ce^{-qa} + De^{qa} = Fe^{ika} \quad (x = a). \quad (13)$$

La continuité de φ' implique

$$ik(A - B) = q(-C + D) \quad (x = 0) \quad (14)$$

$$q(-Ce^{-qa} + De^{qa}) = ikFe^{ika} \quad (x = a). \quad (15)$$

La solution de ce système de quatre équations à cinq inconnues est donnée par

$$\frac{4ik}{q}A = Fe^{ika} \left(e^{-qa} \left(1 + i\frac{k}{q} \right)^2 - e^{qa} \left(1 - i\frac{k}{q} \right)^2 \right) \quad (16)$$

$$-\frac{4ik}{q}B = Fe^{ika} \left| 1 + i\frac{k}{q} \right|^2 (e^{-qa} - e^{qa}) \quad (17)$$

$$2Ce^{-qa} = Fe^{ika} \left(1 - i\frac{k}{q} \right) \quad (18)$$

$$2De^{qa} = Fe^{ika} \left(1 + i\frac{k}{q} \right). \quad (19)$$

Ainsi

$$F = \frac{4ik}{q} \frac{e^{-ika}}{e^{-qa} \left(1 + i\frac{k}{q} \right)^2 - e^{qa} \left(1 - i\frac{k}{q} \right)^2} A. \quad (20)$$

On en déduit ainsi que le coefficient de transmission est donné par

$$T = \frac{16k^2}{q^2} \frac{1}{\left| e^{-qa} \left(1 + i\frac{k}{q} \right)^2 - e^{qa} \left(1 - i\frac{k}{q} \right)^2 \right|^2} \quad (21)$$

$$= \frac{(2qk)^2}{(2qk)^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2(qa)}. \quad (22)$$

De l'expression pour B on déduit le facteur de réflexion

$$R = \frac{4 \sinh(aq)^2}{\left| e^{-qa} \left(1 + i\frac{k}{q} \right)^2 - e^{qa} \left(1 - i\frac{k}{q} \right)^2 \right|^2} \quad (23)$$

$$= \frac{\sinh^2(qa)(q^2 + k^2)^2}{(2qk)^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2(qa)}. \quad (24)$$

On remarquera que $R + T = 1$.

15. Corrigé PC3 : Barrière de potentiels et effet tunnel

f) Dans la limite $qa \gg 1$ on trouve que

$$T \simeq \frac{16k^2 q^2 e^{-2qa}}{(k^2 + q^2)^2} \simeq 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2qa}. \quad (25)$$

g) Application numérique :

- i) Avec les valeurs données on trouve pour l'électron avec $q = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar} = \sqrt{2mc^2/\hbar c} = 5.12 \cdot 10^9 m^{-1}$, donc $qa \simeq 0.5$. Comme $q = k$ on trouve que $T = 0.777$.
- ii) Pour le proton de même énergie, comme il est près de 2000 fois plus lourd que l'électron alors $q = 2.196 \cdot 10^{11} m^{-1}$ et comme $q = k$ on trouve que $T \simeq 3.4 \cdot 10^{-19}$ et $R \simeq 1$. Le proton est quasiment totalement réfléchi par la barrière.

4. Application à la marche de potentiel à une dimension.

On prend la limite $a \rightarrow \infty$ avec k fixe dans les solutions à l'exercice précédent. On trouve donc que $T \rightarrow 0$ et $R = 1 - T \rightarrow 1$.

Dans la région $x > 0$ le profil de la fonction d'onde est

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{-qx} + De^{qx}. \quad (26)$$

Pour être normalisable la fonction d'onde doit rester finie pour $x \rightarrow +\infty$, donc $D = 0$. La fonction d'onde pénètre dans la barrière sur une épaisseur limitée de l'ordre de $1/q = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E)}$.

5. Résonance de diffusion

- a) Si $V_0 < E$ alors $q = iq'$ et nous avons une onde plane se propageant dans la région $0 < x < a$.
- b) On trouve en posant $q = iq'$ que

$$T = \frac{4q'^2 k^2}{4k^2 q'^2 + (k^2 - q'^2)^2 \sin(q'a)^2} = \frac{4(E - V_0)E}{4(E - V_0)E + V_0^2 \sin(q'a)^2}. \quad (27)$$

- c) Si $\sin(q'a)^2 = 0$ alors $T = 1$ et la transmission est totale. Ceci arrive lorsque $q'a = n\pi$ avec $n \in \mathbb{Z}$. Soit pour $\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar = n\pi$ donc $E = V_0 + \frac{(\hbar n\pi)^2}{2ma^2}$.
- d) En appliquant les formules de l'exercice précédent avec $q = iq'$ on trouve que

$$R = \frac{(k^2 - q'^2)^2 \sin(q'a)^2}{4k^2 q'^2 + (k^2 - q'^2)^2 \sin(q'a)^2} = 1 - T. \quad (28)$$

16. Corrigé PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 13 mai 2015

1. Évolution temporelle

On considère la fonction d'onde $\psi(t, x) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(x)$ à laquelle on applique l'équation de Schrödinger

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} &= \sum_n i\hbar c'_n(t) \varphi_n(x) \\ &= \hat{H}\psi(t, x) = \sum_n E_n c_n(t) \varphi_n(x). \end{aligned} \quad (1)$$

Comme les φ_n composent une base orthonormée alors pour chaque n on a

$$i\hbar c'_n(t) = E_n c_n(t) \iff c_n(t) = c_n(0) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (2)$$

2. Invariance par parité

- a) On considère $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ avec $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$. Pour $\psi(-\mathbf{r})$ l'Hamiltonien est $\hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(-\mathbf{r})$ puisque $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ alors $\hat{H}' = \hat{H}$ donc $\psi(-\mathbf{r})$ a la même énergie que $\psi(\mathbf{r})$.
- b) On écrit $\psi(\mathbf{r}) = \psi_+(\mathbf{r}) + \psi_-(\mathbf{r})$ avec $\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = (\psi(\mathbf{r}) \pm \psi(-\mathbf{r}))/2$. Comme $\hat{H}\psi(\pm\mathbf{r}) = E\psi(\pm\mathbf{r})$ alors $\psi_{\pm}(\mathbf{r})$ sont aussi état propres de l'hamiltonien avec la même énergie. Si ψ_+ et ψ_- sont non nulles la dégénérescence est deux. C'est-à-dire que l'espace vectoriel des solutions est de dimensions deux
- c) Si la dégénérescence est de un, c'est-à-dire que la dimension de l'espace vectoriel des solutions est de un. Il faut alors que soit ψ_+ est nulle et la fonction d'onde est impaire, soit ψ_- est nulle et la fonction d'onde est paire.
- d) Dans le cours 3 les états du puits carré infini ont été donnés. Il faut résoudre l'équation $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_n(x) = E_n\psi_n(x)$ pour $x \in [0, L]$ avec pour conditions aux limites

$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$. Les fonctions d'ondes sont $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$. Le système est symétrique par rapport au milieu du puits $x = L/2$. Donc les fonctions d'ondes satisfont à la propriété de parité $\psi_n(L-x) = (-1)^{n-1}\psi_n(x)$. Ainsi ψ_- est nulle pour n impair et ψ_+ nulle pour n paire.

3. États isotropes de l'atome d'hydrogène

Cet exercice traite de l'atome d'hydrogène selon la méthode suivie par Niels Bohr il y a 100 ans. La représentation des atomes avec des électrons sur des orbites circulaires bien qu'utile à Niels Bohr ne correspond pas à la réalité car les orbitales atomiques sont des nuages d'électrons.

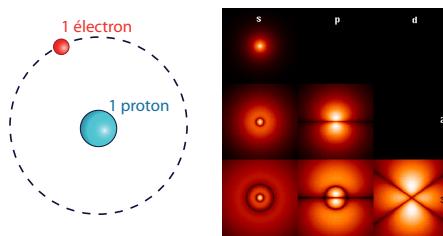


FIGURE 1. – À gauche la représentation de l'atome de Niels Bohr, où l'électron évolue sur une orbite circulaire “classique”. À droite une représentation des orbitales atomiques montrant la configuration de la fonction d'onde de l'électron.

On pourra consulter l'exercice 5, chapitre 4 du livre de J.-L. Basdevant et J. Dalibard (corrigé en page 470).

a) b) Avec $\psi(x) = Cx \exp(-x/a_0)$ dans l'Hamiltonien $\hat{H} = -\hbar^2/(2m)\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\alpha\hbar c}{x}$ donne

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2a_0^2 m} + \left(\frac{\hbar}{a_0 m} - \alpha c\right) \frac{\hbar}{x}\right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (3)$$

Puisque que l'énergie est constante, il faut assurer l'annulation de la dépendance en x . Ce qui donne

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha} = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m q^2} = 0.53 \text{ \AA}. \quad (4)$$

C'est le rayon de Bohr, et l'énergie est donnée par

$$-E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (5)$$

c) La constante de normalisation est donnée par

3. États isotropes de l'atome d'hydrogène

$$1 = \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx = C^2 a_0^3 \int_0^\infty x^2 e^{-2x} dx = C^2 \frac{a_0^3}{4} \quad (6)$$

d) On calcule

$$\left\langle \frac{1}{x} \right\rangle = \int_0^\infty \frac{1}{x} |\psi(x)|^2 dx = C^2 \int_0^\infty x e^{-\frac{2x}{a_0}} dx = \frac{1}{a_0} \quad (7)$$

Donc la valeur moyenne du potentiel est

$$V_c = \left\langle -\frac{\alpha \hbar c}{x} \right\rangle = -\frac{\alpha \hbar c}{a_0} = -\frac{\hbar^2}{ma_0^2} = 2E_1 \quad (8)$$

On peut vérifier que la valeur moyenne de l'énergie cinétique est donnée par

$$E_c = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int_0^\infty \psi(x)(H - V(x))\psi^*(x)dx = E_1 - 2E_1 = -E_1 \quad (9)$$

On trouve donc que $2E_c + V_c = 0$ qui est une version du théorème du Viriel pour les systèmes de mécanique quantique.

Ce théorème, énoncé par Rudolf Clausius en 1870, dit que pour un système en équilibre dynamique l'énergie cinétique est égale à la moitié de l'opposé de l'énergie potentielle : $2E_c + E_p = 0$. Le résultat obtenu dans cet exercice peut être démontré en toute généralité en mécanique quantique.

e) En posant $x = a_0\xi$ le Hamiltonien devient

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \right). \quad (10)$$

En remplaçant $\psi_n(\xi) = \exp(-\xi\lambda_n)y_n(\xi)$ dans l'équation de Schrödinger $\hat{H}\psi_n(\xi) = E_n\psi_n(\xi)$ on obtient :

$$\frac{d^2y_n}{d\xi^2} - 2\lambda_n \frac{dy_n}{d\xi} + \frac{2}{\xi}y_n = y_n \left(\lambda_n^2 - \frac{E_n}{E_1} \right) = 0. \quad (11)$$

Où l'on a utilisé que $\lambda_n^2 = E_n/E_1$.

f) En injectant le développement en série de $y_n(\xi)$ dans l'équation différentielle (11) on obtient

$$\sum_{q \geq 0} c_q ((q+s)(q+s-1)\xi^{q+s-2} - 2(\lambda_n(q+s)-1)\xi^{q+s-1}) = 0 \quad (12)$$

$$c_0 s(s-1)\xi^{s-2} + \sum_{q \geq 0} \xi^{q+s-1} (c_{q+1}(q+s)(q+s+1) - 2c_q(\lambda_n(q+s)-1)) = 0.$$

16. Corrigé PC4 : Mouvement de particules quantiques à une dimensions : états liés

Ce qui implique le système d'équations

$$\begin{aligned} c_0 s(s-1) &= 0 \\ c_{q+1}(q+s)(q+s+1) &= 2c_q(\lambda_n(q+s)-1). \end{aligned} \quad (13)$$

Comme $c_0 \neq 0$ et comme y_n doit tendre vers 0 quand ξ tend vers 0, on a forcément $s = 1$.

Ce qui donne pour les autres termes

$$q(q+1)c_q = 2(q\lambda_n - 1)c_{q-1}. \quad (14)$$

Si le second terme de cette équation ne s'annule jamais, la série est vraiment infinie avec $c_q/c_{q-1} \sim 2\lambda_n/q$ quand $q \rightarrow \infty$. Or $\exp(2\xi\lambda_n) = \sum_{q=0}^{\infty} d_q \xi^q$ avec $d_q = (2\lambda_n)^q/q!$, donc $d_q/d_{q-1} = 2\lambda_n/q$. Donc $y_n(\xi)$ se comporte comme $\exp(2\xi\lambda_n)$ quand $\xi \rightarrow \infty$. Dans ce cas, $\psi_n(\xi)$ se comporte comme $\exp(\xi\lambda_n)$ quand $\xi \rightarrow \infty$, ce qui ne peut pas convenir. Il y a donc forcément un entier $q = n$ pour lequel le second membre de (14) s'annule et donc $\lambda_n = 1/n$, ce qui donne $E_n = E_1/n^2$. Il y a donc un nombre infini de niveaux d'énergie.

n correspond à l'ordre de l'orbitale atomique. L'expression de la fonction d'onde radiale sphérique est

$$\psi_n(x) = L_n^{(-1)} \left(\frac{xn}{2a_0} \right) e^{-\frac{x}{na_0}}, \quad (15)$$

avec $L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha})$ les polynômes de Laguerre.

Nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour le nombre angulaire $l = 0$ correspondant à une fonction d'onde sphérique.

17. Corrigé PC5 : L'oscillateur harmonique

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 27 mai 2015

1. Notations de Dirac et relations de commutation dans l'espace des états

- a) On vérifie aisément que pour $\lambda \in \mathbb{C}$

$$\langle \chi | (|\phi_1\rangle + \lambda |\phi_2\rangle) = \chi(|\phi_1\rangle + \lambda |\phi_2\rangle) = \langle \chi | \phi_1 \rangle + \lambda \langle \chi | \phi_2 \rangle \quad (1)$$

et par conjugaison complexe que

$$(\langle \phi_1 | + \lambda \langle \phi_2 |) |\chi\rangle = (\langle \chi | (|\phi_1\rangle + \lambda |\phi_2\rangle))^* = (\langle \chi | \phi_1 \rangle + \lambda \langle \chi | \phi_2 \rangle)^* = \langle \phi_1 | \chi \rangle + \lambda^* \langle \phi_2 | \chi \rangle \quad (2)$$

Bien sûr ces propriétés sont évidentes si l'on utilise la représentation intégrale $\langle \chi | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} (\chi(x))^* \phi(x) dx$.

- b) Si $\lambda \in \mathbb{C}$ alors au ket $|\lambda \psi\rangle$ alors pour tout bra $\langle \chi |$ on a $\langle \chi | \lambda \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} (\chi(x))^* \lambda \psi(x) dx = \lambda \int_{\mathbb{R}} (\chi(x))^* \psi(x) dx = \lambda \langle \chi | \psi \rangle$. Donc $|\lambda \psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$. En utilisant que $(|\lambda \psi\rangle)^\dagger = \langle \lambda \psi |$ et que $(|\lambda \psi\rangle)^\dagger = \lambda^* \langle \psi |$ on trouve donc que $\langle \lambda \psi | = \lambda^* \langle \psi |$.
- c) On considère $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$. Comme pour tout bra $\langle \chi |$ on a $\langle \chi | \phi \rangle = (\langle \phi | \chi \rangle)^*$ et que $\langle \chi | \phi \rangle = \langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle$ on en déduit que $\langle \phi | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger$.
- d) On applique le résultat précédent à $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ et $|\psi\rangle = \hat{B}|\chi\rangle$ pour tout $|\chi\rangle$. Alors $\langle \phi | = \langle \chi | (\hat{A} \cdot \hat{B})^\dagger$ mais c'est aussi $\langle \psi | \hat{A}^\dagger = \langle \chi | \hat{B}^\dagger \cdot \hat{A}^\dagger$.
- e) i) Puisque $\langle \chi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \chi(x)^* x \psi(x) dx$ avec $x \in \mathbb{R}$ clairement \hat{x} est hermitien. Pour \hat{p} on raisonne de manière équivalente dans l'espace des p où l'on a $\langle \chi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\chi}(p)^* p \tilde{\psi}(p) dp$ avec $p \in \mathbb{R}$.
- ii) On calcule $\langle \chi | [\hat{x}, \hat{p}] | \psi \rangle = \langle \chi | \hat{x} \cdot \hat{p} | \psi \rangle - \langle \chi | \hat{p} \cdot \hat{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \chi(x)^* (x \frac{\hbar}{i} \partial_x - \frac{\hbar}{i} \partial_x x) \psi(x) dx = i\hbar \int_{\mathbb{R}} \chi(x)^* \psi(x) dx$. Vrai pour tous bra et ket donc vrai comme opérateur.

