

# Exercices et problèmes corrigés (Mécanique Quantique)

[Aimez notre page sur Facebook pour plus des exercices et des cours :](https://www.facebook.com/SciencesPourTous2014)

<https://www.facebook.com/SciencesPourTous2014>

• 1 - Paquet d'onde.

1 - On considère une particule libre de masse  $m$ , d'énergie  $E$  dont l'état peut être décrit par la fonction  $\psi(x, t)$ .

1) Soit la fonction d'onde  $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

a) Donner la relation qui existe entre  $\omega$  et  $k$  pour que  $\psi(x, t)$  soit solution de l'équation de Schrödinger. En déduire la valeur de l'énergie  $E$  en fonction de  $\omega$ .

b) Calculer la densité de probabilité  $|\psi(x, t)|^2$  de la particule. L'état du système peut-il être décrit par  $\psi(x, t)$  ainsi définie ?

2°) On propose la fonction  $\psi(x, t)$  définie par

$$\psi(x, t) = c \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} e^{-i\omega t} dk$$

où  $g(k)$  est une fonction du vecteur d'onde  $\vec{k}$ .

a) Justifier (sans faire de calculs) pourquoi  $\psi(x, t)$  est solution de l'équation de Schrödinger.  $\psi(x, t)$  représente-t-elle un état physique ?

b) A  $t = 0$  l'état du système est représenté par  $\psi(x, 0)$ .

- Pour quelle valeur de  $c$ ,  $g(k)$  serait la transformée de Fourier de la fonction  $\psi(x, 0)$  ?

- Quelle condition doit satisfaire  $g(k)$  pour que  $\psi(x, 0)$  soit normalisable ?

Extrait, Casa I, PC 2, Juin 1986.

- 1°) a) On considère une particule libre (dont l'énergie potentielle est nulle ou constante).

L'équation de Schrödinger s'écrit :  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t)$  (1)

Soit  $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$  solution de cette équation différentielle. Il vient alors :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi \quad \text{et} \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi$$

L'équation (1) devient donc :  $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$k$  et  $\omega$  sont donc liés par la relation :  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

L'énergie  $E$  est alors :  $E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

b) Calculons la densité de probabilité :  $|\psi(x, t)|^2 = \psi^* \psi = |A|^2$

On voit que la probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace. Une telle onde n'est pas de carré sommable, en toute rigueur, elle ne peut donc représenter un état physique pour la particule.

2°) a) Le principe de superposition indique que toute combinaison linéaire d'ondes planes

vérifiant  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$  sera ainsi solution de l'équation (1). Une telle superposition s'écrit :

$$\psi(x, t) = c \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Donc  $\psi(x, t)$  représente un état physique ; elle peut parfaitement être de carré sommable.

b) à l'instant  $t = 0$ , l'état du système est représenté par  $\psi(x, 0) = c \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk$

On voit que  $g(k)$  est tout simplement la transformée de Fourier de  $\psi(x, 0)$  à condition que  $c$  soit égale à  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ . Il vient alors :  $g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx$

• 2 - Paquet d'onde - Relation d'incertitude.

1- Donner, en justifiant, la forme générale de la fonction d'onde de cette microparticule.

2- Supposons que la fonction d'onde de cette microparticule est donnée à l'instant  $t = 0$  par :

$$\psi(x, 0) = \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip_0 x / \hbar} e^{ipx / \hbar} dp$$

où  $p_0$  est une constante positive et  $N$  une constante destinée à normer la fonction  $\psi(x, 0)$ .

a) Quelle est la transformée de Fourier  $\varphi(p)$  de  $\psi(x, 0)$  ?

Donner l'interprétation physique de  $\psi(x, 0)$  et  $\varphi(p)$ .

b) Calculer  $\psi(x, 0)$  et donner l'allure de  $|\psi(x, 0)|^2$  et  $|\varphi(p)|^2$ .

c) Supposons que  $|\psi(x, 0)|^2$  et  $|\varphi(p)|^2$  ne prennent respectivement des valeurs appréciables que dans des intervalles  $\Delta x$  et  $\Delta p$ . Que peut-on dire du produit  $\Delta x \Delta p$  ? Donner la signification physique de  $\Delta x$ ,  $\Delta p$  et  $\Delta x \Delta p$ .

d) Quelle est la probabilité  $\mathcal{P}(p_1, 0)$  pour qu'une mesure de l'impulsion effectuée à l'instant  $t = 0$ , donne un résultat compris entre  $-p_1$  et  $+p_1$  ? Etudier sommairement la fonction  $\mathcal{P}(p_1, 0)$ .

e) Donner la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  de cette microparticule à l'instant  $t$ . Que devient la probabilité ci-dessus  $\mathcal{P}(p_1, t)$  si la mesure est effectuée à l'instant  $t$ ? Interprétation.

Extrait, CASA I, MP 2, Mai 1986.

1°) D'après l'hypothèse de DE BROGLIE : à chaque microparticule, d'énergie  $E$  et d'impulsion  $\vec{p}$  on associe une onde plane :  $\psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$  où  $E = \hbar\omega$  et  $p = \hbar k$ .

Pour la microparticule, il peut exister plusieurs états possibles et donc d'après le principe de superposition, l'état le plus général est une combinaison linéaire de tous les états probables. Soit :

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Chaque onde plane est affectée d'un poids  $g(k)$ . Physiquement  $|g(k)|^2 dk$  représente la probabilité de trouver le nombre d'onde  $k$  compris entre  $k$  et  $k + dk$ .

2°) La fonction d'onde de cette microparticule est supposée à l'instant  $t = 0$  exprimée par :

$$\psi(x, 0) = \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|p|/p_0} e^{ipx/\hbar} dp \quad (1)$$

a) La fonction d'onde à l'instant  $t = 0$  est de la forme :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} \varphi(p) dp \quad (2)$$

où  $\varphi(p)$  représente la transformée de Fourier de  $\psi(x, 0)$ . En identifiant (1) avec (2), nous avons :

$$\varphi(p) = N e^{-|p|/p_0}$$

◆  $|\psi(x, 0)|^2$  : représente la probabilité de trouver la microparticule au point  $x$  à l'instant  $t = 0$

◆  $|\varphi(p)|^2$  : représente la probabilité de trouver la microparticule avec une impulsion  $p$  à l'instant  $t = 0$ .

b) Calculons la fonction d'onde à  $t = 0$  :

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|p|/p_0} e^{ipx/\hbar} dp \\ &= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[ \int_{-\infty}^0 e^{p/p_0} e^{ipx/\hbar} dp + \int_0^{+\infty} e^{-p/p_0} e^{ipx/\hbar} dp \right] \\ &= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[ \int_{-\infty}^0 e^{p(1/p_0 + ix/\hbar)} dp + \int_0^{+\infty} e^{-p(1/p_0 - ix/\hbar)} dp \right] \\ &= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left\{ \left[ \frac{e^{p(1/p_0 + ix/\hbar)}}{1/p_0 + ix/\hbar} \right]_{-\infty}^0 - \left[ \frac{e^{-p(1/p_0 - ix/\hbar)}}{1/p_0 - ix/\hbar} \right]_0^{+\infty} \right\} \end{aligned}$$

$$= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left( \frac{1}{1/p_0 + ix/\hbar} + \frac{1}{1/p_0 - ix/\hbar} \right)$$

Soit

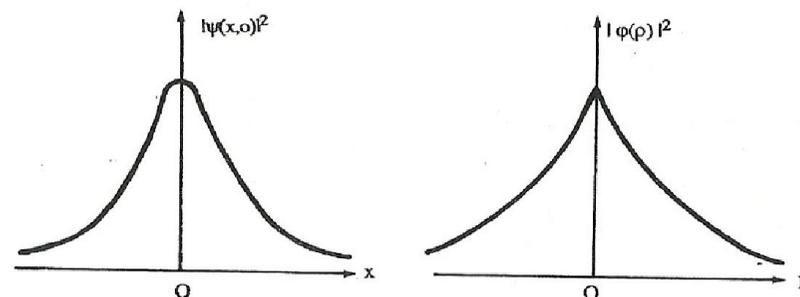
$$\psi(x, 0) = \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2/p_0}{x^2/\hbar^2 + 1/p_0^2}$$

On en déduit :

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{N^2}{2\pi\hbar} \left( \frac{2/p_0}{x^2/\hbar^2 + 1/p_0^2} \right)^2$$

Nous remarquons que lorsque  $x \rightarrow \pm\infty$ ,  $|\psi(x, 0)|^2 \rightarrow 0$  et que cette fonction présente un maximum en  $x = 0$ .

Les fonctions  $|\psi(x, 0)|^2$  et  $|\varphi(p)|^2$  sont représentées par les courbes ci-dessous :



c) ◆  $\Delta x \Delta p$  : ce produit est borné inférieurement et la valeur de cette borne dépend de la définition précise de  $\Delta x$  et de  $\Delta p$ .

◆  $\psi(x)$  est une courbe de Gauss, de largeur  $\Delta x$  : c'est l'intervalle dans lequel on peut trouver la microparticule lors d'une mesure de sa position à  $t = 0$  et centrée au point  $x = 0$ .

◆ Lors d'une mesure de l'impulsion de la microparticule, on ne peut trouver des valeurs que dans l'intervalle  $\Delta p$  (centrée sur  $p = 0$ ).

◆ Le produit  $\Delta x \Delta p$  est constant. Lors d'une mesure de la coordonnée  $x$  de la particule avec une incertitude sur le résultat de mesure  $\Delta x$ , on lui communique alors une impulsion  $p$  de

l'ordre de  $\hbar/\Delta p$  mais dont il est impossible de connaître à la fois, avec précision, la position et l'impulsion d'une microparticule. Ainsi lorsqu'on essaye de localiser la microparticule dans l'intervalle  $\Delta x$ , on augmente l'incertitude sur son impulsion. Cette impossibilité est fondamentale et constitue le principe d'incertitude de Heisenberg.

d) La probabilité  $\mathcal{P}(p_1, 0)$  est définie par :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(p_1, 0) &= \int_{-p_1}^{+p_1} |\varphi(p)|^2 dp \\ &= N^2 \int_{-p_1}^{+p_1} e^{-2|p|/p_0} dp \end{aligned}$$

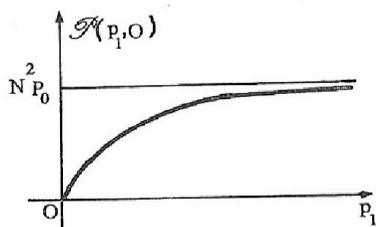
$$= N^2 \left[ \int_{-p_1}^0 e^{2p/p_0} dp + \int_0^{p_1} e^{-2p/p_0} dp \right]$$

Soit :

$$\mathcal{P}(p_1, 0) = N^2 p_0 (1 - e^{-2p_1/p_0})$$

La dérivée  $\frac{d\mathcal{P}}{dp_1} = 2N^2 e^{-2p_1/p_0}$  est toujours positive.

La fonction  $\mathcal{P}(p_1, 0)$  est représentée par la courbe ci-dessous :



e) A l'instant  $t$ , la fonction d'onde de cette microparticule est définie par :

$$\psi(x, t) = \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|p|/p_0} e^{i(px/\hbar - \omega t)} dp$$

avec

$$\varphi(p) = N e^{-|p|/p_0} e^{-i\omega t}$$

Soit alors

$$|\varphi(p)|^2 = N^2 e^{-2|p|/p_0} = |\varphi(p)|^2_{t=0}$$

Donc

$$\mathcal{P}(p_1, t) = \mathcal{P}(p_1, 0)$$

Nous remarquons que la probabilité  $\mathcal{P}$  est indépendante du temps : résultat qui est trivial puisque la microparticule se trouve dans le potentiel nul (elle est libre).

### 3 - Opérateur densité - Description par vecteur d'état et par opérateur densité - Propriétés - Populations et cohérences.

On considère dans l'espace des états  $\mathcal{E}$ , une base orthonormée  $\{|u_n\rangle\}$

Un vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  peut s'écrire sous la forme :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) \cdot |u_n\rangle$$

1° Déterminer la relation que doivent vérifier les coefficients,  $C_n(t)$  pour que  $|\psi(t)\rangle$  soit normé à l'unité (ce que l'on supposera par la suite).

2° On définit l'opérateur  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$

$\rho_{ij}(t)$  représente ses éléments de matrice dans la représentation  $\{|u_n\rangle\}$

a) Montrer que  $\rho(t)$  est hermitique

b) Montrer que  $\rho(t)$  est idempotent, soit  $\rho^2(t) = \rho(t)$

3° Calculer la trace de  $\rho(t)$ , soit  $\text{Tr} \rho(t)$ , dans la représentation  $\{|u_n\rangle\}$  (On rappelle que la trace est la somme des éléments de la diagonale principale).

4° Démontrer que la trace d'un produit de matrice est invariante par permutation circulaire, soit :  $\text{Tr} A.B.C = \text{Tr} B.C.A = \text{Tr} C.A.B$

Pour cela, commencer par un produit de matrice ; et introduire la relation

de fermeture  $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \mathbb{1}$  entre les 2 matrices :

5° Le système étant dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ . Déterminer l'expression de la valeur moyenne d'une observable  $A$  en fonction de  $\rho(t)$  et  $A$ .

Pour cela, partir de  $\text{Tr} \rho A = \text{Tr} \rho^2 A$  et utiliser le résultat du § 4.

6° En utilisant l'équation de Schrödinger (l'équation d'évolution) déterminer l'équation d'évolution de  $\rho(t)$ , soit  $\frac{d}{dt} \rho(t)$ . (Pour cela, dériver  $\rho(t)$  comme un produit).

7° Les valeurs propres de  $A$  étant notées  $a_n$  calculer en fonction de  $\rho(t)$  et  $P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$  la probabilité de trouver comme résultat de mesure de  $A$ , l'une des valeurs propres  $a_n$ . Pour cela, utiliser la propriété

$$P_{a_n} = \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle = \langle P_n \rangle$$

8° Dans le cas où les  $|u_n\rangle$  sont les états stationnaires de  $H$ .

a) montrer que l'on a :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{n,m}(t) = (E_n - E_m) \cdot \rho_{n,m}(t) \quad \text{et} \quad i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{n,n}(t) = 0$$

b) Calculer alors  $\rho_{n,m}(t)$

Extrait, Marrakech, PC 2 - MP 2, 1985

1° Soit  $|\psi(t)\rangle$  un vecteur d'état :  $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |u_n\rangle$  où les  $\{|u_n\rangle\}$  forment une base orthonormée de l'espace des états.

$|\psi(t)\rangle$  est normé :  $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_n |C_n(t)|^2 = 1$

2° On définit l'opérateur densité :  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$

L'opérateur  $\rho(t)$  est représenté, dans la base  $\{|u_n\rangle\}$ , par la matrice densité, dont les

éléments sont :  $\rho_{ij}(t) = \langle u_i | \rho(t) | u_j \rangle = \langle u_i | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_j \rangle$

Soit  $\rho_{ij}(t) = C_i(t) C_j^*(t)$  (1)

a)  $\rho^+(t) = \rho(t)$  : l'opérateur densité est donc hermitique.

b)  $\rho^2(t) = \rho(t) \rho(t) = | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | = \rho(t)$

3°) La relation  $\sum_n C_n^*(t) C_n(t) = 1$ , indique que la somme des éléments diagonaux (1) de la matrice densité est égale à 1.

En effet :  $1 = \sum_n C_n^*(t) C_n(t) = \sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Tr } \rho(t)$  (2)

4°)  $\text{Tr}(ABC) = \sum_n \langle u_n | A(BC) | u_n \rangle = \sum_{n,m} \langle u_n | A | u_m \rangle \langle u_m | BC | u_n \rangle$

$$= \sum_{n,m,p} \langle u_n | A | u_m \rangle \langle u_m | B | u_p \rangle \langle u_p | C | u_n \rangle$$

$$= \sum_p \langle u_p | C \underbrace{\sum_n | u_n \rangle \langle u_n |}_1 A \underbrace{\sum_m | u_m \rangle \langle u_m |}_1 B | u_p \rangle$$

$$= \sum_p \langle u_p | CAB | u_p \rangle = \text{Tr}(CAB)$$

$$= \sum_m \langle u_m | B \underbrace{\sum_p | u_p \rangle \langle u_p |}_1 C \underbrace{\sum_n | u_n \rangle \langle u_n |}_1 A | u_m \rangle$$

$$= \sum_m \langle u_m | BCA | u_m \rangle = \text{Tr}(BCA)$$

Donc :

$$\boxed{\text{Tr } ABC = \text{Tr } CAB = \text{Tr } BCA}$$

5°) Si A est une observable, on a :

$$\text{Tr } \rho A = \text{Tr } \rho^2 A = \text{Tr } A \rho^2 = \text{Tr } \rho A \rho$$

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho A &= \text{Tr} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \\ &= \langle A \rangle_t \text{Tr} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | = \langle A \rangle_t \text{Tr } \rho(t) \end{aligned}$$

Soit d'après (2) :

$$\boxed{\text{Tr } \rho A = \langle A \rangle_t} \quad (3)$$

6°) L'évolution dans le temps de l'opérateur  $\rho(t)$  se déduit de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = H(t) | \psi(t) \rangle \quad (4)$$

Le conjugué de cette équation s'écrit :  $-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H(t)$  ( $H$  étant hermitique). (5)

Calculons  $\frac{d}{dt} \rho(t)$  :  $\frac{d}{dt} \rho(t) = \left( \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) \langle \psi(t) | + | \psi(t) \rangle \frac{d}{dt} \langle \psi(t) |$

Compte tenu de (4) et (5), on obtient :  $\frac{d}{dt} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} H(t) \rho(t) - \frac{1}{i\hbar} \rho(t) H(t)$

Soit :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]} \quad (6)$$

7°) Calculons la probabilité  $\mathcal{P}(a_n)$  pour qu'une mesure de l'observable A donne le résultat

$a_n$ . Soit :

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi(t) | \mathcal{P}_n | \psi(t) \rangle = \langle P_n \rangle$$

en utilisant (3) :

$$\langle P_n \rangle = \text{Tr } \rho(t) P_n$$

soit alors :

$$\boxed{\mathcal{P}(a_n) = \text{Tr}(\rho(t) P_n) = \text{Tr}(P_n \rho(t))} \quad (7)$$

8°) a) Si les  $| u_n \rangle$  sont les états stationnaires de l'hamiltonien H, on a :

$$H | u_n \rangle = E_n | u_n \rangle$$

A partir de (6), on obtient :  $i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H, \rho(t)]$

Les éléments de matrice des deux membres de l'égalité nous exige :

d'une part,  $\langle u_n | i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) | u_m \rangle = i\hbar \langle u_n | \rho(t) | u_m \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{nm}(t)$

D'autre part,  $\langle u_n | [H, \rho(t)] | u_m \rangle = \langle u_n | H \rho(t) | u_m \rangle - \langle u_n | \rho(t) H | u_m \rangle$   
 $= E_n \langle u_n | \rho(t) | u_m \rangle - E_m \langle u_n | \rho(t) | u_m \rangle$   
 $= (E_n - E_m) \rho_{nm}(t)$

Il vient alors d'après (6) :

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{nm}(t) = (E_n - E_m) \rho_{nm}(t)} \quad (8)$$

Les termes diagonaux ( $n = m$ ):  $i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{nm}(t) = 0$  (9)

b) On en déduit:  $\rho_{nm}(t) = \text{constante}$

$$\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}$$

Remarque: On dit donc que les populations  $\rho_{nn}$  sont constantes, et les cohérences  $\rho$  oscillent aux fréquences de Bohr ( $\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ ) du système.

Compléments:

9°) Supposons que  $H(t)$  puisse s'écrire sous la forme  $H(t) = H_0 + H_1(t)$ .

On pose:  $\hat{\rho}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$

$$\hat{H}_1(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H_1(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

Donner l'équation d'évolution de  $\hat{\rho}(t)$

10°) Supposons maintenant qu'il s'agit d'un système conservatif ayant pour hamiltonien  $H = H_0$  ( $H_1(t) = 0$ ) et soit  $A$  une observable attachée au système. A l'instant  $t = 0$ , la mesure de l'observable  $A$  donne la valeur propre  $a$  que l'on suppose non dégénérée. Montrer que l'état du système à l'instant  $t$  est un état propre de l'observable  $A_H$  avec la valeur propre  $a$ :  $A_H = e^{-iH t/\hbar} A e^{iH t/\hbar}$

Extrait, CASA I, MP II, Juin 1986.

9°) L'évolution dans le temps de l'opérateur  $\hat{\rho}(t)$  s'écrit:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) &= \frac{i}{\hbar} H_0 \hat{\rho}(t) + e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{d}{dt} \rho(t) e^{iH_0 t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} H_0 \hat{\rho}(t) + e^{iH_0 t/\hbar} \left( \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \right) e^{-iH_0 t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} H_0 \hat{\rho}(t) - \frac{i}{\hbar} \left\{ e^{iH_0 t/\hbar} (H_0 \rho - \rho H_0 + H_1 \rho - \rho H_1) e^{-iH_0 t/\hbar} \right\} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} (H_1 \rho - \rho H_1) e^{-iH_0 t/\hbar} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left( e^{iH_0 t/\hbar} H_1 \rho e^{-iH_0 t/\hbar} - e^{iH_0 t/\hbar} \rho H_1 e^{-iH_0 t/\hbar} \right) \end{aligned}$$

Introduisons entre  $H_1$  et  $\rho$  d'une part et entre  $\rho$  et  $H_1$  d'autre part l'unité:

$$I = e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}$$

Il vient alors:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_1, \hat{\rho}(t)]$$

10°) Supposons qu'il s'agit d'un système conservatif où  $H = H_0$

Soit  $A$  une observable attachée à ce système. La mesure de  $A$  à  $t = 0$  donne la valeur  $a$  (non dégénérée), donc:

$$A |\varphi\rangle = a |\varphi\rangle$$

L'état du système immédiatement après la mesure est:  $|\varphi\rangle = \sum_n C_n(0) |u_n\rangle$

A l'instant  $t > 0$ , l'état du système est:  $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |u_n\rangle$

Si  $A_H = e^{-iH t/\hbar} A e^{iH t/\hbar}$ , alors on a  $A_H |\psi(t)\rangle = a |\psi(t)\rangle!$

$$A_H |\psi(t)\rangle = e^{-iH t/\hbar} A e^{iH t/\hbar} |\psi(t)\rangle$$

$$= e^{-iH t/\hbar} A \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} e^{iH t/\hbar} |u_n\rangle$$

$$= e^{-iH t/\hbar} A \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} e^{iH t/\hbar} |u_n\rangle$$

$$= e^{-iH t/\hbar} A \sum_n C_n(0) |u_n\rangle$$

$$= e^{-iH t/\hbar} A |\varphi\rangle = e^{-iH t/\hbar} a |\varphi\rangle$$

$$= a e^{-iH t/\hbar} |\varphi\rangle = a \sum_n C_n(0) e^{iH t/\hbar} |u_n\rangle$$

$$= a \sum_n C_n(0) e^{iE_n t/\hbar} |u_n\rangle = a |\psi(t)\rangle$$

Soit:

$$A_H |\psi(t)\rangle = a |\psi(t)\rangle$$

#### 4 - Opérateur d'évolution.

1) Soit  $A$  une observable agissant dans l'espace des états  $\mathcal{E}_x$  à  $n$  dimensions. Et soit  $(|\varphi_k\rangle)$  la base orthonormée propre de  $A$  ( $A |\varphi_k\rangle = a_k |\varphi_k\rangle$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ ). On définit l'opérateur linéaire

$U(k, l)$  par  $U(k, l) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$ .