2. L'oscillateur harmonique

a) Comme $\hat{H}_0\phi(x) = E\phi(x)$ alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{m\Omega^2}{2} \phi(x) = E\phi(x) \quad (3)$$

b) L'analyse dimensionnelle indique que

$$\left[\frac{p^2}{2m} \right] = [m\Omega^2 x^2] \quad (4)$$

Comme $[p] = [\hbar/x]$ on en déduit que

$$\left[\sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} x \right] = 1 \quad (5)$$

donc \hat{X} et sans dimension. Puisque

$$\left[\frac{p}{\sqrt{m\Omega\hbar}} \right] = \left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}} \frac{1}{x} \right] = 1 \quad (6)$$

on a que \hat{P} est sans dimension.

L'Hamiltonien réduit $\hat{H} = \hat{H}_0/(\hbar\Omega)$ est simplement donné par

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2). \quad (7)$$

Considérons le commutateur

$$[\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}] = \frac{i\hbar}{\hbar} = i \quad (8)$$

c) On a

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \right)^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X}^\dagger - \hat{P}^\dagger) = \hat{a}^\dagger \quad (9)$$

où nous avons utilisé que \hat{X} et \hat{P} sont hermitiens comme montré dans l'exercice 1.

On montre que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = -i \frac{[\hat{X}, \hat{P}] - [\hat{P}, \hat{X}]}{2} = -i[\hat{X}, \hat{P}] = 1 \quad (10)$$

On a aussi que

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger \hat{a}^2 - \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a} \quad (11)$$

et

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (12)$$

On considère maintenant

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{\hat{X}^2 + \hat{P}^2}{2} + \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] = \hat{H} - \frac{1}{2} \quad (13)$$

où l'on a utilisé que $[\hat{X}, \hat{P}] = i$.

d) i) On considère

$$|\hat{a}|\phi_\nu\rangle|^2 = \langle\phi_\nu|\hat{a}^\dagger \hat{a}|\phi_\nu\rangle = \nu\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle = \nu \quad (14)$$

où l'on a utilisé que $(\hat{a}|\phi_\nu\rangle)^\dagger = \langle\phi_\nu|\hat{a}^\dagger$ et ϕ_ν est normée $\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle = 1$. Donc $\nu \geq 0$. Si $\nu = 0$ la norme est nulle donc $\hat{a}|\phi_\nu\rangle = 0$.

ii) La norme est donnée par

$$|\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle|^2 = \langle\phi_\nu|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle = \langle\phi_\nu|(1 + \hat{a}^\dagger \hat{a})|\phi_\nu\rangle = (1 + \nu)\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle = (1 + \nu) \quad (15)$$

iii) En utilisant la relation de commutation entre a et \hat{N} on a

$$\hat{N}\hat{a}|\phi_\nu\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\phi_\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\phi_\nu\rangle \quad (16)$$

iv) On raisonne par l'absurde et par récurrence. Si on a un $|\phi_\nu\rangle$ avec les propriétés ci-dessus alors $|\phi_{\nu-1}\rangle$ satisfait les mêmes propriétés avec la valeur propre $\nu - 1$. Si ν n'est pas entier il existe un entier n_0 tel que $|\phi_{\nu-n_0}\rangle$ aura la valeur propre $\nu - n_0 < 0$ pour \hat{N} . Mais on a démontré que les valeurs propres de l'opérateur nombre \hat{N} sont positives ou nulles. Donc ν est un entier naturel n_0 .

e) La relation de commutation entre a^\dagger et \hat{N} donne

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|\phi_n\rangle = (n + 1)|\phi_n\rangle \quad (17)$$

On voit donc que tout $n \geq 0$ est autorisé comme valeur propre de l'opérateur nombre \hat{N} .

L'opérateur \hat{a} s'interprète comme un opérateur de destruction de quanta et l'opérateur \hat{a}^\dagger comme un créateur de quanta.

f) L'état fondamental est l'état à l'énergie la plus basse. Comme l'énergie (réduite) est donnée par $n + 1/2$ avec $n \geq 0$, l'état fondamental est caractérisé par $n = 0$.

Comme $n = 0$ on a alors que $\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$.

17. Corrigé PC5 : L'oscillateur harmonique

Si $\langle \chi |$ est un bra arbitraire alors

$$0 = \langle \chi | \hat{a} | \phi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \hat{a} \phi_0(x) dx \quad (18)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \phi_0(x) dx \quad (19)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{m\Omega\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_0(x) dx \quad (20)$$

Comme cette intégral est nulle pour tout χ alors

$$\left(\sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{m\Omega\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_0(x) = 0 \quad (21)$$

on en déduit que $\phi_0(x)$ satisfait l'équation différentielle

$$\phi'_0(x) + \frac{m\Omega}{\hbar} x \phi_0(x) = 0 \quad (22)$$

La solution est la gaussienne

$$\phi_0(x) = \lambda e^{-\frac{m\Omega}{2\hbar} x^2} \quad (23)$$

La constante λ est fixée par la condition de normalisation

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_0(x)|^2 dx \implies \lambda = \left(\frac{m\Omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (24)$$

On remarquera qu'il n'y a qu'une seule solution. Donc le fondamental n'est pas dégénéré.

- i) On a montré que $\hat{N}(\hat{a}|\phi_n\rangle) = (n-1)(\hat{a}|\phi_n\rangle)$ mais on a aussi que $\hat{N}|\phi_{n-1}\rangle = (n-1)|\phi_{n-1}\rangle$. Les niveaux étant non dégénérés (voir plus bas pour des précisions) on en déduit que $\hat{a}|\phi_n\rangle = \lambda|\phi_{n-1}\rangle$.

$$\langle \phi_n | \hat{N} | \phi_n \rangle = n \langle \phi_n | \phi_n \rangle \quad (25)$$

$$= |\hat{a}|\phi_n\rangle|^2 = |\lambda|^2 \langle \phi_{n-1} | \phi_{n-1} \rangle \quad (26)$$

donc $|\lambda|^2 = n$ donc $\lambda = \sqrt{n}$.

On procède de même pour $\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle$ pour en déduire que $\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$.

Remarque sur la dégénérescence des niveaux d'énergie. On a vu que l'action de n opérateur \hat{a} sur un état $|\phi_n\rangle$ donne $|\phi_0\rangle$. On a vu que le fondamental n'est pas dégénéré donc les niveaux excités ne peuvent pas être dégénérées.

2. L'oscillateur harmonique

ii) Comme $\hat{a}^\dagger |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle$ alors

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\phi_0\rangle \quad (27)$$

ou en représentation x

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{m\Omega\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \phi_0(x) \quad (28)$$

iii) On peut aisément inverser les équation exprimant \hat{a} et \hat{a}^\dagger en fonction de \hat{X} et \hat{P} pour obtenir

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) ; \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) . \quad (29)$$

On remarque que

$$\hat{X} |\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle) \quad (30)$$

et

$$\hat{P} |\phi_n\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle) \quad (31)$$

On a aussi la relation d'orthogonalité $\langle \phi_n | \phi_{n-1} \rangle = 0$. Donc On a alors que

$$\langle \phi_n | \hat{X} | \phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} \langle \phi_n | \phi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} \langle \phi_n | \phi_{n-1} \rangle) = 0 \quad (32)$$

ce qui montre que la fonction d'onde est centrée en zéro. De même la valeur moyenne de \hat{P} est nulle. On a que

$$\langle \phi_n | \hat{X}^2 | \phi_n \rangle = (\langle \phi_n | \hat{X}) (\hat{X} | \phi_n \rangle) = n + \frac{1}{2} \quad (33)$$

ainsi que

$$\langle \phi_n | \hat{P}^2 | \phi_n \rangle = (\langle \phi_n | \hat{P}) (\hat{P} | \phi_n \rangle) = n + \frac{1}{2} \quad (34)$$

Donc dans l'état $|\phi_n\rangle$

$$\Delta X = \Delta P = n + \frac{1}{2} \quad (35)$$

et en revenant aux opérateurs \hat{x} et \hat{p}

$$\Delta x \Delta p = \hbar (n + \frac{1}{2}) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (36)$$

Seul le fondamental, pour lequel $n = 0$, sature l'inégalité d'Heisenberg.

17. Corrigé PC5 : L'oscillateur harmonique

18. Corrigé PC6 : Expérience de Stern et Gerlach

Mécanique quantique (PHY 311)
 Pierre Vanhove
 PC du 3 juin 2015

1. Théorème d'Ehrenfest

a) On utilise

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \left(i\hbar \frac{d\langle \psi |}{dt} \right) \hat{A} |\psi\rangle + \langle \psi | \hat{A} \left(i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} \right) \quad (1)$$

Comme

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle; \quad -i\hbar \frac{d\langle \psi |}{dt} = \langle \psi | \hat{H} \quad (2)$$

On a utilisé que le Hamiltonien est hermitien $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. On en déduit que

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = -\langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle \quad (3)$$

On peut aussi établir cette relation en utilisant la représentation des fonction d'ondes $\psi(t, x)$, selon

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} &= \int_{\mathbb{R}^3} i\hbar \frac{d}{dt} (\psi^*(t, x) \hat{A} \psi(t, x)) d^3x \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(i\hbar \frac{d\psi^*(t, x)}{dt} \hat{A} \psi(t, x) + i\hbar \psi^*(t, x) \hat{A} \frac{d\psi(t, x)}{dt} \right) d^3x \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(t, x) (-\hat{H} \hat{A} + \hat{A} \hat{H}) \psi(t, x) d^3x. \end{aligned} \quad (4)$$

b) Pour une particule de masse m dans un potentiel $V(x)$ le Hamiltonien est donné par $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(X)$, donc

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{X} \rangle}{dt} = \langle [\hat{X}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{2m} \langle [\hat{X}, \hat{P}^2] \rangle = \frac{1}{m} \langle [\hat{X}, \hat{P}] \hat{P} \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \hat{P} \rangle. \quad (5)$$

où l'on a utilisé que $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$. Donc

$$\frac{d\langle \hat{X} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{P} \rangle. \quad (6)$$

18. Corrigé PC6 : Expérience de Stern et Gerlach

De même on a

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{P} \rangle}{dt} = \langle [\hat{P}, \hat{H}] \rangle = \langle [\hat{P}, \hat{V}(X)] \rangle = -i\hbar \langle \hat{\nabla}_x \hat{V}(X) \rangle. \quad (7)$$

où l'on a utilisé que $\hat{P} = -i\hbar \hat{\nabla}_x$ pour un mouvement à une dimension. Donc

$$\frac{d\langle \hat{P} \rangle}{dt} = -\langle \hat{\nabla}_x \hat{V}(X) \rangle. \quad (8)$$

- c) On a clairement que $\tau E = \Delta a/v E \geq 1/2 |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle| \hbar |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle|^{-1} = \hbar/2$. Le temps τ correspond au temps caractéristique d'évolution du système.

2. Moment cinétique

2.1. Description classique : précession de Larmor

- a) Le moment magnétique de l'électron $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{r} \wedge \vec{p} = \gamma \vec{L}$ où $\gamma = -e/(2m)$ et $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ est le moment cinétique
- b) Un dipôle magnétique soumis à un champ magnétique \vec{B} subit la force $\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} \vec{B}$. Puisque le champ \vec{B} satisfait l'équation de Maxwell $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ la force est donc nulle.

On ne peut pas avoir de champs magnétiques non constants uniquement selon la direction \vec{e}_z car l'équation de Maxwell $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \partial_x B_x + \partial_y B_y + \partial_z B_z = 0$ n'est pas satisfaite. On peut considérer un champ magnétique $\vec{B} = B_z \vec{e}_z + B_x \vec{e}_x$ de sorte à ce que $\partial_x B_x + \partial_z B_z = 0$. Il faut également que $B_x \ll B_z$ pour ne pas affecter le mouvement de l'atome selon la direction Ox .

- c) Dans ce cas les particules sont soumises à la force $\vec{F} = \mu_z \partial_z B_z \vec{e}_z$. On s'attend à observer une ligne continue d'extension déterminée par la largeur du faisceau incident.

2.2. Description quantique

- d) Avec l'expression pour le vecteur $\vec{u} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ alors

$$\vec{\mu}_{\vec{u}} = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (9)$$

On remarque que $\hat{\mu}_{\vec{u}}^2 = \mathbb{I}$ est la matrice identité. On en déduit que les valeurs propres de $\vec{\mu}_{\vec{u}}$ sont $-\mu_0$ et μ_0 avec multiplicité une. Les vecteurs propres sont

$$|+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle; \quad |-\rangle_{\vec{u}} = -e^{-i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle. \quad (10)$$

2. Moment cinétique

- e) Les états propres de μ_x sont obtenus en prenant $\theta = \pi/2$ et $\varphi = 0$, soit $|\pm\rangle_x = (|+\rangle \pm |-\rangle)/\sqrt{2}$, donc si le système est dans l'état $|+\rangle$, puisque $|\langle +|+\rangle_x|^2 = |\langle +|-\rangle_x|^2 = \frac{1}{2}$ les deux valeurs de spin selon $(\mathcal{O}x)$ sont trouvées avec une probabilité de 50%.
- f) On mesure alors $\hat{\mu}_y$, les états propres de cet opérateur sont obtenus en prenant $\theta = \pi/2$ et $\varpi = \pi/2$ soit $|+\rangle_y = -e^{\frac{i\pi}{4}}(|+\rangle_x + i|-\rangle_x)/\sqrt{2}$ et $|-\rangle_y = e^{\frac{i\pi}{4}}(|+\rangle_x + i|-\rangle_x)/\sqrt{2}$. Encore une fois, puisque $|\langle y|\epsilon_y|\epsilon_x\rangle_x|^2 = \frac{1}{2}$ pour tout $\epsilon_y = \pm 1$ et $\epsilon_x = \pm 1$, on trouve les deux valeurs $\pm \frac{1}{2}$ du spin selon $(\mathcal{O}y)$ quelque soit le résultat de la mesure du spin selon $(\mathcal{O}x)$.
- g) Le théorème d'Ehrenfest pour chaque composante de l'opérateur $\hat{\mu}$

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{\mu}_z \rangle}{dt} = \langle [\hat{\mu}_z, \hat{H}] \rangle = 0. \quad (11)$$

car le champs B est selon l'axe $(\mathcal{O}z)$. Pour les autres composantes

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{\mu}_x \rangle}{dt} = \langle [\hat{\mu}_x, \hat{H}] \rangle = -B_0 \langle [\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_z] \rangle = 2iB_0 \mu_0 \langle \hat{\mu}_y \rangle, \quad (12)$$

car $[\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_z] = -2i\mu_0 \hat{\mu}_y$. Également on a

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{\mu}_y \rangle}{dt} = \langle [\hat{\mu}_y, \hat{H}] \rangle = -B_0 \langle [\hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z] \rangle = -2iB_0 \mu_0 \langle \hat{\mu}_x \rangle, \quad (13)$$

car $[\hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_x$. On peut donc réécrire ces équations sous la forme vectorielle

$$\frac{d\langle \vec{\mu} \rangle}{dt} = -\frac{2\mu_0}{\hbar} \vec{B} \times \langle \vec{\mu} \rangle. \quad (14)$$

Ce qui correspond à l'équation du mouvement classique

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma_0 \vec{B} \times \vec{\mu}. \quad (15)$$

- h) i) L'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ implique que

$$i\hbar (c'_+(t)|+\rangle + c'_-(t)|-\rangle) = -B_0 \mu_0 (c_+(t)|+\rangle - c_-(t)|-\rangle) \quad (16)$$

donc

$$c_+(t) = c_+(0) e^{i\frac{B_0 \mu_0 t}{\hbar}}; \quad c_-(t) = c_-(0) e^{-i\frac{B_0 \mu_0 t}{\hbar}}. \quad (17)$$

- ii) À l'instant la fonction d'onde prend la forme

$$|\psi(t)\rangle = c_+(0)e^{i\frac{B_0 \mu_0 t}{\hbar}}|+\rangle + c_-(0)e^{-i\frac{B_0 \mu_0 t}{\hbar}}|-\rangle \quad (18)$$

Comme la fonction d'onde est normalisée $c_+(0)^2 + c_-(0)^2 = 1$ on a donc

18. Corrigé PC6 : Expérience de Stern et Gerlach

l'identification avec la solution $|+\rangle_{\vec{u}}$ donnée dans (10)

$$\varphi(t) = \frac{2B_0\mu_0}{\hbar} t; \quad c_+(0) = \cos \frac{\theta(t)}{2}; \quad c_-(0) = \sin \frac{\theta(t)}{2}. \quad (19)$$

- iii) La solution correspond à un spin tournant à vitesse constante dans le plan équatorial orthogonal à $\mathcal{O}z$, le système se comporte comme de la lumière polarisée circulairement.