1°) Calculer l'adjoint  $U^+(k, l)$  de  $U(k, l)$ .

2°) Evaluer le commutateur  $[A, U(k, l)]$  et en déduire  $[A, U(k, l)]$ .

3°) On appelle trace de l'opérateur linéaire  $B$  et l'on note  $\text{Tr}\{B\}$  la somme des éléments diagonaux de la matrice le représentant ; soit

$$\text{Tr}\{B\} = \sum_{k=1}^n B_{kk} = \sum_{k=1}^n \langle\varphi_k|B|\varphi_k\rangle \text{ dans la base } \{|\varphi_k\rangle\}.$$

Calculer la trace  $\text{Tr}\{U(k, l)\}$  de  $U(k, l)$ .

4°) Démontrer la relation :  $B = \sum_{k,l} B_{kl} U(k, l)$ . Pour cela on écrira

$$B = \mathbb{1} B \mathbb{1}.$$

5°) Montrer que :  $B_{kl} = \text{Tr}\{BU^+(k, l)\}$ .

Extrait, FES, MP 2 - PC 2, Janvier 1988.

II) Dans la description de Schrödinger les états d'un système quantique évoluent avec le temps conformément à la loi :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad \text{avec } U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$U(t, t_0)$  est un opérateur d'évolution.

1°) Montrer que l'opérateur  $U(t, t_0)$  satisfait à l'équation :

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \quad (H \text{ étant l'Hamiltonien du système}).$$

En déduire que  $U^+ = U^{-1}$  en utilisant (1) si  $H$  est hermitique.

2°) Donner l'expression de l'opérateur  $U(t, t_0)$  si  $H$  ne dépend pas du temps.

3°) Donner l'expression de l'opérateur  $U(t + dt, t)$ .

Extrait, CASA I, PC 2, Mai 1988.

D) 1°) L'opérateur linéaire  $U(k, l)$  est défini par :  $U(k, l) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$

Calculons son adjoint :

$$\langle\psi_2|U^+(k, l)|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|U(k, l)|\psi_1\rangle^* = \langle\psi_2|\varphi_k\rangle^*\langle\varphi_l|\psi_1\rangle^*$$

$$= \langle\varphi_k|\psi_2\rangle\langle\psi_1|\varphi_l\rangle = \langle\psi_1|\varphi_l\rangle\langle\varphi_k|\psi_2\rangle$$

$$= \langle\psi_1|U(l, k)|\psi_2\rangle$$

Soit donc :

$$U^+(k, l) = U(l, k)$$

2°) Appliquons le commutateur  $[A, U(k, l)]$  sur un état quelconque  $|\psi\rangle$  :

$$\begin{aligned} [A, U(k, l)]|\psi\rangle &= (A U(k, l) - U(k, l) A)|\psi\rangle \\ &= A|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|\psi\rangle - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|A|\psi\rangle \\ &= a_k|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|\psi\rangle - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|a_l^*|\psi\rangle \\ &= (a_k - a_l)|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|\psi\rangle \end{aligned}$$

car  $A$  est une observable, donc hermitique et ses valeurs propres sont réelles. Soit alors :

$$[A, U(k, l)] = (a_k - a_l) U(k, l)$$

On en déduit

$$[A, U(k, k)] = 0$$

3°) Calculons la trace de  $U(k, l)$  :  $\text{Tr}\{U(k, l)\} = \sum_{m=1}^n \langle\varphi_m|U(k, l)|\varphi_m\rangle$

$$= \sum_{m=1}^n \langle\varphi_m|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|\varphi_m\rangle = \sum_{m=1}^n \delta_{mk} \delta_{lm}$$

Soit :

$$\text{Tr} U(k, l) = \delta_{lk} \quad (\delta \text{ étant le symbole de Kronecker})$$

4°) Démontrons :

$$B = \sum_{k,l} B_{kl} U(k, l)$$

écrivons  $B$  :

$$B = \mathbb{1} B \mathbb{1}$$

$$= \sum_{k,l} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|B|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|$$

$$= \sum_{k,l} |\varphi_k\rangle B_{kl} \langle\varphi_l| \quad (B_{kl} \text{ est l'élément de matrice de } B)$$

soit

$$B = \sum_{k,l} B_{kl} U(k, l)$$

5°) Calculons :  $\text{Tr}\{BU^+(k, l)\} = \sum_{s=1}^n \langle\varphi_s|BU^+(k, l)|\varphi_s\rangle$

$$= \sum_{s=1}^n \langle\varphi_s|B|\varphi_l\rangle\langle\varphi_k|\varphi_s\rangle$$

$$\text{Tr} (BU^+(k, l)) = \sum_{s=1}^n B_{sl} \delta_{ks}$$

Soit :

$$\boxed{\text{Tr} BU^+(k, l) = B_{kl}}$$

II 1°) ♦ On définit l'opérateur d'évolution  $U(t, t_0)$  qui permet de déterminer l'état  $|\psi(t)\rangle$  à partir de  $|\psi(t_0)\rangle$  par :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1)$$

Nous allons chercher à montrer que :

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H |\psi\rangle$$

ou encore

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = HU(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

qu'on peut écrire sous la forme :

$$[i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0)] |\psi(t_0)\rangle = [H, U(t, t_0)] |\psi(t_0)\rangle \forall |\psi(t_0)\rangle$$

Soit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (2)$$

♦ Montrons que  $U^+ = U^{-1}$  :

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \quad (3)$$

le conjugué de cette équation s'écrit :

$$-i\hbar \frac{dU^+}{dt} = U^+H \quad (4)$$

Multiplions à gauche les deux membres de l'égalité (3) par  $U^+$  et ceux de (4) par  $U$  à droite.

$$i\hbar U^+ \frac{dU}{dt} = U^+HU$$

$$-i\hbar \frac{dU^+}{dt} U = U^+HU$$

En faisant la différence de ces deux dernières équations, nous obtenons :

$$i\hbar \left( U^+ \frac{dU}{dt} + \frac{dU^+}{dt} U \right) = 0$$

Il vient alors :

$$\frac{d}{dt} (U^+U) = 0$$

soit

$$U^+U = Cte = U^+(t_0, t_0) U(t_0, t_0)$$

Comme le ket  $|\psi(t_0)\rangle$  est quelconque, il ressort de (1) que :  $U(t_0, t_0) = 1$

donc

$$U^+(t, t_0) U(t, t_0) = 1$$

soit

$$\boxed{U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0)}$$

L'opérateur  $U$  est donc unitaire.

2°) L'équation (2) peut s'écrire :

$$\frac{dU(t, t_0)}{U(t, t_0)} = \frac{H}{i\hbar} dt$$

soit en intégrant ( $H$  étant indépendant du temps) :  $U(t, t_0) = e^{-iHt/i\hbar}$

3°) Expression de  $U(t+dt, t)$

Calculons l'opérateur d'évolution entre deux instants infiniment voisins. Pour cela, écrivons l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$\begin{aligned} d|\psi(t)\rangle &= |\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle dt \end{aligned}$$

Il vient alors :

$$|\psi(t+dt)\rangle = \left( I - \frac{i}{\hbar} H dt \right) |\psi(t)\rangle$$

on obtient donc :

$$\boxed{U(t+dt, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} H dt}$$

## 5 - Etallement d'un paquet d'ondes libres.

Soient  $X$  et  $P$  les opérateurs de position et d'impulsion d'une micro-particule libre.

1°) Montrer en appliquant le théorème d'Ehrenfest (micro-particule libre) que  $\langle X \rangle$  est une fonction linéaire du temps, la valeur moyenne  $\langle P \rangle$  restant constante. Que peut-on dire de  $\langle P^2 \rangle$  ?

2°) Ecrire les équations d'évolution des valeurs moyennes  $\langle X^2 \rangle$  et  $\langle XP + PX \rangle$ . Intégrer ces équations.

3°) En déduire qu'avec un choix convenable de l'origine des temps, l'écart quadratique moyen  $\Delta X$  est donné par :

$$(\Delta X)^2 = \frac{1}{m^2} (\Delta P)_0^2 t^2 + (\Delta X)_0^2$$

où  $(\Delta X)_0$  et  $(\Delta P)_0$  sont les écarts quadratiques moyens à l'instant initial. Comment varie en fonction du temps la largeur du paquet d'onde  $\Delta X$ . Donner l'interprétation physique.

Rappel : On définit l'écart quadratique moyen  $\Delta A$  d'un opérateur  $A$ , par :

$$\Delta A = \sqrt{(A - \langle A \rangle)^2} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

4°) Supposons maintenant que la micro-particule subit l'action d'un potentiel  $V(x) = -ax$  où  $a$  est une constante. Comment évolue les valeurs

moyennes de la position  $X$  et de l'impulsion  $P$  de cette microparticule ?  
 Comparer avec le mouvement classique.  
 Peut-on généraliser ce résultat à un potentiel quelconque ? Pourquoi ?

Extrait CASA I, MP 2, Mai 1986.

1°) Pour une observable  $A$  qui ne dépend pas explicitement du temps, le théorème d'Ehrenfest montre que :

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar} \langle [A, H] \rangle$$

L'hamiltonien du système est :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

↑  
ici  $V(X) = 0$  (particule libre)

Appliquons le théorème d'Ehrenfest aux observables  $X$  et  $P$  :

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

or  $[X, H] = \left[ X, \frac{P^2}{2m} + V(X) \right] = \frac{1}{2m} [X, P^2] + [X, V(X)] = \frac{iP\hbar}{m}$

↑  
 $= 0$

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

◆ Si  $A = P$  on a :

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

or  $[P, H] = \left[ P, \frac{P^2}{2m} \right] + [P, V(X)] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial X}$

↑  
 $= 0$

soit 
$$\frac{d\langle P \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial X} \right\rangle \quad (2)$$

dans notre cas  $V = 0$ , il vient alors : 
$$\frac{d\langle P \rangle}{dt} = 0 \quad (3)$$

Remarque : 
$$\frac{d\langle P \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial X} \right\rangle, \text{ soit } \langle F \rangle = \frac{d\langle P \rangle}{dt}$$

Cette relation représente la loi fondamentale de la dynamique.

L'équation (3) montre que : 
$$\langle P \rangle = \langle P \rangle_0 = Cte \quad (4)$$

la relation (1) devient : 
$$\frac{d\langle X \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle_0}{m} = Cte$$

\* Voir démonstration au complément de ce problème

Soit en intégrant :

$$\langle X \rangle = \frac{\langle P \rangle_0}{m} t + \langle X \rangle_0 \quad (5)$$

◆ Si maintenant  $A = P^2$ , le théorème d'Ehrenfest s'écrit : 
$$\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [P^2, H] \rangle$$

avec 
$$H = \frac{P^2}{2m}; \text{ on a : } [P^2, H] = 0$$

On en déduit : 
$$\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} = 0$$

soit 
$$\langle P^2 \rangle = \langle P^2 \rangle_0$$

L'observable  $P^2$  n'évolue pas au cours du temps.

2°) ◆ Par un raisonnement analogue, nous avons : 
$$\frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [X^2, H] \rangle$$

or 
$$[X^2, H] = [X^2, \frac{P^2}{2m}] = \frac{1}{2m} \{ X [X, P^2] + [X, P^2] X \}$$

$$= \frac{1}{2m} 2 i\hbar [XP + PX]$$

Il vient alors : 
$$\frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle$$

◆ Si  $A = XP + PX$  :

$$\frac{d\langle XP + PX \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [XP + PX, H] \rangle$$

or 
$$[XP + PX, H] = [XP, H] + [PX, H]$$

$$= X[P, H] + [X, H]P + P[X, H] + [P, H]X$$

avec 
$$H = \frac{P^2}{2m}$$

Il n'apparaît dans la solution plus que les deux commutateurs :

$$[X, H] = +i\hbar \frac{P}{m} \quad \text{et} \quad [P, H] = 0$$

On en déduit : 
$$\frac{d\langle XP + PX \rangle}{dt} = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle_0$$

comme  $\langle P^2 \rangle$  n'évolue pas au cours du temps, on a alors :

$$\frac{d\langle XP + PX \rangle}{dt} = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle_0$$

Nous obtenons donc un système de deux équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle \\ \frac{d\langle XP + PX \rangle}{dt} = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle_0 \end{array} \right. \quad (6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle \\ \frac{d\langle XP + PX \rangle}{dt} = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle_0 \end{array} \right. \quad (7)$$

Intégrons l'équation (7):  $\langle XP + PX \rangle = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle_0 t + \langle XP + PX \rangle_0$  (8)

Introduisons cette égalité dans l'équation (6):

$$\frac{d}{dt} \langle X^2 \rangle = \frac{2}{m^2} \langle P^2 \rangle_0 t + \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle_0$$

Soit en intégrant:

$$\langle X^2 \rangle = \frac{1}{m^2} \langle P^2 \rangle_0 t^2 + \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle_0 t + \langle X^2 \rangle_0$$
 (9)

3°) On définit l'écart quadratique moyen  $\Delta A$  d'un opérateur  $A$ , par:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Donc pour  $A = X$ , on a:  $(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$

En tenant compte des relations (5) et (9), nous aurons:

$$\begin{aligned} (\Delta X)^2 &= \frac{1}{m^2} \langle P^2 \rangle_0 t^2 + \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle_0 t + \langle X^2 \rangle_0 - \left( \frac{\langle P \rangle_0}{m} t + \langle X \rangle_0 \right)^2 \\ &= \frac{1}{m^2} (\langle P^2 \rangle_0 - \langle P \rangle_0^2) t^2 + \langle X^2 \rangle_0 - \langle X \rangle_0^2 + \frac{1}{m} \langle XP + PX \rangle_0 t - \frac{2}{m} \langle X \rangle_0 \langle P \rangle_0 t \end{aligned}$$

Si de plus on choisit à  $t = 0$ :  $\langle XP + PX \rangle_0 = 0$  et  $\langle X \rangle_0 = 0$

On a donc:

$$(\Delta X)^2 = \frac{1}{m^2} (\Delta P)_0^2 t^2 + (\Delta X)_0^2$$

Si  $t$  augmente, la largeur du paquet d'onde  $\Delta X$  augmente, ce qui correspond à l'étalement du paquet.

4°) Supposons maintenant que la microparticule subit l'action d'un potentiel  $V(X) = -ax$ . Le système d'équations d'évolution des valeurs moyennes de  $X$  et  $P$  devient (en tenant compte des équations (1) et (2))

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle = - \langle \frac{\partial V}{\partial X} \rangle = +a \end{cases}$$

Soit en intégrant:

$$\langle P \rangle = at + \langle P \rangle_0$$

$$\langle X \rangle = \frac{a}{2m} t^2 + \frac{\langle P \rangle_0}{m} t + \langle X \rangle_0$$

En mécanique classique:  $P = mV$ ,  $V = \frac{dx}{dt}$ ,  $F = \frac{dP}{dt} = m\gamma$ , les valeurs moyennes  $\langle X \rangle$  et  $\langle P \rangle$  évoluent donc comme pour une particule classique dans le potentiel  $V(X) = -aX$ .

Remarque: Ce résultat ne peut être généralisé à un potentiel quelconque car en général:

$$\left\langle \frac{dV(X)}{dX} \right\rangle \neq \left( \frac{dV(X)}{dX} \right)_{x = \langle X \rangle}$$

Compléments: 1°) Montrer que  $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$  pour une observable  $A$  qui ne dépend pas explicitement du temps:

2°) Démontrer que  $[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}$  et calculer  $[X, P^n]$ ,  $[P, X^n]$  et plus généralement  $[P, F(X)]$  et  $[X, G(P)]$

1°) On définit la valeur moyenne de  $A$  dans l'état  $\psi$  par:

$$\langle A \rangle = \int \psi^* A \psi dx$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \int \psi^* A \frac{d\psi}{dt} dx = \int \frac{d\psi^*}{dt} A \psi dx + \int \psi^* A \frac{d\psi}{dt} dx$$

or  $H\psi = i\hbar \frac{d\psi}{dt}$  et  $\psi^* H = -i\hbar \frac{d\psi^*}{dt}$

Il vient alors: 
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \int \psi^* HA \psi dx + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* AH \psi dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (AH - HA) \psi dx \end{aligned}$$

D'où en faisant intervenir  $[A, H] = (AH - HA)$ :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \quad \text{Théorème d'Ehrenfest}$$

2°) ♦ Pour  $n = 1$ ,  $[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}$  est vérifié. Supposons que cette relation

est vraie pour  $n-1$  soit  $[A, B^{n-1}] = \sum_{s=0}^{n-2} B^s [A, B] B^{n-s-2}$

Montrons que c'est vraie aussi pour  $n$ :

$$\begin{aligned} [A, B^n] &= [A, BB^{n-1}] = B [A, B^{n-1}] + [A, B] B^{n-1} \\ &= B \sum_{s=0}^{n-2} B^s [A, B] B^{n-s-2} + [A, B] B^{n-1} \\ &= \sum_{s=0}^{n-2} B^{s+1} [A, B] B^{n-s-2} + B^0 [A, B] B^{n-1} \\ &= \sum_{s=1}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1} \end{aligned}$$

↑  $s = -1$

Posons  $s' = s+1$  :

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

Soit pour  $s'=s$ , on trouve sans peine que :

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

◆ Si  $A = X$  et  $B = P$

a)  $[X, P^n] = \sum_{s=0}^{n-1} P^s [X, P] P^{n-s-1}$

Soit avec  $[X, P] = i\hbar$

$$[X, P^n] = \sum_{s=0}^{n-1} i\hbar P^s P^{n-s-1} = i\hbar \sum_{s=0}^{n-1} P^{n-1} = i\hbar n P^{n-1} \quad (10)$$

b)

$$[P, X^n] = \sum_{s=0}^{n-1} X^s (-i\hbar) X^{n-s-1} = -i\hbar n X^{n-1} \quad (11)$$

Déterminons l'action de  $[P, F(X)]$  sur une fonction  $\psi(x,y,z)$  arbitraire :

$$[P, F(X)]\psi = PF(X)\psi - F(X)P\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (F(X)\psi) - F(X) \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial F(X)}{\partial x} \psi$$

Par définition,  $F(X)\psi = F(x)\psi$ , d'où  $[P, F(X)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial X}$

(11) correspond à  $F(X) = X^n$

Par un raisonnement analogue, on peut montrer aisément en développant la fonction  $G(P)$

en série de puissance de  $P$  :  $[X, G(P)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial P}$

Nous remarquons que si  $G = P^n$ , la relation (10) est vérifiée.

### 6 - Point de vue (ou représentation) d'Heisenberg.

On étudie un système quantique dont le ket d'état à l'instant  $t$  est  $|\psi(t)\rangle$  et une grandeur physique de ce système, pouvant dépendre explicitement du temps, dont l'opérateur associé est  $A(t)$  (par exemple, pour un "quanton" l'opérateur  $X + vt \mathbb{1}$ )

1°) Rappeler l'expression de la valeur moyenne  $\langle A \rangle_t$ , de la grandeur physique à l'instant  $t$ .

2°) Rappeler l'expression du ket d'état à l'instant  $t$  en fonction du ket d'état initial  $|\psi(t_0)\rangle$  et de l'opérateur  $U$  d'évolution du système.

3°) Montrez qu'il existe - et trouvez en l'expression en fonction de  $A$  et  $U$  - un opérateur unique  $A_{H,t}(t)$  - dit opérateur associé à la grandeur

physique, en représentation du Heisenberg -, tel que sa valeur moyenne dans l'état initial  $|\psi(t_0)\rangle$  soit toujours égale à  $\langle A \rangle_t$ .

4°) Le système a pour "q - hamiltonien"  $H(t)$ . Rappeler l'équation de Schrödinger pour l'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  adoptant le point de vue de Heisenberg, plutôt que de calculer  $\langle A \rangle_t$  au moyen de la valeur moyenne de  $A(t)$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  variable et régi par l'équation de Schrödinger, on va calculer dans l'état fixe  $|\psi(t_0)\rangle$  la valeur moyenne de  $A_{H,t_0}(t)$ .

Il nous reste donc à trouver l'équation d'évolution de l'opérateur  $A_{H,t_0}(t)$  correspondant à l'équation d'évolution de Schrödinger pour l'état  $|\psi(t)\rangle$ . En utilisant l'expression trouvée au 3°), donner l'expression de  $A_{H,t_0}(t+dt)$  au premier ordre en  $dt$ , en fonction de  $A_{H,t_0}(t)$ ,  $U(t, t_0)$ ,  $\frac{\partial A}{\partial t}$  et du commutateur  $[A(t), H(t)]$ .

5°) Quelle expression en déduisez vous pour l'opération  $i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t)$  ?