19. Corrigé PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux

Mécanique quantique (PHY 311)
 Pierre Vanhove
 PC du 10 juin 2015

1. Oscillation de Rabi

On introduit les matrices de Pauli déjà rencontrées en PC6

$$\hat{\sigma}_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

a) \hat{H}_0 est visiblement égal à

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}_z \quad (2)$$

et le potentiel $\hat{V}(t)$ est donné par la matrice

$$\hat{V}(t) = \frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_1}{2} (\cos(\omega t) \hat{\sigma}_x - \sin(\omega t) \hat{\sigma}_y). \quad (3)$$

On constate donc que $2\hat{V}(t)/(\hbar\omega_1)$ est la transformation de $\hat{\sigma}_x$ par une rotation d'angle $-\omega t$ autour de l'axe ($\mathcal{O}z$)

$$\begin{aligned} \cos(\omega t) \hat{\sigma}_x - \sin(\omega t) \hat{\sigma}_y &= \hat{R}(t) \hat{\sigma}_x \hat{R}^\dagger(t); \\ \hat{R}(t) &:= e^{-i\frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4)$$

Comme $[\hat{H}_0, \hat{R}(t)] = 0$ car \hat{H}_0 ne dépend que de $\hat{\sigma}_z$ et que $\hat{R} \hat{R}^\dagger = \mathbb{I}$, on peut donc écrire

$$\hat{H}(t) = \hat{R}(t) (\hat{H}_0 + \frac{\hbar\omega_1}{2} \hat{\sigma}_x) \hat{R}^\dagger(t). \quad (5)$$

Donc nous obtenons le Hamiltonien indépendant du temps

$$\hat{\tilde{H}}_1 := \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}_z + \frac{\hbar\omega_1}{2} \hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

19. Corrigé PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux

b) On remarque que si $|\psi(t)\rangle = R(t)|\chi(t)\rangle$ alors l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (7)$$

implique que $|\chi\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\chi\rangle}{dt} = \left(R(t)^\dagger \hat{H} R(t) - i\hbar R(t)^\dagger \frac{dR(t)}{dt} \right) |\chi\rangle. \quad (8)$$

c) Si $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ en injectant dans l'équation de Schrödinger on obtient

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}(t)\hat{U}(t). \quad (9)$$

d) Si \hat{H} est indépendant du temps on intègre cette équation différentielle directement

$$\hat{U}(t) = \hat{U}(0) \exp(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t) \quad (10)$$

par définition à l'instant $t = 0$ on a $\hat{U}(0) = \mathbb{I}$ l'identité.

e) Pour le système à deux niveaux on a le Hamiltonien effectif

$$\hat{H}_{\text{eff}} := \hat{R}(t)^\dagger \hat{H} \hat{R}(t) - i\hbar \hat{R}(t)^\dagger \frac{d\hat{R}(t)}{et}. \quad (11)$$

avec pour $\hat{R}(t) = \exp(-i\omega t \hat{\sigma}_z/2)$. On trouve alors que

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2} ((\omega_0 - \omega)\hat{\sigma}_z + \omega_1\hat{\sigma}_x). \quad (12)$$

f) On introduit maintenant l'opérateur d'évolution $U(t)$ tel que $|\chi(t)\rangle = \hat{\tilde{U}}(t)|\chi(0)\rangle$. On déduit de l'équation de Schrödinger Montrer que $\hat{\tilde{U}}(t)$ satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\hat{\tilde{U}}(t)}{dt} = \hat{H}_{\text{eff}}(t)\hat{\tilde{U}}(t). \quad (13)$$

Comme \hat{H}_{eff} est indépendant du temps car

$$\hat{H}_{\text{eff}} := \frac{\hbar}{2} ((\omega_0 - \omega)\hat{\sigma}_z + \omega_1\hat{\sigma}_x) \quad (14)$$

l'opérateur d'évolution est donné simple en intégrant l'équation différentielle sous forme matricielle

$$\hat{\tilde{U}}(t) = \exp \left(-i \frac{\hat{H}_{\text{eff}} t}{\hbar} \right). \quad (15)$$

1. Oscillation de Rabi

avec $R(t) = \exp(-i\omega t \hat{\sigma}_z/2) \hat{U}(t)$.

On a utilisé que $\hat{\sigma}_y^2 = \mathbb{I}$ donc

$$\begin{aligned} e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \left(i \frac{\theta}{2} \hat{\sigma}_y \right)^n \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(2n)!} \left(i \frac{\theta}{2} \right)^{2n} + \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(2n+1)!} \left(i \frac{\theta}{2} \right)^{2n+1} \hat{\sigma}_y \\ &= \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{I} + i \sin \frac{\theta}{2} \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (16)$$

et que

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z; [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y; [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x. \quad (17)$$

Afin de calculer l'exponentielle on diagonalise \hat{H} selon

$$\tilde{H} = \frac{\hbar\Omega}{2} \left(\frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} \hat{\sigma}_z + \frac{\omega_1}{\Omega} \hat{\sigma}_x \right) = \frac{\hbar\Omega}{2} (\cos \theta \hat{\sigma}_z + \sin \theta \hat{\sigma}_x) \quad (18)$$

avec $\Omega^2 = (\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2$ et $\cos \theta := (\omega - \omega_0)/\Omega$ et $\sin \theta = \omega_1/\Omega$. On reconnaît l'action d'une rotation d'angle $\theta/2$ selon l'axe ($\mathcal{O}y$) sur $\hat{\sigma}_z$ donc

$$\tilde{H} = \frac{\hbar\Omega}{2} e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} \hat{\sigma}_z e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} \quad (19)$$

Comme $[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x$ nous avons le résultat voulu. Maintenant l'exponentielle est facilement obtenue avec le résultat

$$\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} e^{-i\frac{\Omega t}{2}\hat{\sigma}_z} e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y}. \quad (20)$$

L'opérateur d'évolution est donné par

$$U(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z} e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} e^{-i\frac{\Omega t}{2}\hat{\sigma}_z} e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_y} \quad (21)$$

g) Il suffit d'expliciter le produit des exponentielles et d'utiliser la formule conséquence que $\hat{\sigma}_u^2 = \mathbb{I}$

$$e^{i\alpha\hat{\sigma}_u} = \cos \alpha \mathbb{I} + i \sin \alpha \hat{\sigma}_u. \quad (22)$$

On en déduit donc

$$U(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z} \left(\cos \frac{\Omega t}{2} \mathbb{I} + i \sin \frac{\Omega t}{2} (\cos \theta \hat{\sigma}_z + \sin \theta \hat{\sigma}_x) \right). \quad (23)$$

h) L'amplitude de transition $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ s'écrit

$$A_{12}(t) = \langle 2 | U(t) | 1 \rangle$$

19. Corrigé PC7 : Dynamique d'un système à deux niveaux

$$\begin{aligned}
 &= \langle 2 | e^{i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}_z} \left(\cos \frac{\Omega t}{2} |1\rangle + i \sin \frac{\Omega t}{2} (\cos \theta |1\rangle + \sin \theta |2\rangle) \right) \\
 &= i \sin \theta \sin \frac{\Omega t}{2} e^{-i \frac{\omega t}{2}}.
 \end{aligned} \tag{24}$$

D'où

$$P_{12}(t) = |\langle 2 | 1 \rangle|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \tilde{\omega} t = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \tag{25}$$

i) Pour $\omega \ll \omega_0$ (excitations de basse fréquence) alors $\Omega^2 \simeq \omega_0^2 + \omega_1^2$

$$P_{12}(t) \simeq \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} t}{2} \right) \tag{26}$$

Dans le cas courant où $\omega_1 \ll \omega_0$ alors $P_{12}(t) \simeq \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2} \sin^2(\omega_0 t / 2)$ qui décrit une oscillation à la pulsation de Bohr ω_0 avec une très faible amplitude. Si $\omega_1 \gg \omega_0$, qui correspond au cas où les deux niveaux atomiques sont presque dégénérés à l'échelle de ω_1 alors $P_{12}(t) \simeq \sin^2(\omega t / 2)$. L'oscillation est maximale à une fréquence caractéristique du couplage avec le champs extérieur. C'est une oscillation du type de Rabi

ii) Si $\omega = \omega_0$ nous sommes sur une résonance. Alors

$$P_{12}(t) = \left(\sin \frac{\omega_1 t}{2} \right)^2. \tag{27}$$

Le fait remarquable est que l'oscillation à résonance ne se produit nullement à la fréquence propre du système ω_0 mais à celle mesurant le couplage avec le champ extérieur.

iii) $\omega \gg \omega_0$ on a une excitation de haute fréquence. Dans ce cas

$$P_{12}(t) \simeq \frac{\omega_1^2}{\omega^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\omega^2 + \omega_1^2} t}{2} \right). \tag{28}$$

Si $\omega_1 \ll \omega$ alors il s'agit d'une oscillation forcée de faible amplitude

$$P_{12}(t) \simeq \frac{\omega_1^2}{\omega^2} \sin^2 \frac{\omega t}{2}. \tag{29}$$

8. Corrigé PC8 : Cryptographie quantique

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 18 juin 2014

1. États de spin $\frac{1}{2}$

a) Un calcul direct donne

$$\hat{S}_u := \frac{\hbar}{2} \left(\cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1)$$

b) On remarque que $\hat{S}_u^2 = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{I}$, donc les valeurs propres sont $\pm \frac{\hbar}{2}$. Et elles ne peuvent pas être dégénérées sinon l'opérateur serait proportionnel à l'opérateur identité $\pm \hbar/2 \mathbb{I}$.

c) Les états propres sont

$$|\sigma_u = +1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\sigma_z = +1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\sigma_z = -1\rangle \quad (2)$$

$$|\sigma_u = -1\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |\sigma_z = +1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\sigma_z = -1\rangle \quad (3)$$

On remarque que ces états sont normés car $\langle \sigma_u = +1 | \sigma_u = +1 \rangle = \langle \sigma_u = -1 | \sigma_u = -1 \rangle = 1$. Si la mesure a donné $\pm \frac{\hbar}{2}$ le système se trouve dans l'état propre $|\sigma_u = \pm 1\rangle$.

d) Par définition $p_u^\pm = |\langle \sigma_u = \pm 1 | \sigma_z = +1 \rangle|^2$. Les probabilités sont donc $p_u^+ = \cos^2(\theta/2)$ et $p_u^- = \sin^2(\theta/2)$. On peut trouver les valeurs $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$ avec la probabilité $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ et $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ respectivement.

e) i) On veut calculer la probabilité de commencer dans la configuration de spin $|\sigma_z = +1\rangle$ et terminer dans la même configuration après une mesure du spin selon la direction u . On a les deux cas suivants :

1) $|\sigma_z = +1\rangle \rightarrow |\sigma_u = +1\rangle \rightarrow |\sigma_z = +1\rangle$ de probabilité $P_{(a)} = \cos^2(\theta/2) \times \cos^2(\theta/2) = \cos^4(\theta/2)$,

2) $|\sigma_z = +1\rangle \rightarrow |\sigma_u = -1\rangle \rightarrow |\sigma_z = +1\rangle$ de probabilité $P_{(b)} = \sin^2(\theta/2) \times \sin^2(\theta/2) = \sin^4(\theta/2)$.

8. Corrigé PC8 : Cryptographie quantique

- ii) La probabilité totale cherchée est $P_{++} = \cos^4(\theta/2) + \sin^4(\theta/2) = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \theta)$.
- iii) En fait on trouve le même résultat parce que par symétrie $P_{--} = P_{++}$. En revanche $P_{+-} = P_{-+} = \frac{1}{2}\sin^2 \theta$. On vérifie bien que $P_{++} + P_{+-} = 1$.

2. État intriqué de deux spins

- a) La relation entre les états $|\sigma_x^a = \pm 1\rangle$ et $|\sigma_z^a = \pm 1\rangle$ sont reliés par une rotation (de même pour b) selon

$$\begin{aligned} |\sigma_x^a = +1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\sigma_z^a = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle) \\ |\sigma_x^a = -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\sigma_z^a = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle). \end{aligned} \quad (4)$$

Ce changement de base s'obtient facilement en remarquant de l'axe $\mathcal{O}x$ correspond au vecteur caractérisé par les angles $\varphi = 0$ et $\theta = \pi/2$ sur la sphère de Bloch. L'expression donnée ci-dessus est obtenue à partir des résultats de la PC6. On vérifie aisément que

$$\begin{aligned} &|\sigma_x^a = +1\rangle \otimes |\sigma_x^b = +1\rangle + |\sigma_x^a = -1\rangle \otimes |\sigma_x^b = -1\rangle \\ &= \frac{1}{2} (|\sigma_z^a = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle) \otimes (|\sigma_z^b = +1\rangle + |\sigma_z^b = -1\rangle) \\ &+ \frac{1}{2} (-|\sigma_z^a = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle) \otimes (-|\sigma_z^b = +1\rangle + |\sigma_z^b = -1\rangle) \\ &= |\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^b = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^b = -1\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

- b) i) On utilise les résultats de l'exercice 2. Après la mesure on peut trouver les valeurs $\pm \hbar/2$ mesurées sur les axes $\mathcal{O}x$ ou $\mathcal{O}z$ avec les probabilités $\frac{1}{2}$ indépendamment de la valeur de θ^a .
- ii) Si on mesure le spin de a selon l'axe $\mathcal{O}z$ on utilise l'état $|\Sigma\rangle$ donné par

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^b = +1\rangle + |\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^b = -1\rangle \right) \quad (6)$$

car cet état est écrit par rapport aux états propres de S_z pour a . Ainsi pour un mesure du spin selon $\mathcal{O}z$, l'état se trouve projeté

$$\begin{aligned} +\frac{\hbar}{2} &: |\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^b = +1\rangle \\ -\frac{\hbar}{2} &: |\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^b = -1\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Pour une mesure du spin de a selon l'axe $\mathcal{O}x$ on utilise alors l'état

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\sigma_x^a = +1\rangle \otimes |\sigma_x^b = +1\rangle + |\sigma_x^a = -1\rangle \otimes |\sigma_x^b = -1\rangle \right) \quad (8)$$

2. État intrigué de deux spins

et après mesure le système se trouve dans l'état propre

$$\begin{aligned} +\frac{\hbar}{2} & : |\sigma_x^a = +1\rangle \otimes |\sigma_x^b = +1\rangle \\ -\frac{\hbar}{2} & : |\sigma_x^a = -1\rangle \otimes |\sigma_x^b = -1\rangle . \end{aligned} \quad (9)$$

- c) i) $\theta_a = 0, \theta_b = 0$: mesure $+\frac{\hbar}{2}$ avec probabilité 1 et $-\frac{\hbar}{2}$ avec probabilité 0

ii) $\theta_a = 0, \theta_b = \pi/2$: mesure $\pm\frac{\hbar}{2}$ chacune avec une probabilité $\frac{1}{2}$

iii) $\theta_a = \pi/2, \theta_b = 0$: mesure $\pm\frac{\hbar}{2}$ chacune avec une probabilité $\frac{1}{2}$

iv) $\theta_a = \pi/2, \theta_b = \pi/2$: mesure $+\frac{\hbar}{2}$ avec probabilité 1 et $-\frac{\hbar}{2}$ avec probabilité 0

Les mesure donne avec *certitude* le même résultat lorsque le spin est mesuré selon le même axe pour a et b .

- d) i) Si Alice a mesuré $\hbar/2$ le système est dans l'état $|\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^b = +1\rangle$. Comme $|\sigma_z^b = +1\rangle = \cos(\theta_e/2)|\sigma_z^e = +1\rangle - \sin(\theta_e/2)|\sigma_z^e = -1\rangle$, l'espion peut trouver les valeurs $\hbar/2$ avec la probabilité $(\cos(\theta_e/2))^2$ et $-\hbar/2$ avec la probabilité $(\sin(\theta_e/2))^2$. Après la mesure de l'espion le système est dans l'état $|\sigma_z^a = +1\rangle \otimes |\sigma_z^e = \pm 1\rangle$ selon la valeur trouvée par l'espion.

Si Alice a mesuré $-\hbar/2$ le système est dans l'état $|\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^b = -1\rangle$.

Comme $|\sigma_z^b = -1\rangle = \sin(\theta_e/2)|\sigma_z^e = +1\rangle + \cos(\theta_e/2)|\sigma_z^e = -1\rangle$, l'espion peut trouver les valeurs $\hbar/2$ avec la probabilité $(\sin(\theta_e/2))^2$ et $-\hbar/2$ avec la probabilité $(\cos(\theta_e/2))^2$. Après la mesure de l'espion le système est dans l'état $|\sigma_z^a = -1\rangle \otimes |\sigma_z^e = \pm 1\rangle$ selon la valeur trouvée par l'espion.