6°) Montrez que l'opérateur  $A_{H,t_0}(t)$  obéit finalement à l'équation du mouvement - dite de Heisenberg -

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = [A_{H,t_0}(t), H_{H,t_0}(t)] + i\hbar \left( \frac{\partial A}{\partial t} \right)_{H,t_0}$$

↳ comme Heisenberg,  
 ↳ comme Hamilton ...

7°) On va maintenant appliquer ce charmant formalisme à un quanton dans un environnement que l'on espère bien représenté par le modèle de l'oscillateur harmonique à une dimension, à savoir un hamiltonien.

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

En reprenant l'expression trouvée au 5°) exprimez alors  $\frac{d}{dt} X_{H,t_0}(t)$  et

$\frac{d}{dt} P_{H,t_0}(t)$  en fonction de  $X_{H,t_0}(t)$ ,  $P_{H,t_0}(t)$ ,  $m$  et  $\omega$ .

8°) Quels sont les opérateurs initiaux  $X_{H,t_0}(t)$  et  $P_{H,t_0}(t)$  en fonction de  $X$  et  $P$  ? Intégrer ensuite le système d'équation couplées trouvé au 7°) pour avoir les solutions  $X_{H,t_0}(t)$  et  $P_{H,t_0}(t)$  en fonction de  $X$ ,  $P$ ,  $m$ ,  $\omega$  et  $t - t_0$ .

9°) Quelles sont les valeurs moyennes  $\langle X \rangle_t$  et  $\langle P \rangle_t$  en fonction de  $\langle X \rangle_{t_0}$ ,  $\langle P \rangle_{t_0}$ ,  $m$ ,  $\omega$  et  $t - t_0$  ?

1°) On définit la valeur moyenne de  $A$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  par :

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (1)$$

2°) Le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  s'exprime en fonction de  $|\psi(t_0)\rangle$  par la relation :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2)$$

où  $U(t, t_0)$  est l'opérateur d'évolution (cf. exercice 4)

3°) Par hypothèse, nous avons :  $\langle A_{H,t_0} \rangle_{\psi(t_0)} = \langle A \rangle_{\psi(t)}$  (2)

C'est à dire  $\langle \psi(t_0) | A_{H,t_0} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$

Soit en utilisant (2) :  $\langle \psi(t_0) | A_{H,t_0} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | U^+(t, t_0) A U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$

Cette égalité est vraie quelque soit l'état  $|\psi(t_0)\rangle$ . Donc :

$$A_{H,t_0} = U^+(t, t_0) A(t) U(t, t_0) \quad (3)$$

4°) ♦ L'équation de Schrödinger s'écrit :  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$

♦ Calculons l'opérateur  $A_{H,t_0}$  entre deux instants infiniment voisins en écrivant la

définition de la dérivée :  $\frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = \frac{A_{H,t_0}(t+dt) - A_{H,t_0}(t)}{dt}$

Donc  $A_{H,t_0}(t+dt) = A_{H,t_0}(t) + \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) dt$

$$= A_{H,t_0}(t) + \frac{d}{dt} (U^+ A U) dt \quad (4)$$

Pour calculer cette expression, on utilise les propriétés des opérateurs d'évolution établies

dans l'exercice 4. Soit :  $i\hbar \frac{dU}{dt} = HU$  ;  $-i\hbar \frac{dU^+}{dt} = U^+H$  (5)

Calculons :  $\frac{d}{dt} (U^+ A U) = \left( \frac{dU^+}{dt} \right) A U + U^+ \left( \frac{dA}{dt} \right) U + U^+ A \frac{dU}{dt}$

Soit en tenant compte des relations (5) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (U^+ A U) &= \frac{-1}{i\hbar} U^+ H A U + \frac{1}{i\hbar} U^+ A H U + U^+ \frac{dA}{dt} U \\ &= \frac{1}{i\hbar} (U^+ (A H - H A) U) + U^+ \frac{dA}{dt} U \end{aligned}$$

En utilisant le fait que  $[A, H] = AH - HA$ , on a :

$$\frac{d}{dt} (U^+ A U) = U^+ \frac{dA}{dt} U + \frac{1}{i\hbar} U^+ [A, H] U$$

La relation (4) devient alors :

$$A_{H,t_0}(t+dt) = A_{H,t_0}(t) + \left[ U^+ \frac{dA}{dt} U + \frac{1}{i\hbar} U^+ [A, H] U dt \right] \quad (6)$$

5°) On en déduit :

$$\frac{dA_{H,t_0}}{dt} = \frac{A_{H,t_0}(t+dt) - A_{H,t_0}(t)}{dt} = U^+ \frac{dA}{dt} U + \frac{1}{i\hbar} U^+ [A, H] U$$

Il vient alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = i\hbar U^+ \frac{dA}{dt} U + U^+ [A, H] U \quad (7)$$

6°) Dans le deuxième terme du second membre de l'expression (7), insérons entre  $A$  et  $H$  le produit  $UU^+$  qui est égal à l'opérateur identité (cf. exercice 4)

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = i\hbar U^+ \frac{dA}{dt} U + (U^+ A U U^+ H U - U^+ H U U^+ A U)$$

D'après la définition [3], nous trouvons :

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = i\hbar U^+ \frac{dA}{dt} U + (A_{H,t_0} H_{H,t_0} - H_{H,t_0} A_{H,t_0})$$

finalement :

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{H,t_0}(t) = [A_{H,t_0}(t), H_{H,t_0}(t)] + i\hbar \left( \frac{dA(t)}{dt} \right)_{H,t_0} \quad (8)$$

7°) Lorsque le système est représenté par le modèle de l'oscillateur harmonique à une dimension, l'hamiltonien est donnée par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

En reprenant l'expression (7) et en l'appliquant à  $A = X$  et  $A = P$ , nous obtenons en utilisant le fait que les observables  $X$  et  $P$  ne dépendent pas explicitement du temps :

$$i\hbar \frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt} = U^+ \left[ X, \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right] U = \frac{U^+}{2m} [X, P^2] U$$

Il n'apparaît dans la solution plus que le calcul du commutateur :  $[X, P^2] = 2i\hbar P$

On en déduit :

$$i\hbar \frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt} = \frac{2}{2m} i\hbar (U^+ P U) = \frac{i\hbar}{m} P_{H,t_0}(t)$$

soit

$$\frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt} = \frac{1}{m} P_{H,t_0}(t) \quad (9)$$

Par un raisonnement analogue, on obtient aisément :

$$\frac{dP_{H,t_0}(t)}{dt} = -m \omega^2 X_{H,t_0}(t) \quad (10)$$

8°) Nous désirons calculer les opérateurs initiaux  $X_{H,t_0}(t)$  et  $P_{H,t_0}(t)$ . En effet, d'après la définition (3),

$$X_{H,t_0}(t) = U^+(t_0, t_0) X U(t_0, t_0) = X$$

$$P_{H,t_0}(t) = U^+(t_0, t_0) P U(t_0, t_0) = P$$

car  $U^+(t_0, t_0) = U(t_0, t_0) = I$  (cf. exercice 4)

◆ Le système d'équations couplées est donné par (9) et (10)

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt} &= \frac{1}{m} P_{H,t_0}(t) & (9) \\ \frac{dP_{H,t_0}(t)}{dt} &= -m\omega^2 X_{H,t_0}(t) & (10) \end{aligned} \right.$$

En dérivant les équations (9) et (10), on obtient :

$$* \frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt} = \frac{1}{m} \frac{dP_{H,t_0}(t)}{dt} = -\omega^2 X_{H,t_0}(t) \quad \text{d'après la relation (10)}$$

La solution d'une telle équation différentielle du second ordre est de la forme :

$$X_{H,t_0}(t) = C_1 \cos \omega(t-t_0) + C_2 \sin \omega(t-t_0) \quad (11)$$

On en déduit  $P_{H,t_0}(t)$  à partir de (9) :  $P_{H,t_0}(t) = m \frac{dX_{H,t_0}(t)}{dt}$

$$P_{H,t_0}(t) = m\omega (-C_1 \sin \omega(t-t_0) + C_2 \cos \omega(t-t_0)) \quad (12)$$

En tenant compte des conditions initiales à  $t = t_0$ ,

$$X_{H,t_0}(t) = C_1 = X \quad ; \quad P_{H,t_0}(t) = m\omega C_2 = P$$

Soit :

$$C_1 = X \quad \text{et} \quad C_2 = \frac{P}{m\omega}$$

finalement (11) et (12) deviennent :

$$X_{H,t_0}(t) = X \cos \omega(t-t_0) + \frac{P}{m\omega} \sin \omega(t-t_0) \quad (13)$$

$$P_{H,t_0}(t) = P \cos \omega(t-t_0) - m\omega X \sin \omega(t-t_0) \quad (14)$$

9°) Calculons les moyennes de  $X_{H,t_0}(t)$  et  $P_{H,t_0}(t)$  lesquelles d'après la définition (2°) nous donne :

$$\langle X_{H,t_0}(t) \rangle_t = \langle X \rangle_{t_0} \quad \text{et} \quad \langle P_{H,t_0}(t) \rangle_t = \langle P \rangle_{t_0}$$

D'après (13) et (14), nous obtenons :

$$\langle X \rangle_t = \langle X \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) + \frac{\langle P \rangle_{t_0}}{m\omega} \sin \omega(t-t_0) \quad (15)$$

$$\langle P \rangle_t = \langle P \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) - m\omega \langle X \rangle_{t_0} \sin \omega(t-t_0) \quad (16)$$

En multipliant (15) par  $\sin \omega(t-t_0)$  et (16) par  $\frac{1}{m\omega} \cos \omega(t-t_0)$  et en ajoutant les équations obtenus membre à membre, on obtient :

$$\langle P \rangle_t = \langle X \rangle_{t_0} m\omega \sin \omega(t-t_0) + \langle P \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) \quad (17)$$

En reportant (17) dans (15), on a :

$$\langle X \rangle_{t_0} = \langle X \rangle_t \cos \omega(t-t_0) + \langle X \rangle_{t_0} \sin^2 \omega(t-t_0) + \frac{\langle P \rangle_{t_0}}{m\omega} \cos \omega(t-t_0) \sin \omega(t-t_0)$$

$$\text{soit} \quad \langle X \rangle_{t_0} \cos^2 \omega(t-t_0) = \left( \langle X \rangle_t + \frac{\langle P \rangle_{t_0}}{m\omega} \sin \omega(t-t_0) \right) \cos \omega(t-t_0)$$

$$\text{D'où finalement} \quad \langle X \rangle_t = \langle X \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) - \frac{\langle X \rangle_{t_0}}{m\omega} \sin \omega(t-t_0) \quad (18)$$

En résumé :

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_t &= \langle X \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) - \frac{\langle P \rangle_{t_0}}{m\omega} \sin \omega(t-t_0) \\ \langle P \rangle_t &= m\omega \langle X \rangle_{t_0} \sin \omega(t-t_0) + \langle P \rangle_{t_0} \cos \omega(t-t_0) \end{aligned}$$

Remarque : Les équations (9) et (10) généralisent le théorème d'Ehrenfest. Elles sont semblables à celles qui nous donnent l'évolution des grandeurs classiques  $x$  et  $p$ . Le seul avantage dans cette représentation de Heisenberg est de conduire à des équations qui rappellent d'une certaine manière celles de la mécanique classique.