- ii) Si Alice a mesuré $+\hbar/2$. En utilisant maintenant que $|\sigma_z^e = +1\rangle = \cos(\theta_e/2)|\sigma_z^b = +1\rangle + \sin(\theta_e/2)|\sigma_z^b = -1\rangle$ et $|\sigma_z^e = -1\rangle = -\sin(\theta_e/2)|\sigma_z^b = +1\rangle + \cos(\theta_e/2)|\sigma_z^b = -1\rangle$, alors Bernard mesurera la valeur $+\frac{\hbar}{2}$ avec la probabilité $\cos^2 \frac{\theta_e}{2} \cos^2 \frac{\theta_e}{2}$ et la valeur $-\frac{\hbar}{2}$ avec la probabilité $\cos^2 \frac{\theta_e}{2} \sin^2 \frac{\theta_e}{2}$ si l'espion a mesuré la valeur $+\frac{\hbar}{2}$. Si l'espion a mesuré la valeur $-\frac{\hbar}{2}$ les probabilités de Bernard sont $\sin^2 \frac{\theta_e}{2} \sin^2 \frac{\theta_e}{2}$ pour la valeur $+\frac{\hbar}{2}$ et $\sin^2 \frac{\theta_e}{2} \cos^2 \frac{\theta_e}{2}$ pour la valeur $-\frac{\hbar}{2}$.

Si Alice a mesuré $-\hbar/2$. Alors Bernard mesurera la valeur $+\frac{\hbar}{2}$ avec la probabilité $\cos^2 \frac{\theta_e}{2} \sin^2 \frac{\theta_e}{2}$ et la valeur $-\frac{\hbar}{2}$ avec la probabilité $\sin^2 \frac{\theta_e}{2} \sin^2 \frac{\theta_e}{2}$ si l'espion a mesuré la valeur $+\frac{\hbar}{2}$. Si l'espion a mesuré la valeur $-\frac{\hbar}{2}$ les probabilités de Bernard sont $\cos^2 \frac{\theta_e}{2} \sin^2 \frac{\theta_e}{2}$ pour la valeur $+\frac{\hbar}{2}$ et $\cos^2 \frac{\theta_e}{2} \cos^2 \frac{\theta_e}{2}$ pour la valeur $-\frac{\hbar}{2}$.

- iii) La probabilité qu'Alice et Bernard trouvent le même résultat $+\hbar/2$ est

$$P(\theta_e) = \cos^4 \frac{\theta_e}{2} + \sin^4 \frac{\theta_e}{2} = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta_e) . \quad (10)$$

La probabilité de trouver le même résultat $-\hbar/2$ est le même par symétrie du problème.

8. Corrigé PC8 : Cryptographie quantique

iv) Pour un choix d'angle uniforme sur $[0, \pi]$ la probabilité moyenne est

$$\bar{P}_e = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi P(\theta_e) d\theta_e = \frac{3}{4}. \quad (11)$$

v) Pour seulement le choix $\theta_e = 0$ et $\theta_e = \pi/2$ on trouve le même résultat.

9. Corrigé PC9 : Molécule de Benzène

Mécanique quantique (PHY 311)

Pierre Vanhove

PC du 24 juin 2015

Lemme : commutation d'opérateurs

Il suffit d'écrire que $\hat{G}(\hat{H}|\phi_n\rangle) = \hat{H}\hat{G}|\phi_n\rangle = g_n\hat{H}|\phi_n\rangle$ donc $\hat{H}|\phi_n\rangle$ est un état propre de \hat{G} . Comme les états sont non dégénérés on en déduit que $\hat{H}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle$.

1. Un modèle simple pour la molécule de benzène

a) si $q = \ell N$ avec $\ell \in \mathbb{Z}$ alors

$$\sum_{k=1}^N e^{\frac{2i\pi k q}{N}} = \sum_{k=1}^N 1 = N \quad (1)$$

sinon

$$\sum_{k=1}^N e^{\frac{2i\pi k q}{N}} = e^{\frac{2i\pi q}{N}} \frac{1 - e^{\frac{2i\pi N q}{N}}}{1 - e^{\frac{2i\pi q}{N}}} = e^{\frac{2i\pi q}{N}} \frac{1 - e^{2i\pi q}}{1 - e^{\frac{2i\pi q}{N}}} = 0 \quad (2)$$

- b) L'hamiltonien est donnée par la transition de l'électron entre les sites de plus proche voisins par effet tunnel. On vérifie par exemple que si l'électron est sur le site 2 donc dans l'état $|2\rangle$, le potentiel tunnel \hat{W} donne que l'électron peut sauter sur le site 1 ou 3 $\hat{W}|2\rangle = -A(|1\rangle + |3\rangle)$. Cela coûte l'énergie $-A$.
- c) Clairement pour tout $|n\rangle$ on a que $\hat{R}^6|n\rangle = |n+6\rangle = |n\rangle$ où nous avons utilisé la périodicité modulo 6. Donc $\hat{R}^6 = \mathbb{I}$. Les valeurs propres sont donc les racines sixième de l'unité $\lambda_k^6 = 1$, soit $\lambda_k = e^{i\pi k/3}$ avec $1 \leq k \leq 6$.
- d) En utilisant que $\hat{R}|\phi_k\rangle = \lambda_k|\phi_k\rangle$ et la décomposition sur la base $|\phi_k\rangle = \sum_{p=1}^6 c_{k,p}|p\rangle$ on en déduit que $c_{k,p} = \lambda_k^{7-p}c_{k,1}$. Avec la condition de normalisation $\langle\phi_k|\phi_k\rangle = \sum_{p=1}^6 |c_{k,p}|^2 = 6|c_{k,1}|^2 = 1$ nous déduisons que

$$|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{p=1}^6 \lambda_k^{7-p} |p\rangle. \quad (3)$$

9. Corrigé PC9 : Molécule de Benzène

e) On vérifie que

$$\begin{aligned}\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{p=1}^6 (\lambda_k^*)^{7-p} \langle p | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{p'=1}^6 (\lambda_{k'})^{7-p'} | p' \rangle \right) \\ &= \frac{1}{6} \sum_{p=1}^6 \sum_{p'=1}^6 (\lambda_k^*)^{7-p} (\lambda_{k'})^{7-p'} \langle p | p' \rangle\end{aligned}\quad (4)$$

comme $\langle p | p' \rangle = 0$ si $p \neq p'$ and 1 si $p = p'$ alors

$$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \frac{1}{6} \sum_{p=1}^6 (\lambda_k^* \lambda_{k'})^{7-p} \quad (5)$$

qui s'annule en utilisant le résultat de la question a).

Un autre approche est la suivante. On calcule $\langle \phi_k | \hat{R} | \phi_{k'} \rangle$ de deux façons différentes. L'une en faisant agir \hat{R} sur $|\phi_{k'}\rangle$, ce qui donne

$$\langle \phi_k | \hat{R} | \phi_{k'} \rangle = \lambda_{k'} \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle \quad (6)$$

et l'autre en faisant agir \hat{R} sur le bra $\langle \phi_k |$. Pour cela il faut remarquer que (cf la PC5) que

$$\langle \phi_k | \hat{R} = (\hat{R}^\dagger | \phi_k \rangle)^\dagger \quad (7)$$

maintenant

$$\hat{R}^\dagger = \left(\sum_{n=1}^6 |n+1\rangle \langle n| \right)^\dagger = \sum_{n=1}^6 |n\rangle \langle n+1| = \hat{R}^{-1} \quad (8)$$

donc

$$\langle \phi_k | \hat{R} = (\lambda_k^{-1} | \phi_k \rangle)^\dagger = (\lambda_k^{-1})^* \langle \phi_k | = \lambda_k \langle \phi_k | \quad (9)$$

car les λ_k sont de module 1, ie $\lambda_k \lambda_k^* = 1$. Ainsi on trouve que

$$\langle \phi_k | \hat{R} | \phi_{k'} \rangle = \lambda_{k'} \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \lambda_k \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle \quad (10)$$

si $k \neq k'$ alors $\lambda_k \neq \lambda_{k'}$ d'où $\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = 0$.

f) L'opérateur \hat{R} est donné par $\hat{R} = \sum_{n=1}^6 |n+1\rangle \langle n|$, on remarque que $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger = \sum_{n=1}^6 |n\rangle \langle n+1|$. Donc $\hat{H} = E_0 \mathbb{I} - A(\hat{R} + \hat{R}^{-1})$ ce qui permet déduire que $\hat{R}\hat{H} = \hat{H}\hat{R}$. On remarquera que $\mathbb{I} = \sum_{n=1}^6 |n\rangle \langle n|$.

g) D'après le lemme on en déduit que les $|\phi_k\rangle$ sont états propres d'énergie E_k de l'hamiltonien. Donnés par

$$\hat{H} |\phi_k\rangle = (E_0 - 2A \cos(\frac{\pi k}{3})) |\phi_k\rangle \quad (11)$$

2. La molécule de cyclooctatétraène

Ce qui donne que les niveau d'énergie par ordre croissant et avec leur multiplicité

$$E_6 = E_0 - 2A; \quad E_2 = E_4 = E_0 - A; \quad E_1 = E_5 = E_0 + A; \quad E_3 = E_0 + 2A \quad (12)$$

h) Il faut développer $|1\rangle$ sur les $|\phi_k\rangle$ qui sont des état propres de l'Hamiltonien

$$|\phi(0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{k=1}^6 |\phi_k\rangle \quad (13)$$

donc l'évolution temporelle est donnée par

$$|\phi(t)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{k=1}^6 e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |\phi_k\rangle \quad (14)$$

i) On calcule $|\langle 1|\phi(t)\rangle|^2$ et on cherche si il existe un instant $t > 0$ pour lequel cette quantité vaut 1. On trouve que

$$1 = |\langle 1|\phi(t)\rangle|^2 = \frac{4}{36} (\cos(2\omega t) + 2 \cos(\omega t))^2 \quad (15)$$

où l'on a posé $\omega = A/\hbar$. Cette équation a pour solutions

$$\omega t = 2\pi n; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (16)$$

j) On répartit les 6 électrons en plaçant 2 électrons par niveaux en commençant par les niveaux de plus basse énergie. On a donc 2 électrons sur les niveaux E_6, E_2 et E_4 .

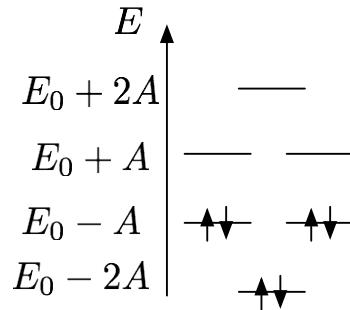


FIGURE 1. – Niveaux d'énergie du Benzène

2. La molécule de cyclooctatétraène

Cet exercice nous avons maintenant une symétrie d'ordre 8.

9. Corrigé PC9 : Molécule de Benzène

- a) L'opérateur de rotation satisfait maintenant $\hat{R}^8 = \mathbb{I}$ donc les valeurs propres sont des racines huitième de l'unité $\lambda^8 = 1$, ie $\lambda_k = \exp(i\pi k/4)$ avec $1 \leq k \leq 8$.

Les niveaux d'énergie sont donnés par $E_k = E_0 - 2A \cos(k\pi/4)$ ce qui donne par ordre croissant

$$\begin{aligned} E_8 &= E_0 - 2A, & E_1 = E_7 = E_0 - \sqrt{2}A, & E_2 = E_6 = E_0, \\ E_3 &= E_5 = E_0 + \sqrt{2}A, & E_4 = E_0 + 2A \end{aligned} \quad (17)$$

- b) Comme dans l'exercice précédent

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{k=1}^8 e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} |\phi_k\rangle \quad (18)$$

- c) La question du retour de l'électron à la position 1 devient alors

$$1 = |\langle 1 | \phi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{16} (1 + 2 \cos(\sqrt{2}\omega t) + \cos(2\omega t))^2 \quad (19)$$

La présence du $\sqrt{2}$ fait que cette équation n'a pas de solution et la propagation de l'électron n'est pas périodique.

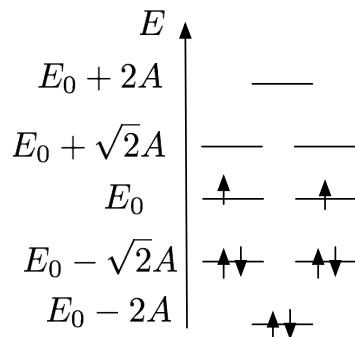


FIGURE 2. – Niveaux d'énergie du cyclooctatétraène

10. Corrigé devoir maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove
PC du 22 avril 2015

Les corrections sont en *italiques*

1. Particule libre

On considère une particule libre de fonction d'onde $\psi(t, x)$ et de transformée de Fourier $\tilde{\psi}(t, p)$ selon les notation de la PC2.

- a) Écrire l'équation d'évolution dont est solution $\tilde{\psi}(t, p)$. En déduire $\tilde{\psi}(t, p)$ à l'aide de $\tilde{\psi}(0, p)$.

La transformée de Fourier inverse de l'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(t, p), \quad (1)$$

d'où l'on déduit

$$\tilde{\psi}(t, p) = \tilde{\psi}(0, p) \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right). \quad (2)$$

Comme l'énergie de la particule libre est $E = p^2/(2m)$ on trouve l'évolution temporelle naturelle $\tilde{\psi}(t, p) = \tilde{\psi}(0, p) \exp(-iEt)$.

- b) On appelle p_0 et Δp_0 respectivement la valeur moyenne et l'écart quadratique moyen de l'impulsion à l'instant $t = 0$. Calculer $\langle p \rangle(t)$ et $\Delta p(t)$ à tout instant t . Interpréter physiquement le résultat obtenu.

Le module de la fonction $\tilde{\psi}(t, p)$ étant indépendant du temps, il en va de même de la valeur moyenne de toute fonction de p . Donc $\langle p \rangle(t) = p_0$ et $\Delta p(t) = \Delta p_0$. On retrouve là le fait que l'impulsion d'une particule libre se conserve (principe d'inertie), résultat également valable pour toute fonction de l'impulsion.

- c) A l'aide du résultat de la PC2 exprimer $\langle x \rangle(t)$ en fonction du temps. Comment ce résultat se compare-t-il à celui obtenu par la méthode de la question 2.3c de la PC2 ?

10. Corrigé devoir maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude

D'après le résultat de la PC2, on a

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(t, p) i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} dp \quad (3)$$

où l'on a utilisé la propriété d'isométrie de la transformée de Fourier et que la transformée de Fourier de $x\psi(t, x)$ est $i\hbar \partial \tilde{\psi}(t, p)/\partial p$. Or, comme on a

$$\frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} = \frac{\partial \tilde{\psi}(0, p)}{\partial p} \exp\left(-i\frac{p^2}{2m\hbar}t\right) - i\frac{pt}{m\hbar}\tilde{\psi}(t, p) \quad (4)$$

d'où l'on déduit

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p, 0) i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p}(p, 0) dp + t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p}{m} |\tilde{\psi}(t, p)|^2 dp \quad (5)$$

soit

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle(0) + \frac{p_0}{m} t \quad (6)$$

La position moyenne de la particule obéit à une variation linéaire, en accord avec le principe d'inertie (impulsion constante). Dans la suite, on utilisera simplement

$$\langle x \rangle(t) = \frac{p_0}{m} t \quad (7)$$

Dans toute la suite, on supposera que l'origine de l'axe des x est choisie telle que la valeur moyenne de la position à l'instant initial soit nulle : $\langle x \rangle(0) = 0$.

- d) De même, écrire l'expression de $\langle x^2 \rangle(t)$ à l'aide de la fonction $\tilde{\psi}(t, p)$ et de sa dérivée par rapport à p , puis montrer que l'on obtient un polynôme du second degré en t . Pour simplifier la suite des calculs, on supposera que ce polynôme atteint son extrémum en $t = 0$ et on déterminera le coefficient du terme en t^2 . En déduire la variance $\Delta x(t)^2$, que l'on exprimera à l'aide de $\Delta x_0 = \Delta x(0)$ et de Δp_0 .