## 7 - Inégalité de Heisenberg.

1°) Soit  $|\psi\rangle$  le ket d'état d'un système quantique,  $A$  et  $B$  deux opérateurs hermitiques.

Montrer que la condition nécessaire pour que  $|\varphi\rangle \stackrel{df}{=} (A + i\lambda B) |\psi\rangle$  ait une norme carrée non négative  $\forall \lambda \in \mathbb{R}$  est que les valeurs moyennes dans l'état  $|\psi\rangle$  satisfassent :

$$\langle A^2 \rangle_\psi \cdot \langle B^2 \rangle_\psi \geq \frac{1}{4} \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi^2$$

A propos...  $\left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi$  est-il un nombre réel ? pourquoi ?

2°) On a (ou on devrait avoir) coutume d'appeler "dispersion quantique" de la grandeur physique d'opérateur associé  $A$ ; dans l'état  $|\psi\rangle$ , la quantité  $(\Delta A)_\psi$  non négative telle que :

$$(\Delta A)_\psi^2 \stackrel{df}{=} \langle (A - \langle A \rangle_\psi \mathbb{1})^2 \rangle_\psi$$

Montrer que :  $(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi \right|$  (inégalité de Heisenberg, théorème qui n'a plus rien à voir avec un principe) (pour cela il pourra être utile de considérer les opérateurs  $\hat{A}_\psi \stackrel{df}{=} A - \langle A \rangle_\psi \mathbb{1}$ ,  $\hat{B}_\psi \stackrel{df}{=} \dots$ ). Qu'en est-il pour le produit  $(\Delta X)_\psi (\Delta P)_\psi$  dans le cas d'un quanton à une dimension dans l'état  $|\psi\rangle$  ?

3°) On va maintenant se placer du point de vue de Heisenberg problème

précédent. Montrer que  $(\Delta A)_t^2 = (A_{H,t_0}(t))_{t_0}^2$

4°) Montrer que  $(\Delta A)_{t_1} (\Delta B)_{t_2} \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[A_{H,t_0}(t_1), B_{H,t_0}(t_2)]}{i} \right\rangle_{t_0} \right|$ .

5°) Appliquer cette inégalité au produit  $(\Delta X)_{t_0} (\Delta P)_t$  dans le cas de l'oscillateur harmonique, à l'aide des solutions trouvées au problème précédent 8°). Quelle est la borne inférieure de  $(\Delta X)_{t_0} (\Delta P)_t$  lorsque  $t = t_0 + \pi / 2\omega$  ?

1°) Considérons le ket :  $|\varphi\rangle = (A + i\lambda B) |\psi\rangle$

où  $\lambda$  est un réel quelconque ; quel que soit  $\lambda$ , le carré de la norme  $\langle \varphi | \varphi \rangle$  est positif, ce qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \langle \psi | (A - i\lambda B)(A + i\lambda B) |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | A^2 |\psi\rangle + i\lambda \langle \psi | [A, B] |\psi\rangle + \lambda^2 \langle \psi | B^2 |\psi\rangle \\ &= \lambda^2 \langle B^2 \rangle_\psi - \lambda \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi + \langle A^2 \rangle_\psi \geq 0 \end{aligned}$$

Le discriminant de ce trinôme du second degré en  $\lambda$  est donc négatif ou nul. Soit :

$$\Delta = \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi^2 - 4 \langle A^2 \rangle_\psi \langle B^2 \rangle_\psi \leq 0$$

Nous avons donc :

$$\langle A^2 \rangle_\psi \langle B^2 \rangle_\psi \geq \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi^2 \quad (1)$$

◆ Les opérateurs  $A$  et  $B$  sont supposés hermitiques, donc  $[A, B]$  est antihermitique ; il vient alors que  $\frac{[A, B]}{i}$  est hermitique. De plus la valeur moyenne d'un opérateur  $D$  hermitique quelconque  $\langle \psi | D | \psi \rangle$  est réelle quel que soit  $|\psi\rangle$ .

On en déduit que  $\left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi$  est un nombre réel.

2°) Considérons les opérateurs :  $\hat{A}_\psi = A - \langle A \rangle_\psi \mathbb{1}$  et  $\hat{B}_\psi = B - \langle B \rangle_\psi \mathbb{1}$

L'inégalité (1) est vérifiée quels que soient  $A$  et  $B$  hermitiques, ce qui est le cas pour  $\hat{A}_\psi$  et  $\hat{B}_\psi$ . Donc d'après (1), nous obtenons :  $\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi \langle \hat{B}^2 \rangle_\psi \geq \frac{1}{4} \left\langle \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i} \right\rangle_\psi^2$  (3)

En se reportant à la définition de l'écart quadratique moyen et en utilisant (2), nous avons :

$$(\Delta A)_\psi = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi} \quad \text{et} \quad (\Delta B)_\psi = \sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle_\psi}$$

L'inégalité (3) s'écrit alors :  $(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{4} \left\langle \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i} \right\rangle_\psi^2$

remarquons que  $[\hat{A}, \hat{B}] = [A, B]$  (évident) et donc :

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[A, B]}{i} \right\rangle_\psi \right| \quad (4)$$

◆ Pour le cas d'un qanton à une dimension dans l'état  $|\psi\rangle$  :

$$(\Delta X)_\psi (\Delta P)_\psi \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[X, P]}{i} \right\rangle_\psi \right| = \frac{1}{2} \hbar$$

Remarque : Si deux observables sont conjuguées, il existe une limite inférieure précise au produit  $\Delta X \Delta P$ . Cette borne inférieure est atteinte pour l'état fondamental.

3°) On cherche à montrer que  $(\Delta A)_t^2 = (\Delta A_{H,t_0}(t))_{t_0}^2$

Par définition  $(\Delta A)_t^2 = \langle (A - \langle A \rangle_t) \mathbb{1} \rangle_t^2 = \langle A^2 \rangle_t - \langle A \rangle_t^2$

D'après l'exercice 6 on a :  $\langle A \rangle_t = \langle X_{H,t_0}(t) \rangle_{t_0}$

Montrons que  $\langle A^2 \rangle_t = \langle A_{H,t_0}^2(t) \rangle_{t_0}$  ; en effet :

$$\begin{aligned} \langle \psi | A^2 | \psi \rangle &= \langle \psi(t_0) | U^\dagger A_t^2 U | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | U^\dagger A_t U U^\dagger A_t U | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | A_{H,t_0}^2(t) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle A_{H,t_0}^2(t) \rangle_{t_0} \end{aligned}$$

Il vient alors :

$$(\Delta A)_t^2 = \langle A_{H,t_0}^2 \rangle_t - \langle A_{H,t_0} \rangle_t^2 = (\Delta A_{H,t_0})_{t_0}^2 \quad (5)$$

4°) En considérant (5), on a :  $(\Delta A)_{t_1}^2 = (\Delta A_{H,t_0})_{t_0}^2$

Soit d'après (4) :  $(\Delta A)_{t_1} (\Delta B)_{t_2} \geq \frac{1}{4} \left[ \left\langle \frac{[A_{H,t_0}(t_1), B_{H,t_0}(t_2)]}{i} \right\rangle_{t_0} \right]^2$

donc :

$$(\Delta A)_{t_1} (\Delta B)_{t_2} \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[A_{H,t_0}(t_1), B_{H,t_0}(t_2)]}{i} \right\rangle_{t_0} \right| \quad (6)$$

5°) Appliquons cette dernière expression à  $X$  et  $P$  :

$$(\Delta A)_{t_0} (\Delta P)_t \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{[X_{H,t_0}(t_0), P_{H,t_0}(t_1)]}{i} \right\rangle_{t_0} \right| \quad (7)$$

or d'après l'exercice 6, on a :  $X_{H,t_0}(t_0) = X$

et

$$P_{H,t_0}(t) = P \cos \omega(t - t_0) - m \omega X \sin \omega(t - t_0)$$

Soit  $[X_{H,t_0}(t), P_{H,t_0}(t)] = [X, P \cos \omega(t - t_0)] = i\hbar \cos \omega(t - t_0)$

L'expression (7) devient alors :  $(\Delta A)_{t_0} (\Delta P)_t \geq \frac{1}{2} \hbar |\cos \omega(t - t_0)|$

Lorsque  $t = t_0 + \frac{\pi}{2\omega}$ ,  $\cos \omega(t - t_0) = \cos \frac{\pi}{2} = 0$

d'où  $(\Delta A)_{t_0} (\Delta P)_t \geq 0$

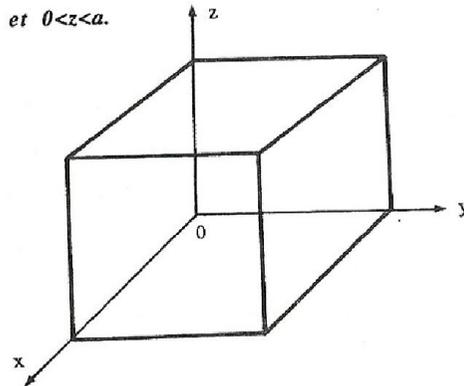
La borne inférieure de  $(\Delta A)_{t_0} (\Delta P)_t$  est donc nulle.

**8 - Particule confinée dans une boîte cubique.**

1) On veut étudier une particule quantique de masse :  $m$ , confinée dans une portion cubique de l'espace. Dans cette portion règne un potentiel nul et en dehors, le potentiel est infini.

$V(x) = 0$ , pour :  $0 < x < a$ ,  $0 < y < a$  et  $0 < z < a$ .

$V(x) = \infty$ , ailleurs.



1°) Quelle est la probabilité de trouver la particule dans la région où le potentiel est infini ?

2°) Les fonctions d'ondes solutions de l'équation aux énergies sont de la forme :  $\psi(x, y, z) = A_n(x) \cdot B_l(y) \cdot C_m(z)$  avec :  $n, l, m$  entiers "non nul".

L'hamiltonien est alors :  $H = H_x + H_y + H_z$  et l'énergie est :  $E_{nlm} = E_n + E_l + E_m$ .

Donner les fonctions propres et les valeurs propres de l'Hamiltonien  $H$ .

3°) Normaliser la fonction d'onde  $\psi(x, y, z)$ .

4°) Etudier la multiplicité (la dégénérescence) des 3 premiers niveaux d'énergie.

N.B : On donnera un tableau de la forme :

$n$	$l$	$m$	$n^2$	$l^2$	$m^2$	$E_{nlm}$	multiplicité

5°) Calculer le commutateur  $[x, p^2]$

Peut-on alors mesurer la position et l'énergie simultanément ?

Extrait, El Jadida, PC2, Janvier 1987.

1°) La particule est confinée dans l'enceinte, la probabilité de trouver la particule en dehors de la boîte cubique est donc nulle.

2°) Il s'agit de résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$H\psi(x, y, z) = E_{n,l,m} \psi(x, y, z) \tag{1}$$

avec  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$  ( $V(x, y, z) = 0$ )

On cherche les solutions particulières de la forme :  $\psi(x, y, z) = A(x) B(y) C(z)$

L'équation de Schrödinger (1) devient :  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE_{n,l,m}}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi$

$$B(y) C(z) \frac{d^2 A}{dx^2} + A(x) C(z) \frac{d^2 B}{dy^2} + A(x) B(y) \frac{d^2 C}{dz^2} = -k^2 A(x) B(y) C(z)$$

Divisons les deux membres par  $A.B.C$ , on obtient :

$$\frac{1}{A} \frac{d^2 A}{dx^2} = - \left( \frac{1}{B} \frac{d^2 B}{dy^2} + \frac{1}{C} \frac{d^2 C}{dz^2} + k^2 \right)$$

fonction de  $x$  seul                      fonction de  $y$  et  $z$

Chacun des membres est donc constant et vaut :  $\frac{1}{A} \frac{d^2 A}{dx^2} = -k_x^2$  (2)

On a également :  $\frac{1}{B} \frac{d^2 B}{dy^2} = - \left( \frac{1}{C} \frac{d^2 C}{dz^2} + k^2 - k_x^2 \right) = -k_y^2$  (3)

et  $\frac{1}{C} \frac{d^2 C}{dz^2} = -k_z^2$  (4)

avec  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2$

Les solutions de (2), (3), (4) :  $A(x) = A_1 \sin(k_x x + \varphi_1)$

$B(y) = A_2 \sin(k_y y + \varphi_2)$

$C(z) = A_3 \sin(k_z z + \varphi_3)$

et donc  $\psi(x, y, z)$  s'écrit :  $\psi(x, y, z) = A \sin(k_x x + \varphi_1) \sin(k_y y + \varphi_2) \sin(k_z z + \varphi_3)$   
 Or la fonction d'onde est identiquement nulle à l'extérieur de la boîte et en particulier pour  $x = 0$  ;  $y = 0$  ;  $z = 0$  ; et pour  $x = a$  ;  $y = a$  et  $z = a$ .

Ces conditions nous exigent :  $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_3 = 0$

$$\text{et } \begin{cases} \sin k_x a = 0 & \rightarrow & k_x = n\pi/a \\ \sin k_y a = 0 & \rightarrow & k_y = l\pi/a \\ \sin k_z a = 0 & \rightarrow & k_z = m\pi/a \end{cases}$$

La fonction d'onde  $\psi(x, y, z)$  s'écrit donc :

$$\psi(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{l\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi z}{a}\right)$$

Les valeurs possibles de l'énergie sont :  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  avec  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$

soit :  $E_{n,l,m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 + l^2 + m^2)$  ou  $n, l, m$  sont des entiers positifs.

L'énergie de la particule est donc quantifiée et dépend des nombres quantiques  $n, l$  et  $m$ .

3°) La condition de normalisation de la fonction d'onde s'écrit :

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1$$

soit alors :  $A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{l\pi y}{a}\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{m\pi z}{a}\right) dz = 1$

Chaque intégrale vaut  $\frac{a}{2}$ . Il vient alors :  $A^2 \frac{a^3}{8} = 1$  soit

$$A = \sqrt{\frac{8}{a^3}}$$

4°) A une même valeur propre  $E$  correspond plusieurs fonctions propres différentes. Dans une telle situation, on dit que la valeur propre est dégénérée, le degré de dégénérescence étant égal au nombre de fonctions propres indépendantes correspondant à cette même valeur propre.

La multiplication des trois premiers niveaux d'énergie est représentée dans le tableau ci-après.

On pose :  $E_1 = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

$n$	$l$	$m$	$n^2$	$l^2$	$m^2$	$E_{n,l,m}$	multiplicité
1	1	1	1	1	1	$E_1$	niveau fondamental 1 fois dégénéré
1	1	2	1	1	4	$2E_1$	2 <sup>ème</sup> niveau d'énergie 3 fois dégénéré
1	2	1	1	4	1	$2E_1$	
2	1	1	4	1	1	$2E_1$	
1	2	2	1	4	4	$3E_1$	3 <sup>ème</sup> niveau d'énergie 3 fois dégénéré
2	1	2	4	1	4	$3E_1$	
2	2	1	4	4	1	$3E_1$	

5°) Commutateur  $[X, P^2]$  :

$$[X, P^2] = P[X, P] + [X, P]P = 2i\hbar P$$

L'énergie de la particule étant  $\frac{P^2}{2m}$ , ne commutant pas avec la position  $X$ . Donc, on ne peut pas mesurer simultanément l'énergie et la position de la particule.

## 9 - Puits carré de potentiel : Etats liés et non liés.

On considère le puits de potentiel défini par :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } |x| > a$$

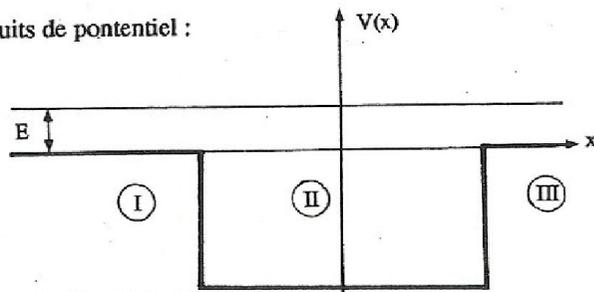
$$V(x) = -V_0 \quad \text{pour } |x| < a ; V_0 > 0$$

1°) Discuter la nature du spectre d'énergie d'une microparticule dans ce potentiel.

2°) Calculer les fonctions d'onde associées aux états stationnaires d'une microparticule de masse  $m$ , d'énergie  $E > 0$ , arrivant de la région  $x = -\infty$ . (dans la région  $x > a$ , on cherchera la solution dont le comportement est celui d'une onde qui a pour amplitude  $\gamma$  et qui se propage dans la région des  $x$  positifs. Les conditions de continuité en  $x = a$  et  $x = -a$  suffisent alors à déterminer les amplitudes des différentes solutions en fonction de  $\gamma$ ).

3°) Calculer les coefficients de transmission et de réflexion. (toujours dans le cas  $E > 0$ ).

1°) Représentation graphique du puits de potentiel :



◆ Si  $-V_0 < E < 0$  ; Les états sont liés et le spectre d'énergie est discret

◆ Si  $E > 0$  ; Les états sont non liés et le spectre d'énergie est continu

\* Notre étude se limite au cas où  $E > 0$ . Dans ce cas, on distingue trois régions I, II et III.

Ecrivons l'équation aux états stationnaires d'énergie dans chacune de ces trois régions :

région I : 
$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE\psi_1}{\hbar^2} = 0 \quad (1)$$

La solution de l'équation (1) s'écrit :  $\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$  avec :  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

région II : 
$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\psi_2 = 0 \quad (2)$$

solution :  $\psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$  avec :  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$

région III : Le raisonnement est analogue à (1) et admet comme solution :

$$\psi_3(x) = \gamma e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

$A_1 e^{ikx}$  représente l'onde incidente,  $B_1 e^{-ikx}$  l'onde réfléchiée par le saut fini de potentiel.  $\gamma e^{ikx}$  est l'onde transmise qui s'éloigne vers l'infini,  $B_3 e^{-ikx}$  est l'onde de retour de l'infini. Ainsi par hypothèse, on aura  $B_3 = 0$ . En résumé, nous donnons les fonctions d'onde sous les formes suivantes pour alléger les écritures et par commodité des calculs qui suivent :

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik(x+a)} + B_1 e^{-ik(x+a)} \quad x < -a$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{iq(x-a)} + B_2 e^{-iq(x-a)} \quad -a \leq x \leq a$$

$$\psi_3(x) = \gamma e^{ik(x-a)} \quad x > a$$

Ecrivons les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = -a$  et  $x = +a$  :

$$x = -a \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 e^{-2iqa} + B_2 e^{2iqa} \\ ik(A_1 - B_1) = iq(A_2 e^{-2iqa} - B_2 e^{2iqa}) \end{cases} \quad (4) \quad x = a \begin{cases} A_2 + B_2 = \gamma \\ iq(A_2 - B_2) = ik\gamma \end{cases} \quad (5)$$

La résolution des équations (4) et (5) nous permettent d'écrire :

$$2A_2 = \gamma \left(1 + \frac{k}{q}\right) \quad ; \quad 2B_2 = \gamma \left(1 - \frac{k}{q}\right) \quad (6)$$

$$\begin{cases} 2A_1 = A_2 \left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{-2iqa} + B_2 \left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{2iqa} \\ 2B_1 = A_2 \left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{-2iqa} + B_2 \left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{2iqa} \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} 2A_1 = A_2 \left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{-2iqa} + B_2 \left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{2iqa} \\ 2B_1 = A_2 \left(1 - \frac{q}{k}\right) e^{-2iqa} + B_2 \left(1 + \frac{q}{k}\right) e^{2iqa} \end{cases} \quad (8)$$

Remplaçons  $A_2$  et  $B_2$  par leur valeurs respectives dans (7) et (8) :

$$2A_1 = \frac{\gamma}{2} \left[ \left(1 + \frac{q}{k}\right) \left(1 + \frac{k}{q}\right) e^{-2iqa} + \left(1 - \frac{q}{k}\right) \left(1 - \frac{k}{q}\right) e^{2iqa} \right]$$

$$2B_1 = \frac{\gamma}{2} \left[ \left(1 - \frac{q}{k}\right) \left(1 + \frac{k}{q}\right) e^{-2iqa} + \left(1 + \frac{q}{k}\right) \left(1 - \frac{k}{q}\right) e^{2iqa} \right]$$

ou encore  $A_1 = \frac{\gamma}{4} \left[ \frac{(k+q)^2}{qk} e^{-2iqa} - \frac{(q-k)^2}{qk} e^{2iqa} \right] \quad (9)$

$$B_1 = \frac{\gamma}{4} \frac{k^2 - q^2}{qk} (e^{-2iqa} - e^{2iqa}) = -\frac{\gamma}{2} i \frac{k^2 - q^2}{kq} \sin 2qa \quad (10)$$

3°) ◆ Le coefficient de transmission est défini par :  $T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|\psi_t|^2}{|\psi_i|^2} = \frac{|\gamma|^2}{|A_1|^2}$

Compte tenu de (9), on obtient :  $\frac{1}{T} = \frac{(q+k)^4 + (q-k)^4 - 2(q^2 - k^2)^2 \cos 4qa}{16q^2 k^2}$

Or  $(q+k)^4 + (q-k)^4 = 2[(q^2 - k^2)^2 + 8k^2 q^2]$

Il vient alors :  $\frac{1}{T} = \frac{2(q^2 - k^2)(1 - \cos 4qa) + 16k^2 q^2}{16k^2 q^2}$

ou encore

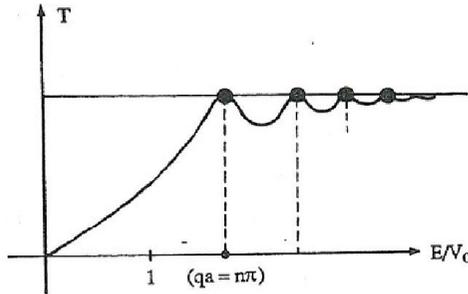
$$\boxed{\frac{1}{T} = \frac{1 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2 2qa}{4k^2 q^2}}$$

◆ Le coefficient de réflexion :  $R = \frac{j_r}{j_i} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$

Compte tenu de (9) et (10), nous avons :  $R = \frac{|B_1|^2}{|\gamma|^2} T = \frac{1}{4} \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 2qa}{k^2 q^2} T$

Remarque : i) On vérifie aisément que  $R + T = 1$  : donc la particule est soit réfléchiée, soit transmise. Contrairement à la mécanique classique où les prévisions donnent une probabilité nulle à la particule de revenir en arrière (c'est-à-dire d'être réfléchiée). Nous savons qu'en mécanique quantique, les calculs montrent que la particule incidente a une probabilité non nulle d'être réfléchiée.

ii) Pour  $E > 0$ , les résultats peuvent se présenter graphiquement. Si  $E \approx V_0$ , le coefficient de transmission  $T < 1$ , c'est-à-dire, il y a une réflexion partielle. On obtient  $T = 1$  que pour certaines valeurs de  $E/V_0$  qui correspondent à  $R = 0$ . Les calculs montrent que  $R = 0$  pour  $qa = n\pi$ : Ce phénomène est ondulatoire et le système similaire est l'interféro-mètre Perot-Fabry.