La transformée de Fourier inverse de $x\psi(x, t)$ étant $i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p}$, on a d'après Parseval-Plancherel la relation

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} \right|^2 dp \quad (8)$$

A l'aide de l'expression de $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p}$ obtenue en (4) précédente, on en déduit que $\langle x^2 \rangle(t)$ est un polynôme de degré 2 en t

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle(t) &= t^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{m^2} |\tilde{\psi}(t, p)|^2 dp + 2t \int_{-\infty}^{+\infty} \Re e \left(\frac{p}{m} \tilde{\psi}(t, p) \frac{\partial \tilde{\psi}^*(0, p)}{\partial p} \right) dp \end{aligned}$$

2. Oscillateur harmonique

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\partial \tilde{\psi}(0, p)}{\partial p} \right|^2 dp \quad (9)$$

Un choix judicieux de l'origine des temps permet d'annuler le coefficient du terme linéaire, ce qui signifie que $\langle x^2 \rangle(t)$ est une parabole dont l'extremum est en $t = 0$. On en déduit la relation

$$\langle x^2 \rangle(t) = \langle x^2 \rangle(0) + \frac{\langle p^2 \rangle}{m^2} t^2 \quad (10)$$

En utilisant le résultat de la question précédente, on obtient finalement la variance

$$\Delta x(t)^2 = \langle x^2 \rangle(t) - (\langle x \rangle(t))^2 = \langle x^2 \rangle(0) + \frac{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}{m^2} t^2 = \Delta x_0^2 + \frac{\Delta p_0^2}{m^2} t^2 \quad (11)$$

- e) Donner une valeur approximative de $\Delta x(t)$ lorsque $t \rightarrow +\infty$. Interpréter physiquement le résultat obtenu.

Pour $t \rightarrow \infty$ on a

$$\Delta x(t) \sim \frac{\Delta p_0}{m} t. \quad (12)$$

La dépendance linéaire en $\Delta p_0/m$ suggère l'image classique d'un ensemble de projectiles groupés initialement dans une bande Δx_0 autour de x_0 , les vitesses de ces projectiles étant réparties dans une bande $\Delta v = \Delta p_0/m$ autour de la vitesse de groupe du paquet $v_0 = p_0/m$. Du fait de la dispersion en vitesse, des projectiles, se trouvant initialement au même point, se trouvent uniformément répartis dans une bande $\Delta v t$ au bout du temps t . L'impulsion moyenne p_0 et la dispersion Δp_0 ne varient pas au cours du temps car l'impulsion est une constante du mouvement pour une particule libre.

2. Oscillateur harmonique

On considère dans cette partie le cas d'un potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

- a) Écrire les deux équations dont sont respectivement solutions les fonctions $\psi(x, t)$ et $\tilde{\psi}(t, p)$.

L'équation de Schrödinger s'écrit ici

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(t, x) \quad (13)$$

Par transformée de Fourier inverse, on obtient

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(t, p) - \frac{1}{2}m\hbar^2\omega^2 \frac{\partial^2 \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p^2} \quad (14)$$

- b) En exploitant l'analogie entre les deux équations obtenues à la question précédente, montrer que

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(t, p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} dp \quad (15)$$

Il sera utile de considérer la variable $X = \frac{p}{m\omega}$ ainsi que la fonction $\Phi(t, X) = \sqrt{m\omega}\tilde{\psi}(t, m\omega X)$.

Les deux équations obtenues à la question précédente ont exactement la même forme, le membre de droite étant la somme d'un terme quadratique et d'un terme en dérivée seconde. Pour que l'analogie soit plus évidente, considérons la fonction

$$\Phi(t, X) = \sqrt{m\omega}\tilde{\psi}(t, m\omega X) \quad (16)$$

On peut aisément vérifier que le préfacteur a été choisi tel que la fonction $\Phi(t, X)$ soit bien normée. On a

$$\frac{\partial \Phi(t, X)}{\partial X} = m\omega \sqrt{m\omega} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p}(t, m\omega X) \quad (17)$$

et

$$\frac{\partial^2 \Phi(t, X)}{\partial X^2} = (m\omega)^2 \sqrt{m\omega} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial p^2}(t, m\omega X) \quad (18)$$

En remplaçant dans l'équation dont $\tilde{\psi}(t, p)$ est solution, on obtient

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t, X)}{\partial t} = \frac{m^2 \omega^2 X^2}{2m} \Phi(t, X) - \frac{1}{2} m\hbar^2 \omega^2 \frac{1}{m^2 \omega^2} \frac{\partial^2 \Phi(t, X)}{\partial X^2} \quad (19)$$

soit

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t, X)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \Phi(t, X) \quad (20)$$

On retrouve l'équation de Schrödinger ! Ce résultat remarquable n'est naturellement valable qu'en raison de la forme particulière (quadratique) du potentiel harmonique. A l'aide du résultat des questions précédentes, on peut en déduire

$$\frac{d\langle X \rangle(t)}{dt} = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(t, X) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial X} dX \quad (21)$$

soit, en remplaçant X par son expression

$$\frac{1}{m\omega} \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(t, p) \frac{\hbar}{i} m\omega \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p} dp \quad (22)$$

ou encore

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(t, p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \tilde{\psi}(t, p)}{\partial p} dp \quad (23)$$

2. Oscillateur harmonique

- c) En déduire une relation entre $d\langle p \rangle / dt$ et $\langle x \rangle$. Comment cette relation se compare-t-elle au résultat obtenu en mécanique classique ?

A l'aide de l'expression de $\langle x \rangle(t)$ établie en PC2, on déduit de la question précédente l'expression

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2\langle x \rangle(t) \quad (24)$$

Pour un oscillateur harmonique classique, la force exercée s'écrit $-dV/dx = -m\omega^2x$ donc la deuxième loi de Newton donne

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2x$$

soit exactement la même expression !

10. Corrigé devoir maison 0 : transformée de Fourier et relation d'incertitude

11. Corrigé du premier devoir à la maison

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove

1. Courant de probabilité

a) La densité de probabilité $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t)\psi^*(x, t)$. On considère

$$i\hbar\partial_t\rho = i\hbar\partial_t\psi\psi^* + i\hbar\psi\partial_t\psi^* \quad (1)$$

où l'on a introduit la notation $\partial_t f(x, t) := \partial f(x, t)/\partial t$. En utilisant l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, t) + V(x, t)\psi(x, t) \quad (2)$$

puisque le potentiel est réel on a

$$i\hbar\partial_t\rho = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*) \quad (3)$$

Expression de l'on compare à

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{J} &= \frac{\hbar}{2im}(\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - \nabla\psi \cdot \nabla\psi^*) + \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla \cdot \nabla\psi - \psi\nabla \cdot \nabla\psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla \cdot \nabla\psi - \psi\nabla \cdot \nabla\psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*) \\ &= -\partial_t\rho. \end{aligned} \quad (4)$$

Nous avons utilisé les relations suivantes

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} \partial_x f \\ \partial_y f \\ \partial_z f \end{pmatrix} \\ \nabla \cdot \mathbf{J} &= \partial_x J^x + \partial_y J^y + \partial_z J^z \\ \nabla \cdot \nabla f(\mathbf{r}, t) &= (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)f = \Delta f \end{aligned} \quad (5)$$

b) On écrit $\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\chi(t)$. L'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar\partial_t\chi(t)\varphi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

11. Corrigé du premier devoir à la maison

avec

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \right) \chi(t) \quad (7)$$

Comme le potentiel ne dépend pas du temps, et $\chi(t) \neq 0$ ainsi que $\varphi(\mathbf{r}) = 0$ on peut réécrire ces équations de la façon suivante

$$\frac{i\hbar\partial_t\chi(t)}{\chi(t)} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} \quad (8)$$

Les variables t et \mathbf{r} étant indépendantes cette quantité doit être constante ce qui implique les équations (6) et (7) de l'énoncé.

L'équation sur $\chi(t)$ se résout simplement en

$$\chi(t) = \chi_0 e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (9)$$

- c) Si la solution est stationnaire l'énergie E est constante et $\rho(\mathbf{r}, t) = |\varphi(\mathbf{r})|^2$ est indépendant du temps. Donc $\partial_t\rho = 0$ d'où $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Pour un problème à une dimension nous avons

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 = \partial_x J(x, t) \implies J(x, t) = \text{Cste.} \quad (10)$$

- d) L'équation de Schrödinger s'écrit alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi(x) + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (11)$$

La solution de cette équation du second ordre est

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (12)$$

avec

$$k := \frac{\sqrt{(E - V_0)2m}}{\hbar}. \quad (13)$$

- e) On a immédiatement que

$$J^x(x, t) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2). \quad (14)$$

La partie de l'onde se déplaçant vers la droite est pour $B = 0$ et $A \neq 0$.

- f) La fonction $\psi_k(x, t)$ n'est pas normalisable. Une onde plane n'est pas physique car elle correspond à un état d'impulsion k déterminé. Donc à un état infiniment étalé dans l'espace.

2. Marche de potentiel à une dimension.

- g) Si $\psi_{k_1}(x, t)$ et $\psi_{k_2}(x, t)$ sont solutions de l'équation de Schrödinger par linéarité $\psi = \psi_{k_1} + \psi_{k_2}$ est aussi une solution :

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi(x, t) &= i\hbar(\partial_t\psi_{k_1}(x, t) + \partial_t\psi_{k_2}(x, t)) \\ &= \hat{H}\psi_{k_1}(x, t) + \hat{H}\psi_{k_2}(x, t) \\ &= \hat{H}\psi(x, t) \end{aligned} \quad (15)$$

Mais elle n'est pas une fonction propre du Hamiltonien.

Si on utilise la notation du début de l'exercice $\psi_{k_i}(x, t) = \varphi_{k_i}(x) \exp(-iE_it/\hbar)$

La densité de probabilité ρ est donnée par

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi_{k_1}(x, t) + \psi_{k_2}(x, t)|^2 \\ &= |\psi_{k_1}(x, t)|^2 + |\psi_{k_2}(x, t)|^2 + 2\Re(\psi_{k_1}(x, t)^*\psi_{k_2}(x, t)) \\ &= |\varphi_{k_1}(x)|^2 + |\varphi_{k_2}(x)|^2 + 2\Re\left(\varphi_{k_1}(x)^*\varphi_{k_2}(x)e^{i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

La densité de probabilité dépend du temps si $E_1 \neq E_2$. La pulsation du mouvement est $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Le courant de probabilité est également dépendant du temps.

2. Marche de potentiel à une dimension.

- a) Dans la région I, $x < 0$, nous avons l'équation de Schrödinger

$$\partial_x^2\psi_I(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x) \quad (17)$$

et dans la région II $x > 0$

$$\partial_x^2\psi_{II}(x) = \frac{(V_0 - E)2m}{\hbar^2}\psi_{II}(x) \quad (18)$$

Les solutions sont des exponentielles $\exp(\pm Kx)$ avec

$$K = \begin{cases} ik = i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} & \text{pour } x < 0 \\ q = \sqrt{2m(V_0 - E)} & \text{pour } x > 0 \end{cases}. \quad (19)$$

- b) Les relations de continuité de la fonction d'onde, ainsi que de sa dérivée en $x = 0$ donne

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik(A - B) &= q(D - C). \end{aligned} \quad (20)$$

11. Corrigé du premier devoir à la maison

- c) Il faut prendre $D = 0$ pour avoir une fonction d'onde normalisable. On trouve alors

$$\begin{aligned} B &= A \frac{ik + q}{ik - q} \\ C &= A \frac{2ik}{q - ik}. \end{aligned} \quad (21)$$

- d) Pour une particule venant de $-\infty$ il faut prendre $B = 0$ et $D = 0$. Pour l'onde réfléchie il faut prendre $A = 0$.

- e) Par définition $R = J_{\text{incident}} / J_{\text{reflechi}}$ comme

$$J_{\text{incident}} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2; \quad J_{\text{reflechi}} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2, \quad (22)$$

on a

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{ik + q}{ik - q} \right|^2 = 1. \quad (23)$$

- f) Le courant pour $x > 0$ est calculé à partir de la solution φ_{II} (avec toujours $D = 0$)

$$J_{II} = \Re e \left(\frac{\hbar q}{2im} |C|^2 e^{-2qx} \right) = 0 \quad (24)$$

Comme le courant de probabilité est nul, le facteur de transmission $T = 0$, ce qui est compatible avec $R = 1$ trouvé ci-dessus.

La probabilité de présence dans la région $x > 0$ est donnée par

$$\rho_{II}(x, t) = |C|^2 e^{-2qx} \quad (25)$$

$$\int_0^\infty \rho_{x>0}(x)^2 dx = \frac{|C|^2}{2q} > 0, \quad (26)$$

donc il y a une probabilité de présence non nulle dans la région $x > 0$ même s'il n'y a pas de particule transmise. La fonction d'onde pénètre dans la marche de potentiel sur une épaisseur de l'ordre de $1/q$.

- g) Comme l'onde est complètement réfléchie on peut considérer le déphasage. Par définition pour une onde de la forme

$$\varphi_I(x) = A (e^{ikx} + \frac{B}{A} e^{-ikx}) \quad (27)$$

3. Demi-tour devant un précipice

le déphasage est donné par

$$\Delta\theta := \arg\left(\frac{B}{A}\right) = \frac{ik+q}{ik-q}, \quad \Rightarrow \quad \Delta\theta = 2 \arctan\left(\frac{k}{q}\right) = 2 \arctan\left(\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}\right). \quad (28)$$

- h) Si $V_0 \rightarrow \infty$ alors $q \rightarrow \infty$. On trouve que $B \rightarrow -A$ et $C \rightarrow 0$. La fonction d'onde s'annule dans la région II $\varphi_{II}(x) = 0$ et dans la région I $\varphi_I(x) = 2iA \sin(kx)$.

Les conditions de continuités de la fonction d'onde sont toujours satisfaite et (20) deviennent alors

$$A + B = 0 \quad (29)$$

$$ik(A - B) = - \lim_{V_0 \rightarrow \infty} qC = -2ikA. \quad (30)$$

La dérivée n'est pas continue car si l'on intègre l'équation de Schrödinger de part et d'autre de la marche on a que

$$\varphi'_I(0) - \varphi'_{II}(0) = \varphi'_I(0) = -2iAk \quad (31)$$

ce qui correspond à l'équation (30).

- i) Si $E > V_0$ il suffit alors de poser dans les équation précédentes $q = -i\hat{q}$ avec

$$\hat{q} = \frac{\sqrt{(E - V_0)2m}}{\hbar}. \quad (32)$$

Alors nous avons

$$\begin{aligned} R &= \left(\frac{k - \hat{q}}{k + \hat{q}}\right)^2 \\ T &= \frac{J_{x>0}}{J_{incident}} = \left|\frac{q}{k}\right| \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4k\hat{q}}{(k + \hat{q})^2}. \end{aligned} \quad (33)$$

On vérifié aisément que $R + T = 1$.

- j) On trouve alors les relations standards pour les coefficients de transmission et de réflexion de l'optique en termes du ratio les longueurs d'ondes $n_1/n_2 = \lambda_{II}/\lambda_I$.

3. Demi-tour devant un précipice

- a) Comme la source émet des particules depuis $x = +\infty$, leur énergie E est forcément supérieure V_0 . En posant $E := \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $E - V_0 := \frac{\hbar^2 K^2}{2m} > 0$, l'équation de Schrödinger dans chaque région donne

$$\varphi''_I(x) + k^2 \varphi_I(x) = 0 \quad \text{pour } x \leq 0$$

11. Corrigé du premier devoir à la maison

$$\varphi''_{II}(x) + K^2 \varphi_{II}(x) = 0 \quad \text{pour } x > 0. \quad (34)$$

Puisque les particules viennent de $x = +\infty$ alors $A = 0$ et les solutions sont données par

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= B e^{-ikx} && \text{pour } x \leq 0 \\ \varphi_{II}(x) &= C e^{ikx} + D e^{-ikx} && \text{pour } x > 0. \end{aligned} \quad (35)$$

Les conditions de continuités donnent que $C + D = B$ et $iK(C - D) = -ikB$, qui implique que

$$\begin{aligned} C &= \frac{K - k}{K + k} D \\ B &= \frac{2K}{k + K} D. \end{aligned} \quad (36)$$

Le coefficient de réflexion est donnée par

$$R = \left| \frac{C}{D} \right|^2 = \left(\frac{K - k}{K + k} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E - V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E - V_0} + \sqrt{E}} \right)^2. \quad (37)$$

b) Afin d'étudier le comportement de R nous remarquons que

$$R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E - V_0} + \sqrt{E})^4} \quad (38)$$

on en déduit aisément que R est une fonction décroissante de l'énergie.

- c) On constate que pour $E \gtrsim V_0$ le coefficient de réflexion se comporte comme $R \simeq 1 - 4\sqrt{\frac{E-V_0}{V_0}}$, et que $\lim_{E \rightarrow V_0} R = 1$. Donc pour les particules d'énergie proche de V_0 sont complètement réfléchies. C'est un comportement purement quantique car une partie de la fonction d'onde est dans le trou. Les particules classiques tombent de la marche de potentiel.

4. Étalement du paquet d'onde

Dans cet exercice on revient sur l'interprétation de la relation d'incertitude discutée en PC2.

- a) Dans l'espace des impulsions l'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(p, t)}{\partial t} = \hat{H}(p) \hat{\psi}(p, t) = E(p) \tilde{\psi}(p, t) \quad E(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad (39)$$

4. Étalement du paquet d'onde

donc

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) e^{-i \frac{Et}{\hbar}}. \quad (40)$$

- b) On suppose que $\hat{\psi}(p, t)$ est négligeable hors de $p \sim p_0$. Le développement de Taylor autour de p_0 donne

$$\begin{aligned} E(p) &\simeq E(p_0) + (p - p_0) \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_{p=p_0} + O(p^2) \\ &= \frac{p_0^2}{2m} + (p - p_0) v_0 + O(p^2) \end{aligned} \quad (41)$$

où $p_0 = m v_0$. La fonction d'onde $\psi(x, t)$ est donné par la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\hat{\psi}(p, t)$ (voir PC2)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p, t) dp \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{i \frac{px}{\hbar}} e^{-i \frac{E(p)t}{\hbar}} \tilde{\psi}(p, 0) dp \\ &\simeq e^{i \frac{(p_0 v_0 - E_0)t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{i \frac{p(x - v_0 t)}{\hbar}} \tilde{\psi}(p, 0) dp \\ &\simeq e^{i \frac{(p_0 v_0 - E_0)t}{\hbar}} \psi(x - v_0 t, 0). \end{aligned} \quad (42)$$

On constate qu'à cet ordre d'approximation

$$|\psi(x, t)|^2 \simeq |\psi(x - v_0 t, 0)|^2. \quad (43)$$

On a donc un paquet d'onde qui se déplace à la vitesse v_0 sans dispersion (sans se déformer).

- c) À l'ordre deux en p alors

$$E(p) \simeq E_0 + (p - p_0)v_0 + \frac{(p - p_0)^2}{2m} + O(p^3) \quad (44)$$

On utilise la fonction d'onde gaussienne étudiée en PC2

$$\tilde{\psi}(0, p) = \frac{1}{(\pi\sigma^2\hbar^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{2\sigma^2\hbar^2}\right) \quad (45)$$

On trouve alors après transformée de Fourier

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p, t) dp \\ &\sim e^{i \frac{x p_0 - E_0 t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{i \frac{(p - p_0)(x - v_0 t)}{\hbar} - i \frac{(p - p_0)^2}{2m\hbar} t} \tilde{\psi}(p, 0) dp \\ &\sim \frac{1}{(\pi\sigma^2\hbar^2)^{1/4}} e^{i \frac{x p_0 - E_0 t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{i \frac{(p - p_0)(x - v_0 t)}{\hbar} - i \frac{(p - p_0)^2}{2m\hbar} t} e^{-\frac{(p - p_0)^2}{2\sigma^2\hbar^2}} dp \end{aligned}$$

11. Corrigé du premier devoir à la maison

$$\sim \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{\sqrt{\sigma}}{\sqrt{1 + it\frac{\sigma^2 \hbar}{m}}} e^{i\frac{xp_0 - E_0 t}{\hbar}} e^{-(x - v_0 t)^2 \frac{\sigma^2}{2(1 + it\frac{\sigma^2 \hbar}{m})}}. \quad (46)$$

On en déduit que

$$|\psi(x, t)|^2 \sim \frac{\sigma}{\sqrt{\pi} \sqrt{1 + \frac{\sigma^4 \hbar^2 t^2}{m^2}}} e^{-(x - v_0 t)^2 \frac{m^2 \sigma^2}{m^2 + t^2 \hbar^2 \sigma^4}}. \quad (47)$$

En utilisant les résultats de la PC2 sur les paquets d'onde gaussiens, on en déduit l'écart type

$$\Delta x(t) = \sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{\hbar^2 t^2 \sigma^2}{2m^2}} = \sqrt{(\Delta x_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0 t}{m}\right)^2}. \quad (48)$$

avec $\Delta x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}$ et $\Delta p_0 = \hbar\sigma/\sqrt{2}$ les écarts types du paquet d'onde gaussien libre. Il y a donc également du paquet d'ondes libres. Le terme en $\Delta p_0/m t$ suggère l'image classique d'un ensemble de projectiles groupés initialement dans une bande Δx_0 autour de x_0 , les vitesses de ces projectiles étant réparties dans une bande $\Delta v = \Delta p_0/m$ autour de la vitesse de groupe du paquet $v_0 = p_0/m$. Du fait de la dispersion en vitesse, des projectiles, se trouvant initialement au même point, se trouvent uniformément répartis dans une bande $\Delta v t$ au bout du temps t . A l'instant initial, les particules sont réparties uniformément dans une boîte de dimensions Δx et Δp et centrée en (x_0, p_0) . L'impulsion moyenne p_0 du paquet d'onde et sa dispersion en impulsions Δp_0 ne varient pas au cours du temps car l'impulsion est une constante du mouvement pour la particule libre.

12. Corrigé du second devoir à la maison

Mécanique quantique (PHY 311)
Pierre Vanhove

1. Effet tunnel résonnant et contrôle de la transmission d'un électron à travers une barrière

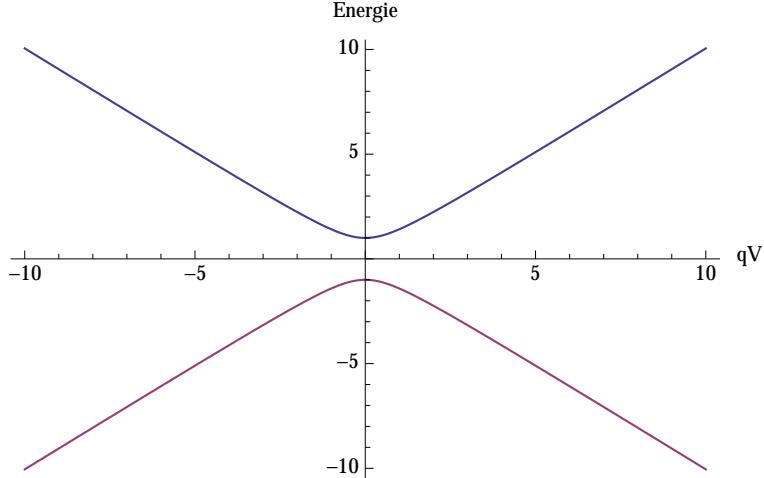
a)

$$H = \begin{pmatrix} qV & -A \\ -A & -qV \end{pmatrix}$$

b) Clairement $\det H = -(qV)^2 - A^2$ donc

$$H = \sqrt{(qV)^2 + A^2} \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}$$

- c) Les énergies sont $E_{\pm} = \pm\sqrt{(qV)^2 + A^2}$ et les vecteur propres associés sont $|-\rangle = (-\sin\theta, \cos\theta) = -\sin\theta|g\rangle + \cos\theta|d\rangle$ pour E_- , et $|+\rangle = (\cos\theta, \sin\theta) = \cos\theta|g\rangle + \sin\theta|d\rangle$ pour E_+ .
- d) On a des courbes en $\sqrt{(qV)^2 + A^2}$



- e) On débute avec un électron dans le puits de gauche $|\psi(0)\rangle = |g\rangle$, soit en termes

12. Corrigé du second devoir à la maison

d'états propres d'énergie $|\psi(0)\rangle = \cos\theta|+\rangle - \sin\theta|-\rangle$. Après un temps t l'état est $|\psi(t)\rangle = \cos\theta e^{-iE_+t/\hbar}|+\rangle - \sin\theta e^{-iE_-t/\hbar}|-\rangle$. Comme $|d\rangle = \sin\theta|+\rangle + \cos\theta|-\rangle$ alors

$$\begin{aligned} P_d(t) &= |\langle d|\psi(t)\rangle|^2 = \left(\sin(2\theta) \sin\left(\frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar}\right) \right)^2 \\ &= \frac{A^2}{(qV)^2 + A^2} \left(\sin \frac{\sqrt{(qV)^2 + A^2}t}{\hbar} \right)^2. \end{aligned} \quad (1)$$

f) La probabilité maximale est $A^2/((qV)^2 + A^2)$ cette probabilité vaut 1 lorsque $V = 0$ et s'annule pour $V \rightarrow \infty$. On peut donc empêcher les électrons de traverser la barrière avec une tension.

g) Pour $V = 0$ nous avons

$$P_d(t) = \left(\sin \frac{At}{\hbar} \right)^2 \quad (2)$$

pour $qV \gg A$ nous avons

$$P_d(t) = \frac{A^2}{(qV)^2} \left(\sin \frac{|qV|t}{\hbar} \right)^2 \ll 1. \quad (3)$$

h) On voit donc que lorsque la tension est faible la probabilité de passage est maximale pour un temps $t = \hbar\pi/2A$ avec la période $\hbar\pi/A$. Lorsque l'électron est passé dans le puits de droite, avec une tension forte on supprime tout passage de nouvel électron.

2. États cohérents de l'oscillateur harmonique

a) On a

$$a|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} a|\phi_n\rangle \quad (4)$$

avec $a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$ et $a|\phi_0\rangle = 0$ on a donc

$$a|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}} a|\phi_{n-1}\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (5)$$

Par conjugaison hermitique nous avons bien sur que $(\hat{a}|\alpha\rangle)^\dagger = \langle\alpha|\hat{a}^\dagger = \alpha^*\langle\alpha|$.

b) L'état étant décomposé sur les états propres de H , on a

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\Omega t(n+\frac{1}{2})} |\phi_n\rangle$$

2. États cohérents de l'oscillateur harmonique

$$\begin{aligned}
&= e^{-i\frac{\Omega t}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha e^{-i\Omega t})^n |\phi_n\rangle \\
&= e^{-i\frac{\Omega t}{2}} |\alpha \exp(-i\Omega t)\rangle.
\end{aligned} \tag{6}$$

On vérifie bien que cet état est normé car

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \alpha \exp(-i\Omega t) | \alpha \exp(-i\Omega t) \rangle \tag{7}$$

et pour tout α on a que

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{\substack{n \geq 0 \\ m \geq 0}} \frac{(\alpha^*)^m \alpha^n}{n! m!} \langle \phi_m | \phi_n \rangle. \tag{8}$$

Dans la PC5 il est démontré que les états $|\phi_n\rangle$ sont orthonormés $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{m,n}$ donc

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n \geq 0} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1. \tag{9}$$

- c) On calcule $\langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}} (\langle \psi(t) | \hat{a} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{a}^\dagger | \psi(t) \rangle)$. Des questions précédentes on nous savons que $\hat{a}|\alpha \exp(-i\Omega t)\rangle = \alpha \exp(-i\Omega t) |\alpha \exp(-i\Omega t)\rangle$ et $\langle \alpha \exp(-i\Omega t) | \hat{a}^\dagger = \alpha^* \exp(i\Omega t) \langle \alpha \exp(-i\Omega t)|$, donc

$$\langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}} (\alpha e^{-i\Omega t} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle + \alpha^* e^{i\Omega t} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle) \tag{10}$$

Comme $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$ on trouve que

$$\langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}} (\alpha e^{-i\Omega t} + \alpha^* e^{i\Omega t}). \tag{11}$$

Ce qui correspond à un mouvement d'oscillation de fréquence Ω . En remarquant que

$$\frac{d^2 \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle}{dt^2} = -\Omega^2 \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle \tag{12}$$

on retrouve l'équation du mouvement d'un oscillateur classique.

- d) Pour le calcul de l'écart type $(\Delta x)^2 = \langle \psi(t) | \hat{x}^2 | \psi(t) \rangle - (\langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle)^2$ on évalue

$$\begin{aligned}
\langle \psi(t) | \hat{x}^2 | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2m\Omega} \left(\langle \psi(t) | \hat{a}^2 | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | (\hat{a}^\dagger)^2 | \psi(t) \right. \\
&\quad \left. + \langle \psi(t) | (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) | \psi(t) \rangle \right)
\end{aligned} \tag{13}$$

12. Corrigé du second devoir à la maison

nous avons

$$\langle \psi(t) | \hat{a}^2 | \psi(t) \rangle = \alpha^2 e^{-2i\Omega t} \quad (14)$$

$$\langle \psi(t) | (\hat{a}^\dagger)^2 | \psi(t) \rangle = (\alpha^*)^2 e^{2i\Omega t} \quad (15)$$

$$\langle \psi(t) | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \psi(t) \rangle = |\alpha|^2. \quad (16)$$

Pour la dernière contribution nous utilisons la relation de commutation donnée en PC5 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$

$$\langle \psi(t) | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | (1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) | \psi(t) \rangle = 1 + |\alpha|^2. \quad (17)$$

Donc

$$\langle \psi(t) | \hat{x}^2 | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2m\Omega} ((\alpha e^{-i\Omega t} + \alpha^* e^{i\Omega t})^2 + 1) \quad (18)$$

Donc

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\Omega}. \quad (19)$$

C'est le même écart type que celui de l'état fondamental $|\phi_0\rangle$ de l'oscillateur harmonique.

- e) Ce paquet d'onde oscille sans se déformer en conservant la forme d'une gaussienne, et en suivant le mouvement classique. Si $|\alpha|$ est très grand, la largeur du paquet d'onde devient négligeable par rapport à l'excursion du mouvement, et le comportement de l'oscillateur est indiscernable du comportement classique. Pour α général nous avons un état « quasi » classique qui se comporte comme un état classique.

Nous résumons la différence entre les états propres de l'Hamiltonien $|\phi_n\rangle$ et les états cohérents

État propre $ \phi_n\rangle$	État cohérent $ \alpha\rangle$
stationnaire	$\alpha(t) = \alpha_0 e^{i\Omega t}$
$\langle E \rangle = (n + \frac{1}{2}) \hbar\Omega$	$\langle E \rangle = (\alpha ^2 + \frac{1}{2}) \hbar\Omega$
$\Delta E = 0$	$\Delta E = \hbar\Omega\alpha$
$\langle \hat{x} \rangle = 0$	$\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\Omega}} \operatorname{Re}(\alpha(t))$
$\langle \hat{p} \rangle = 0$	$\langle \hat{p} \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\Omega}} \operatorname{Im}(\alpha(t))$
$\Delta x \Delta p = (n + \frac{1}{2}) \hbar$	$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
$\phi_n(x) e^{x^2/2}$ sont les polynômes d'Hermites	$\phi_\alpha(x)$ sont des gaussiennes

Troisième partie .

**Compléments : exercices non
donnés, etc.**

1. Compléments

Exercices non donnés.

1. Conséquences de la relation d'incertitude de Heisenberg

Pour un objet de masse m , le principe d'incertitude $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ implique $\Delta x \Delta v \geq \frac{\hbar}{2m}$ où Δx est la largeur de l'onde, et Δv sa dispersion en vitesse. Si à l'instant $t = 0$, l'onde est localisée, alors Δx est faible et Δv est donc grand. Ce qui implique que l'onde se disperse et ne reste pas localisée.

- Pour un électron, $\hbar/m \simeq 10 \text{ cm}^2/\text{s}$ donc si à $t = 0$ on a $\Delta x \leq 1 \text{ cm}$, alors $\Delta v \geq \hbar/(2m\Delta x) \geq 0.5 \text{ cm/s}$ donc Δx dépasse 1 cm après $t = 2 \text{ s}$.
- Au contraire pour une poussière, $\hbar/m \geq 10^{-18} \text{ m}^2/\text{s}$, on peut avoir $\Delta x \simeq 10^{-9} \text{ m}$ et $\Delta v \simeq 10^{-9} \text{ m/s}$ tous deux très petits.

2. Le puits carré infini

donné en PC 4 en 2013

Les développements récents de la technologie des semi-conducteurs permettent de réaliser des superpositions alternées de couches d'arsénure de gallium et d'aluminium ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), dont les épaisseurs et la composition (valeur de x) sont contrôlées à quelques couches atomiques près. L'énergie potentielle d'un électron se déplaçant perpendiculairement à ces couches dépend de la valeur de x , ce qui permet de réaliser “à la carte” des puits et des barrières de potentiels à une dimension $V(x)$. La physique d'un électron se déplaçant dans ces structures est bien décrite par l'équation de Schrödinger à une dimension. Cependant, à cause de l'interaction avec le réseau cristallin, le coefficient d'inertie m de l'électron, appelé “masse effective”, est beaucoup plus faible que la masse m_e de l'électron dans le vide : on a en effet $m = 0,067 m_e$.

On réalise une couche de GaAs, d'épaisseur a , prise en sandwich entre deux barrières épaisses de AlAs. L'énergie potentielle de l'électron dans AlAs étant très élevée, on considérera que le mouvement de l'électron est celui d'une particule de masse m dans le potentiel :

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty && \text{si } x < 0 \text{ ou si } x > a \\ V(x) &= 0 && \text{si } 0 \leq x \leq a. \end{aligned} \tag{1}$$

▷ Niveaux d'énergie du système.

1. Compléments

a) Montrer que les énergies propres sont quantifiées sous la forme $E_n = n^2 E_1$ où n est un entier strictement positif. Calculer E_1 et déterminer les fonctions propres $\chi_n(x)$ correspondant à E_n .

b) Comment la symétrie des $\chi_n(x)$ par rapport à $a/2$ est-elle reliée à la parité de n ?

▷ **Évolution d'un paquet d'ondes et émission de rayonnement.**

c) On suppose que le système est placé initialement dans l'état $\psi(x, 0) = [\chi_1(x) + \chi_2(x)] / \sqrt{2}$. Calculer $\psi(x, t)$ à un instant t ultérieur.

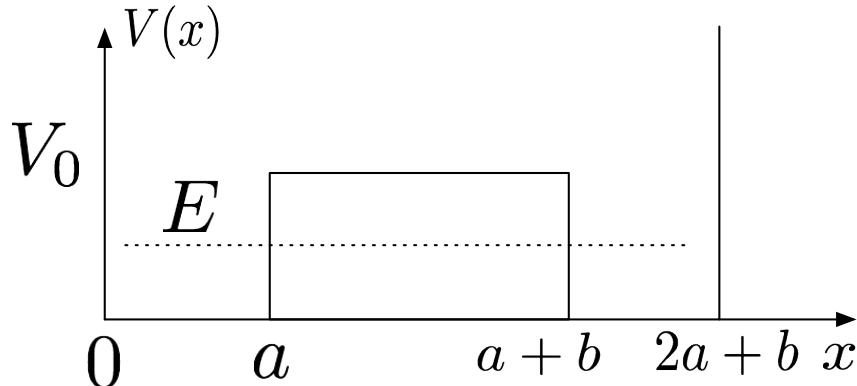
d) Calculer l'évolution du "centre" du paquet d'onde $\langle x - a/2 \rangle(t)$ et commenter.

$$\text{On donne : } \int_0^a \left(x - \frac{a}{2} \right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = -\frac{8a^2}{9\pi^2}.$$

e) Au mouvement d'une charge le long de Ox est associé un dipôle électrique $D = qx$, qui est susceptible de rayonner une onde électromagnétique à sa fréquence d'oscillation. Calculer la longueur d'onde du rayonnement émis ("transition" électromagnétique entre les niveaux E_1 et E_2) pour une largeur du "puits quantique" $a = 15$ nm. Les puits quantiques sont en principe utilisés comme détecteurs de rayonnement infrarouge.

On pourra se servir des relations utiles : $\hbar c = 197,3$ eV.nm et $m_e c^2 = 0,511$ MeV.

3. Effet tunnel avec double puits



Remarque : Cet exercice demande des calculs assez importants. Il peut être considéré comme optionnel.

Le but de cet exercice est de relier entre eux différents problèmes de puits de potentiels, et de montrer que l'effet tunnel permet de lever la dégénérescence entre des niveaux quantiques. Un effet qui sera revu en détails en PC7. On considère le potentiel

3. Effet tunnel avec double puits

$V(x)$ donné par un double puits tel que

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \in]-\infty, 0[\cup [2a+b, +\infty[\\ 0 & x \in [0, a] \cup [a+b, 2a+b] \\ V_0 & x \in [a, a+b] \end{cases}. \quad (2)$$

On considère une particule de masse m et d'énergie E faible devant la valeur du potentiel $E \ll V_0$. On supposera que $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$.

a) Montrer que la fonction d'onde prend la forme suivante

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A \sin(kx) & 0 < x < a \\ \psi_{II}(x) &= B_1 e^{qx} + B_2 e^{-qx} & a < x < a+b \\ \psi_{III}(x) &= C \sin(k(2a+b-x)) & a+b < x < 2a+b. \end{aligned} \quad (3)$$

avec

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (4)$$

b) Écrire les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée. En déduire l'équation suivant

$$(q \tan(ka) + k) e^{qb} = \pm (q \tan(ka) - k). \quad (5)$$

c) Dans l'approximation $E \ll V_0$, montrer qu'à l'ordre le plus bas en l'énergie de la particule E , l'état de plus bas niveau d'énergie a pour énergie et moment

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad n \geq 1. \quad (6)$$

d) À quelle système simple correspond cette solution ?

e) En utilisant (5) déterminer l'énergie et le moment des niveaux suivants en le développement en k .

f) On considère la limite $b \rightarrow \infty$. Montrer que les premiers niveaux d'énergie sont données par

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{aq_0}, \quad q_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n^{(0)})}}{\hbar}. \quad (7)$$

g) À quel type de potentiel correspondent ces solutions ? Quelle est la dégénérescence des niveaux d'énergie ?

h) On revient maintenant aux cas où b est de valeur finie. Un effet tunnel entre la partie gauche et droite du potentiel sera possible et entraînera une levée de la

1. Compléments

dégénérescence. Montrer que pour b fini les niveaux d'énergie deviennent

$$\begin{aligned} E_n^- &= E_n^{(1)} - 4 \frac{E_n^{(0)}}{q_0 a} e^{-q_0 b} \\ E_n^+ &= E_n^{(1)} + 4 \frac{E_n^{(0)}}{q_0 a} e^{-q_0 b}. \end{aligned} \quad (8)$$

- i) Déterminer les fonctions d'ondes associées à ces niveaux d'énergie.

4. Application à une barrière infiniment haute et mince.

- a) Comme $a \rightarrow 0$ et $V_0 \rightarrow \infty$ avec $aV_0 = C$ constant, en intégrant l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) = (E - V_0) \varphi(x) \quad (9)$$

entre 0 et a on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\varphi'(a) - \varphi'(0)) = \int_0^a (E - V_0) \varphi(x) dx = \int_0^1 (aE - aV_0) \varphi(ay) dy. \quad (10)$$

La limite $a \rightarrow 0$ donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-)) = -C \varphi(0). \quad (11)$$

- b) Dans chacune des régions nous avons (pour une onde plane incidente de la gauche)

$$\varphi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad x < 0 \quad (12)$$

$$\varphi_{II}(x) = F e^{ikx} \quad x > 0. \quad (13)$$

Les conditions de raccordement en $x = 0$ donnent

$$A + B = F \quad (14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (ikF - (A - B)ik) = -CF. \quad (15)$$

Dont on déduit

$$B = A \frac{2 - \frac{mC}{i\hbar k}}{\frac{mC}{i\hbar k} - 1} \quad (16)$$

$$F = \frac{A}{\frac{mc}{i\hbar k} - 1}. \quad (17)$$

4. Application à une barrière infiniment haute et mince.

c) Donc

$$T = \frac{1}{1 + \frac{m^2 C^2}{\hbar^2 k^2}}. \quad (18)$$

- d) On constate que $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ est tel que $qa \rightarrow 0$ lorsque $a \rightarrow 0$. En prenant la limite dans l'expression pour T on retrouve le même résultat pour le coefficient de transmission.
- e) Evaluer les coefficients de réflexion et de transmission de la barrière dans cette limite et étudier leurs variations en fonction de l'énergie E (en particulier les limites de basse et haute énergie).
- f) Est-ce que l'énergie peut être négative dans cette limite ?

1. Compléments

2. Relation d'incertitude et gravitation quantique

L'unification de la mécanique et de la relativité générale est un problème ouvert, mais certaines questions peuvent être abordées par des raisonnements semiquantitatifs, utilisant surtout des arguments d'analyse dimensionnelle. Le but de cet exercice est d'étudier ainsi une extension possible des inégalités de Heisenberg, prenant en compte des effets de gravitation quantique.

- En utilisant la constante de Planck \hbar , la constante de Newton G_N et la vitesse de la lumière, montrer que l'on peut construire une longueur (la longueur de Planck L_P), un temps (le temps de Planck T_P), une masse (la masse de Planck M_P) et une énergie (l'énergie de Planck E_P). On pourra remarquer que $E_P = M_P c^2$ et $T_P E_P = \hbar$.
- Calculez les valeurs numériques de L_P , M_P , E_P et T_P .
On rappelle que

$$\begin{aligned}c &= 299792458 \text{ m/s}, \\ \hbar &\simeq 1.054571726 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s} \\ G_N &\simeq 6.67384 \times 10^{-11} \text{ m}^3/(\text{kg s}^2).\end{aligned}\tag{1}$$

En 1923 Heisenberg justifia sa relation d'incertitude en considérant une mesure de position de l'électron par un « microscope », éclairé par des photons de longueur d'onde λ . À cause de la diffraction, la position de l'électron ne peut pas être connue avec une précision meilleure que λ , donc $\Delta x_H \geq \lambda$. Par ailleurs, pour obtenir une image, la direction du vecteur d'onde \vec{k} du photon ne peut pas être bien définie, donc l'électron va subir un recul aléatoire de l'ordre $\Delta p_H \simeq \hbar/\lambda$. En faisant le produit de ces deux quantités on a bien $\Delta x_H \Delta p_H \geq \hbar$.

On considère maintenant l'incertitude supplémentaire induite par une interaction *gravitationnelle* entre le photon et l'électron. On admettra pour cela qu'un photon d'énergie E_{ph} possède une masse effective (gravitationnelle) E_{ph}/c^2 .

- Calculer l'accélération subie par l'électron soumis à l'attraction gravitationnelle d'un photon d'énergie E_{ph} . On traitera cette interaction comme si le photon était à une distance fixe L de l'électron, et agissait pendant un temps L/c .
- En déduire la distance Δx_G parcourue par l'électron durant l'interaction. Et vérifier que L n'apparaît plus dans le résultat.

2. Relation d'incertitude et gravitation quantique

- c) En utilisant la relation entre l'impulsion du photon et son énergie $E_{ph} = p_{ph} c$, et en supposant que l'impulsion du photon est transférée à l'électron comme dans le calcul d'Heisenberg, écrire une relation entre Δx_G et Δp faisant intervenir la longueur de Planck L_P .
- d) On suppose que la dispersion totale Δx peut s'écrire $\Delta x = \Delta x_H + \gamma^2 \Delta x_G$ où γ est une constante sans dimension dépendant de la théorie particulière considérée. Montrez que la relation d'incertitude généralisée pour l'électron est donnée par

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} + \frac{\gamma^2 L_P^2}{\hbar} \Delta p. \quad (2)$$

- e) Montrer que cette relation a un minimum en fonction de Δp , qui correspond à

$$\Delta x \geq 2\gamma L_P. \quad (3)$$

Pouvez-vous Interpréter cette relation ? On pourra distinguer les situations usuelles ($\Delta p \ll \hbar/L_P$) et celles à très haute énergie ($\Delta p \sim \hbar/L_P$).

Comment se situent les « hautes énergies » ($E \sim E_P$) par rapport à celles atteintes dans la LHC ($14 \text{ TeV} = 14 \cdot 10^{12} \text{ eV}$) ?

0.1. Contexte physique

Dès 1916 Albert Einstein argumenta de la nécessité de quantifier le champs gravitationnel au même titre que l'on doit quantifier le champs électromagnétique

Gleichwohl müßten die Atome zufolge der inneratomischen Elektronenbewegung nicht nur elektromagnetische, sondern auch Gravitationsenergie ausstrahlen, wenn auch in winzigem Betrage. Da dies in Wahrheit in der Natur nicht zutreffen dürfte, so scheint es, daß die Quantentheorie nicht nur die Maxwellsche Elektrodynamik, sondern auch die neue Gravitations-theorie wird modifizieren müssen

Les arguments de cet exercice sont essentiellement dimensionnels, néanmoins la nécessité d'étendre la relation d'Heisenberg à haute énergie (pour les grandes valeurs de Δp) est une propriété de la théorie des cordes et d'autre théorie de gravité quantique. La constante γ dépend du schéma de quantification de la théorie. Cette relation d'incertitude étendue est particulièrement importante pour la compréhension de la physique de l'évaporation (quantique) des trous noirs.

Références :

1. A. Einstein, “Approximative Integration of the Field Equations of Gravitation,” Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (Math. Phys.) **1916** (1916) 688.
2. D. Amati, M. Ciafaloni and G. Veneziano, “Classical and Quantum Gravity Effects from Planckian Energy Superstring Collisions,” Int. J. Mod. Phys. A **3** (1988) 1615.

1. Corrigé

3. D. Amati, M. Ciafaloni and G. Veneziano, “Can Space-Time Be Probed Below the String Size?,” Phys. Lett. B **216** (1989) 41.
4. D. J. Gross and P. F. Mende, “String Theory Beyond the Planck Scale,” Nucl. Phys. B **303** (1988) 407.
5. E. Witten, Phys. Today, Apr. **24** (1996) – <http://www.sns.ias.edu/~witten/papers/Reflections.pdf>.
6. S. Hossenfelder, “Minimal Length Scale Scenarios for Quantum Gravity,” Living Rev. Rel. **16** (2013) 2 [arXiv :1203.6191 [gr-qc]].

1. Corrigé

a) L’analyse dimensionnelle donne

$$\begin{aligned} L_P &= \sqrt{\frac{\hbar G_N}{c^3}} \simeq 1.6 10^{-35} \text{ cm}, & T_P &= \sqrt{\frac{\hbar G_N}{c^5}} \simeq 0.54 10^{-43} \text{ s} \\ M_P &= \sqrt{\frac{\hbar c}{G_N}} \simeq 2.2 10^{-8} \text{ kg}, & E_P &= \sqrt{\frac{\hbar c^5}{G_N}} \simeq 1.2 10^{19} \text{ GeV}. \end{aligned} \quad (4)$$

b) On vérifie aisément les relations $E_P = M_P c^2$, $T_P E_P = \hbar$ ainsi que $L_P = T_p c$.

a) L’accélération de l’électron sous l’attraction gravitationnelle d’un photon d’énergie E_γ est

$$\ddot{\vec{r}} = -\frac{G_N}{r^3} \frac{E_\gamma}{c^2} \vec{r} \quad (5)$$

b) Dans la boîte de longueur L l’interaction dure un temps de l’ordre L/c donc

$$\Delta x_G \simeq \frac{G_N}{L^2} \frac{E_\gamma}{c^2} \left(\frac{L}{c}\right)^2 = \frac{G_N E_\gamma}{c^4} = \frac{G_N p}{c^3} = \frac{L_P^2 p}{\hbar}. \quad (6)$$

On remarquera que la taille caractéristique de la boîte n’apparaît plus dans cette relation.

c) On considère la relation d’incertitude étendue sur Δx

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} + \gamma^2 \frac{L_P^2}{\hbar} \Delta p. \quad (7)$$

Le membre de droite est une fonction de Δp ayant une valeur minimale pour $\Delta p_* = \hbar/(\gamma L_P)$. Ainsi nous trouvons que

$$\Delta x \geq 2\gamma L_P. \quad (8)$$

2. Relation d'incertitude et gravitation quantique

- d) La relation d'incertitude (7) indique que pour des énergies faibles $\Delta p \gg \hbar/L_P$ devant l'impulsion de Planck, les lois de la mécanique non-relativistes dominent. À très haute énergie la relation d'Heisenberg impliquerait une absence de relation d'incertitude entre Δx et Δp ce qui n'est pas possible avec l'image des créations de trous noirs prédit par la relativité générale. La relation d'incertitude étendue implique qu'à très haute énergie on ne peut pas résoudre des distances inférieures à la longueur de Planck, qui fournit la taille minimale des « grains d'espace-temps ». La valeur de γ dépend du schéma de quantification de la gravitation. Cette valeur peut-être déduite de calculs d'amplitudes à haute énergie en théorie des cordes. Les énergies sont supérieures de 15 ordres de grandeurs à celles obtenues dans le LHC.

3. Filtres à spins et Corrélation

1. Filtres

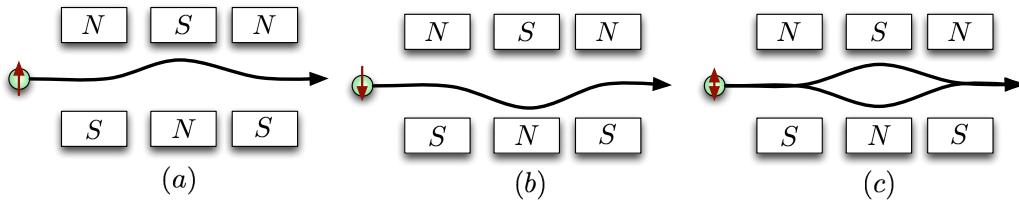
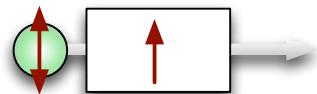


FIGURE 1. – Chemins suivis par un faisceau d'électron (a) polarisé $|\uparrow\rangle$, (b) polarisé $|\downarrow\rangle$ et (c) non polarisé.

On considère un ensemble de trois aimants avec une orientation alternée. Un électron avec un spin $|\uparrow\rangle$ suit le chemin vers le haut cf. fig. 1(a), avec un spin $|\downarrow\rangle$ le chemin vers le bas cf. fig. 1(b). Dans un faisceau d'électron non polarisé la moitié des électrons suivront le chemin haut et la moitié le chemin bas cf. fig. 1(c).

On place un block de plomb sur le chemin bas bloquant tous les électrons avec un spin $|\downarrow\rangle$, et seuls les électrons avec un spin $|\uparrow\rangle$ émergent du dispositif. On symbolise ce dispositif par un bloc avec une flèche verticale



De manière plus générale l'orientation du spin sélectionné est indiqué par l'angle d'inclinaison du dispositif.

Pour chacune des configurations suivantes donner la fraction des particules émergentes par rapport au total des particules incidentes

- a) Pour une source polarisée à 50% $|\uparrow\rangle$ et 50% $|\downarrow\rangle$, on place un filtre orienté d'un angle θ par rapport à la verticale. Quelle est le pourcentage des électrons traversant le filtre en fonction de θ



3. Filtres à spins et Corrélation

b) deux filtres orientés à 0 degré



c) un filtre à 0 degré et 90 degrés



d) un filtre à 0 degrés et à 180 degrés



e) un filtre à 0, 90 et 180 degrés

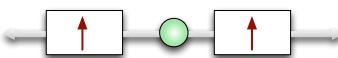


1.1. Corrélation

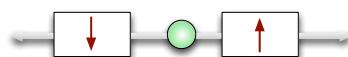
On s'intéresse maintenant aux corrélations avec une source radioactive qui émet une paire d'électrons non polarisée : par exemple un électron avec un spin $| \uparrow \rangle$ est émis vers la gauche et l'autre électron avec un spin $| \downarrow \rangle$ est émis vers la droite. On a aussi un émission avec le spin $| \downarrow \rangle$ vers la droite et le spin $| \uparrow \rangle$ vers la gauche.

Qu'observe-t-on dans les configurations suivantes avec des filtres orientés l'un orienté à 0 degrés

f) le second à 0 degré



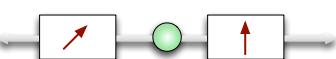
g) le second à 180 degrés



h) le second à 90 degrés



i) le second à 45 degrés



2. Corrigé

!!! REDIGER L EXPLICATION !!!

2.1. Filtres

Si la source émet un faisceau d'électron non polarisé, le premier filtre sélectionne 50% des électrons $|\uparrow\rangle$. Le taux d'électron transmis est

- a) Pour une source polarisée à 50% $|\uparrow\rangle$ et 50% $|\downarrow\rangle$, on place un filtre orienté d'un angle θ par rapport à la verticale. Quelle est le pourcentage des électrons traversant le filtre en fonction de θ : $P = 100 \cos^2 \frac{\theta}{2}$.
- b) deux filtres orientés à 0 degré : second filtre sélectionne 100% des électrons sortant du premier filtre. Donc à la sortie nous avons 50% des électrons émis par la source.
- c) un filtre à 0 degré et 90 degrés : le second détecteur sélectionne 50% des électrons sortant du premier filtre donc à la sortie nous avons 25% des électrons émis par la source.
- d) un filtre à 0 degrés et à 180 degrés : le second filtre bloque tous les électrons donc à la sortie nous avons 0% des électrons émis par la source.
- e) un filtre à 0, 90 et 180 degrés : Nous avons donc à chaque fois 50% des électrons sélectionnés pour un résultat de 12.5% des électrons émis par la source.

2.2. Corrélations

Comme la source émet des paires d'électrons avec un spin $|\uparrow\rangle_{\text{gauche}} \otimes |\downarrow\rangle_{\text{droite}}$ ou bien $|\downarrow\rangle_{\text{gauche}} \otimes |\uparrow\rangle_{\text{droite}}$ de sorte à ce que le spin total soit nul.

Après les filtres on détecte donc

- f) deux filtres orientés à 0 degré : soit un électron à gauche et rien à droite pour une paire $|\uparrow\rangle_{\text{gauche}} \otimes |\downarrow\rangle_{\text{droite}}$, soit un électron à droite et rien à gauche pour une paire $|\downarrow\rangle_{\text{gauche}} \otimes |\uparrow\rangle_{\text{droite}}$.
- g) un filtre à 0 degré et 180 degrés : soit un électron à gauche et à droite pour une paire $|\uparrow\rangle_{\text{droite}} \otimes |\downarrow\rangle_{\text{gauche}}$, soit rien ni à gauche, ni à droite pour une paire $|\downarrow\rangle_{\text{droite}} \otimes |\uparrow\rangle_{\text{gauche}}$.
- h) un filtre à 0 degrés et à 90 degrés : la moitié des électrons émergent du filtre à droite, et la moitié des électrons émergent du filtre à gauche. Lorsqu'un électron passe par le filtre gauche (orienté à 90 degrés), seulement la moitié du temps un électron émerge du filtre droit.
- i) un filtre à 0 degrés et à 45 degrés : on a la même réponse qu'au point précédent.

3. Filtres à spins et Corrélations

4. États cohérents de l'oscillateur harmonique

Le but de ce devoir est de décrire dans une première partie des états particuliers (“cohérents” ou “quasi-classiques”) de l’oscillateur harmonique, qui représentent la meilleure “approximation classique” du mouvement de l’oscillateur. La seconde partie du sujet décrit l’utilisation de ces états pour fabriquer une superposition quantique d’états du type “chaton de Schrödinger”[cf les derniers transparents de l’amphi 3 le 7 mai dernier].

- a) On considère comme en PC 5 un oscillateur harmonique décrit par un hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + k\hat{x}^2/2$. On pose $\omega = \sqrt{k/m}$. On utilise les observables réduites $\hat{X} = \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar}$ et $\hat{P} = \hat{p}/\sqrt{m\omega\hbar}$, ainsi que les opérateurs \hat{a} , \hat{a}^\dagger et \hat{N} définis par $\hat{a} = (\hat{X} + i\hat{P})/\sqrt{2}$, $\hat{a}^\dagger = (\hat{X} - i\hat{P})/\sqrt{2}$, et $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$. Dans toute la suite, on travaillera avec les opérateurs réduits \hat{X} et \hat{P} , et on utilisera les coordonnées réduites X et P en position et en impulsion.
- b) On note $|n\rangle$ les états propres de \hat{H} , de valeur propre $(n + 1/2)\hbar\omega$. Calculer $\langle X \rangle$, $\langle P \rangle$, ΔX^2 et ΔP^2 puis le produit $\Delta X \Delta P$ dans un état $|n\rangle$. Peut-on considérer que $\langle X \rangle$ et $\langle P \rangle$ évalués dans un état propre de \hat{H} ont un comportement classique ?
- c) On considère un état propre noté $|\alpha\rangle$ de l’opérateur d’annihilation : $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, où α est un nombre complexe arbitraire, et on décompose cet état sur la base des états $|n\rangle$: $|\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha)|n\rangle$.
 - i) Démontrer par récurrence que $c_n(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2/2)\alpha^n/\sqrt{n!}$. On utilisera les résultats de la PC 5 sur les propriétés de $\hat{a}|n\rangle$, ainsi que le fait que la loi de probabilité (normée) $P(n) = e^{-\mu}\mu^n/n!$ soit une loi de Poisson de paramètre μ , dont la valeur moyenne et la variance sont toutes deux égales à μ .
 - ii) Quelle est la probabilité pour qu’une mesure de l’observable \hat{N} donne le résultat n si le système est dans l’état $|\alpha\rangle$? En déduire $\langle N \rangle$ et ΔN . Montrer que $\Delta N/\langle N \rangle \ll 1$, si $\langle N \rangle$ est grand.
- d) On considère maintenant l’état $|\alpha e^{i\varphi}\rangle$.

4. États cohérents de l'oscillateur harmonique

- i) Montrer que $|\alpha e^{i\varphi}\rangle \neq e^{i\varphi}|\alpha\rangle$. Quelles sont les composantes de $|\alpha e^{i\varphi}\rangle$ sur la base des états $|n\rangle$?
- ii) Démontrer que si $|\psi(t=0)\rangle = |\alpha\rangle$, alors $|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$, où $|\alpha(t)\rangle$ est obtenu en changeant $|\alpha\rangle$ en $|\alpha(t)\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$.
- iii) Montrer que dans l'état $|\psi(t)\rangle$, on a $\alpha(t) = \langle \hat{X} \rangle / \sqrt{2} + i \langle \hat{P} \rangle / \sqrt{2}$. En supposant maintenant $\alpha = i\rho/\sqrt{2}$ pour $t = 0$ (où ρ est réel), calculer $\langle \hat{X} \rangle(t)$ et $\langle \hat{P} \rangle(t)$ dans l'état $|\psi(t)\rangle$, et montrer que l'on retrouve le mouvement classique de l'oscillateur pour $\langle X \rangle_t$ et $\langle P \rangle_t$.
- e) On suppose que l'oscillateur est dans l'état $|\psi(t)\rangle$.
 - i) Calculer ΔX_t et ΔP_t (on vérifiera en particulier que ces quantités sont indépendantes du temps). Que vaut le produit $\Delta X \Delta P$? Que peut-on en déduire sur les fonctions d'onde en X ou en P ?
 - ii) En utilisant l'équation $\hat{a}|\alpha(t)\rangle = \alpha(t)|\alpha(t)\rangle$, montrer que la fonction d'onde $\psi(X, t)$ de l'état $|\alpha(t)\rangle$ est donnée, à un facteur de phase global (on ne recalculera pas le facteur de normalisation), par :

$$\psi(X, t) = [2\pi\Delta X^2]^{-1/4} \exp \left[- \left(\frac{X - \langle X \rangle_t}{2\Delta X} \right)^2 + iX\langle P \rangle_t \right]$$

On peut montrer, de même, que la « fonction d'onde en P » de l'état $|\alpha(t)\rangle$ est donnée par :

$$\tilde{\psi}(P, t) = [2\pi\Delta P^2]^{-1/4} \exp \left[- \left(\frac{P - \langle P \rangle_t}{2\Delta P} \right)^2 + iP\langle X \rangle_t \right]$$

- f) Décrire qualitativement le mouvement de l'oscillateur en le comparant au mouvement classique. Que se passe-t-il en particulier si $|\alpha|$ devient très grand ?

1. Chaton de Schrödinger (“Schrödinger's kitten”)

On considère l'état $|\chi(t=0)\rangle = c_0(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)$ avec $\alpha = i\rho$ où ρ est un nombre réel grand devant un, et où c_0 est une constante de normalisation que l'on ne calculera pas.

- a) Calculer les fonctions d'ondes $\chi(X, t)$ et $\tilde{\chi}(P, t)$ associées à l'état $|\chi(t)\rangle$.

2. corrigé États cohérents de l'oscillateur harmonique

- b) En déduire les densités de probabilité $\Pi(X, t)$ et $\tilde{\Pi}(P, t)$ pour $\omega t = \pi/2$. On mesure la position de l'oscillateur à l'instant $t = \pi/2\omega$. Quelles valeurs peut-on trouver, et avec quelles probabilités ?
- c) D'après le formalisme de la mécanique quantique, le pendule est alors “des deux côtés à la fois”, ce qui est une situation de superposition quantique d'états macroscopiquement distincts, analogue au problème du “chat de Schrödinger”. Montrer que le caractère quantique de cette superposition apparaît sur la densité de probabilité $\tilde{\Pi}(P, t = \pi/2\omega)$, que l'on pourra comparer à celle que l'on aurait pour les états $|\alpha\rangle$ et $-|\alpha\rangle$ considérés séparément.

2. corrigé États cohérents de l'oscillateur harmonique

- a) $H = \hbar\Omega(N + \frac{1}{2})$, donc $H|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\Omega|n\rangle$ où n est un entier positif ou nul. On a $\langle n|H|n\rangle = \langle n|P|n\rangle = 0$ donc ces valeurs moyennes sont nulles à tout instant alors que l'énergie est arbitrairement élevée. Ceci ne correspond pas à un état classique « raisonnable ».
- b) On obtient $a|\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha)a|n\rangle$ d'où $\alpha \sum_n c_{n-1}(\alpha)|n-1\rangle = \sum_n c_n(\alpha)\sqrt{n}|n-1\rangle$ donc $c_n(\alpha) = \alpha c_{n-1}(\alpha)/\sqrt{n} = \dots = \alpha^n c_0(\alpha)/\sqrt{n!}$. En écrivant que $|\alpha\rangle$ est normé on a $1 = |c_0(\alpha)|^2 \sum_n |\alpha|^{2n}/n! = |c_0(\alpha)|^2 \exp(|\alpha|^2)$. Donc $c_0(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2/2)$ à un facteur de phase arbitraire près. $P(n) = |c_n(\alpha)|^2 = \exp(-|\alpha|^2)|\alpha|^{2n}/n!$. Loi de Poisson de paramètre $|\alpha|^2$ donc $\langle N \rangle = (\Delta N)^2 = |\alpha|^2$. Et $\Delta N/\langle N \rangle = |\alpha|^{-1} = 1/\sqrt{\langle N \rangle} \gg 1$ si $\langle N \rangle$ est grand.
- c) L'état étant décomposé sur les états propres de H , on a $|\psi(t)\rangle = \exp(-|\alpha|^2/2) \sum_n \alpha^n / \sqrt{n!} \exp(-i\Omega t(n + 1/2))|n\rangle = \exp(-i\Omega t/2) \exp(-|\alpha|^2/2) \sum_n (\alpha \exp(-i\Omega t))^n |n\rangle = \exp(-i\Omega t/2) |\alpha \exp(-i\Omega t)\rangle$.
- d) $\langle X \rangle(t) = \rho \sin(\Omega t)$, $\langle P \rangle(t) = \rho \cos(\Omega t)$. D'après les expressions de \hat{X} et \hat{P} en fonction des \hat{a} et \hat{a}^\dagger (cf. PC5), alors $(\Delta X)^2 = (\Delta P)^2 = 1/2$ ou en unités dimensionnées $\Delta X \Delta P = \hbar/2$. Le paquet d'onde est donc gaussien comme démontré en PC2. Explicitement nous avons $(\hat{X} + i\hat{P})|\alpha\rangle = \sqrt{2}\alpha|\alpha\rangle$ and $(X - \sqrt{2}\alpha)\psi(X) = -\frac{d\psi(x)}{dx}$, $\psi(x) = Cste \exp(-(x - \sqrt{2}\alpha)^2/2) = Cste \exp(-(x - \langle X \rangle - i\langle P \rangle)^2/2) = Cste \exp(iq) \exp(-(x - \langle X \rangle)^2/(4\Delta X^2) + iX\langle P \rangle)$. Avec les dimensions $\psi(x) = (2\pi\Delta X^2)^{-1/4} \exp(-(x - \langle x \rangle)^2/(2\Delta x)^2 + ix\langle p \rangle/\hbar)$. En représentation $|p\rangle$ on a $\tilde{\psi}(p) = (2\pi\Delta p^2)^{-1/4} \exp(-(p - \langle p \rangle)^2/(2\Delta p)^2 - ip\langle x \rangle/\hbar)$.

Chacun des deux paquets d'ondes oscille sans se déformer en suivant le mouvement classique. Si $|\alpha|$ est très grand, la largeur du paquet d'onde devient négligeable par rapport à l'excursion du mouvement, et le comportement de l'oscillateur est indiscernable du comportement classique.

3. corrigé Chaton de Schrödinger (« Schrödinger's kitten »)

- a) Il est plus commode de faire les calculs ci-dessous avec les positions et impulsions \hat{X} et \hat{P} sans dimensions. $\psi(X) = (2\pi\Delta X^2)^{-1/4}2^{-1/2} (\exp(-(X - \rho\sin(\Omega t))^2/2 + iX\rho\cos(\Omega t)) + \exp(-(X + \rho\sin(\Omega t))^2/2 - iX\rho\cos(\Omega t)))$ et $\tilde{\psi}(P) = (2\pi\Delta P^2)^{-1/4}2^{-1/2} (\exp(-(P - \rho\sin(\Omega t))^2/2 - iP\rho\cos(\Omega t)) + \exp(-(P + \rho\sin(\Omega t))^2/2 + iP\rho\cos(\Omega t)))$. On en déduit pour $\Omega t = \pi/2$ $P(X) = (4\pi)^{-1/2}|\exp(-(X - \rho)^2/2) + \exp(-(X + \rho)^2/2)|^2$. Deux gaussiennes centrées en $\pm\rho$. $\Pi(p) = (4\pi)^{-1/2} \exp(-P^2/2)|2\cos(P\rho)|^2$. La modulation de la distribution en P est la signature de la superposition quantique. Elle n'existe pas pour les états pris séparément, et disparaît extrêmement vite (d'autant plus vite que ρ est grand) en présence de dissipation.