**Complément :** Etudier le cas où  $-V_0 < E < 0$  pour le cas du puits étudié dans l'exercice précédent.

Il s'agit maintenant des états liés. Le raisonnement est analogue et la solution des équations de Schrödinger nous imposent :

$$x \leq -a : \quad \psi_1(x) = A e^{\rho(x+a)} + B e^{-\rho(x+a)} \quad \text{avec } \rho^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$-a \leq x \leq +a : \quad \psi_2(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx} \quad \text{avec } q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$$

$$x \geq a : \quad \psi_3(x) = E e^{\rho(x-a)} + F e^{-\rho(x-a)}$$

Comme  $\psi(x)$  doit être bornée dans les régions I et III, il faut donc imposer :  $B = 0$  et  $E = 0$

Les conditions de raccordement en  $x = -a$  et  $x = +a$  donnent :

$$x = -a \begin{cases} A = C e^{-iqa} + D e^{iqa} \\ \rho A = iq(C e^{-iqa} - D e^{iqa}) \end{cases} \quad x = a \begin{cases} C e^{iqa} + D e^{-iqa} = F \\ iq(C e^{iqa} - D e^{-iqa}) = -\rho F \end{cases}$$

Soit alors :

$$C = e^{iqa} \frac{q - i\rho}{2q} A ; \quad D = e^{-iqa} \frac{q + i\rho}{q} A \quad (11)$$

$$F = 2C e^{iqa} \frac{iq}{iq - \rho} = 2e^{2iqa} \frac{iq + \rho}{iq - \rho} A \quad (12)$$

et

$$F = 2D e^{-iqa} \frac{iq}{iq + \rho} = 2e^{-2iqa} \frac{iq - \rho}{iq + \rho} A \quad (13)$$

L'égalité (12) et (13) nous exige :

$$e^{4iqa} = \left( \frac{iq - \rho}{iq + \rho} \right)^2 \quad (14)$$

Comme  $\rho$  et  $q$  dépendent de  $E$ , l'équation (14) ne peut être satisfaite que pour certaines valeurs de  $E$  : c'est la quantification de l'énergie. Deux cas sont possibles :

a) si

$$\frac{\rho - iq}{\rho + iq} = -e^{2iqa} \quad (15)$$

Soit :

$$\rho(1 + e^{2iqa}) = -iq(e^{2iqa} - 1)$$

$$\frac{\rho}{q} = -i \frac{e^{iqa} - e^{-iqa}}{e^{iqa} + e^{-iqa}} = -i \frac{2i \sin qa}{2 \cos qa}$$

Soit :

$$\boxed{\frac{\rho}{q} = \operatorname{tg}(qa)}$$

Posons :  $q_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\rho^2 + q^2}$

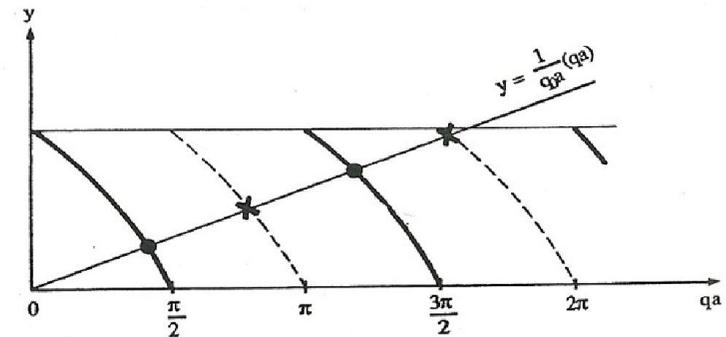
On obtient alors :

$$\frac{1}{\cos^2 qa} = 1 + \operatorname{tg}^2 qa = 1 + \frac{\rho^2}{q^2} = \left( \frac{q_0}{q} \right)^2$$

L'équation (15) est donc équivalente au système :

$$\begin{cases} |\cos qa| = \frac{q}{q_0} \\ \operatorname{tg}(qa) > 0 \end{cases}$$

Le résolution graphique de ce système nous donne les énergies quantifiées des états liés. Ces niveaux d'énergie sont déterminés dans le plan  $(y, qa)$  par l'intersection d'une droite  $(y = \frac{1}{q_0 a}(qa))$  de pente  $1/q_0 a$  avec des arcs d'une fonction sinusoïdale (en traits gras) :  $|\cos qa|$  avec la condition  $\operatorname{tg}(qa) > 0$ .



Nous obtenons donc un certain nombre de niveaux d'énergie dont les fonctions d'onde sont paires : Il est facile de vérifier que  $\psi(-x) = \psi(x)$  (en reportant (15) dans (11) et (12), on obtient  $F = A$  et  $C = D$ )

b) Si

$$\frac{\rho - iq}{\rho + iq} = e^{2iqa}$$

Un raisonnement analogue nous conduit à :

$$\begin{cases} |\sin(qa)| = \frac{q}{q_0} \\ \operatorname{tg}(qa) < 0 \end{cases}$$

Les niveaux d'énergie sont obtenus par l'intersection de la même droite et des arcs (en pointillés). Les fonctions d'onde sont dans ce cas impaires.

### 10 - Puits infini (centré en $x = 0$ ).

On considère le potentiel  $V(x)$  défini par la fonction :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour} \quad |x| \leq \frac{L}{2}$$

$$V(x) = +\infty \quad \text{pour} \quad |x| > \frac{L}{2}$$

1° Représentez la courbe  $V(x)$ .

2° a) Ecrire l'énergie totale  $E$  de la particule.

b) En appliquant le principe de correspondance, donner l'hamiltonien (indépendant du temps) de la particule. Ecrire l'équation de Schrödinger.

3° Déterminez la forme générale (exprimée par des exponentielles) des fonctions d'onde  $\psi(x)$  solutions de l'équation aux valeurs propres. On

posera :  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

4° a) Ecrire les conditions aux limites (que l'on justifiera rapidement).

b) En déduire une condition sur  $k$ .

c) Déterminer l'énergie totale de la particule, montrer qu'elle est quantifiée.

5° Déterminer les fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  :

a) Sous forme d'exponentielles, puis sous forme trigonométrique. Montrer alors que ces fonctions  $\psi_n(x)$  sont de parité (ou symétrique) bien définie. [ne pas confondre parité de  $n$  et parité de  $\psi_n(x)$ ].

b) Normer ces fonctions et montrer (en le justifiant) qu'on peut les prendre réelles.

c) Reproduire et compléter le tableau suivant. (on précisera dans la 4<sup>ème</sup> colonne si  $\varphi_n(x)$  est symétrique : S, ou anti-symétrique : A.S)

$n$	$E_n$	$\psi_n(x)$	symétrique
1			
2			
3			
4			

d) Représenter les courbes  $\psi_n(x)$  puis  $|\psi_n(x)|^2$  pour  $n = 1, 2, 3, 4$ . Que représente  $|\psi_n(x)|^2$  ?

e) Donner, en le justifiant, le degré de dégénérescence de  $E_n$

f) Avec :  $\langle x | \psi_n \rangle = \psi_n(x)$

Vérifier que :  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$   $i, j = 1, 2, 3, 4$ .

[Il est utile de considérer l'intervalle d'intégration et la parité des fonctions à intégrer pour limiter la longueur des calculs].

6° L'état décrivant la particule à l'instant  $t = 0$  est :

$$|\phi(0)\rangle = C_1 |\psi_1\rangle + C_2 |\psi_2\rangle + C_3 |\psi_3\rangle + C_4 |\psi_4\rangle$$

a) Quelle est la probabilité, lorsqu'on mesure l'énergie de la particule de trouver une valeur inférieure à  $\frac{3\pi^2\hbar^2}{mL^2}$  ?

b) Application numérique :  $C_1 = C_2 = \frac{C_3}{2} = \frac{C_4}{2} = \frac{1}{\sqrt{10}}$

7° On montre que la probabilité pour un système quantique, d'effectuer une transition entre 2 états décrits par les fonctions d'onde  $\psi_1$  et  $\psi_2$ , sous l'action d'un rayonnement électromagnétique (polarisé suivant  $x'$ ) est proportionnelle au carré du moment de transition  $\mu_x$  soit :

$$P(\psi_1 \rightarrow \psi_2) \sim |\mu_{x_{1 \rightarrow 2}}|^2 \quad \text{avec} \quad \mu_{x_{1 \rightarrow 2}} = \langle \psi_1 | X | \psi_2 \rangle$$

a) Déterminer la matrice représentative de l'opérateur position  $x$  dans la base  $\{|\psi_i\rangle\}$   $i = 1, 2, 3, 4$ . [voir remarque § 7f)]

b) Montrer alors que de telles transitions entre  $|\psi_m\rangle$  et  $|\psi_n\rangle$  ne sont permises (possibles) que si les nombres  $m, n$  obéissent à une loi simple (règle de sélection) que l'on précisera. (Les autres transitions sont dites interdites).

8° Calculer dans l'état :  $|\psi_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ).

a)  $\langle X \rangle$  et  $\Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$

b)  $\langle P_x \rangle$  et  $\Delta P_x$

c)  $\Delta X \cdot \Delta P_x$  . Conclusion ?

9°) Peut-on mesurer simultanément la position et l'énergie ? (Justifiez votre réponse par un calcul).

10°) Peut-on mesurer simultanément  $P_x$  et  $E$  ?

Formulaire

$$\int_0^{L/2} \sin^2 n \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \int_0^{L/2} \cos^2 n \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{1}{4} L$$

$$\int_0^{L/2} \sin m \frac{\pi}{L} x \cdot \sin n \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{L}{2\pi} \left[ \frac{\sin(m-n) \frac{\pi}{2}}{m-n} - \frac{\sin(m+n) \frac{\pi}{2}}{m+n} \right]$$

$$\int_0^{L/2} \cos m \frac{\pi}{L} x \cdot \cos n \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{L}{2\pi} \left[ \frac{\sin(m+n) \frac{\pi}{2}}{m+n} - \frac{\sin(m-n) \frac{\pi}{2}}{m-n} \right]$$

$$\int_0^{L/2} x \sin p \frac{\pi}{L} x \cdot \cos q \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{L^2}{2\pi^2} \left[ \frac{\sin(p+q) \frac{\pi}{2}}{(p+q)^2} + \frac{\sin(p-q) \frac{\pi}{2}}{(p-q)^2} \right]$$

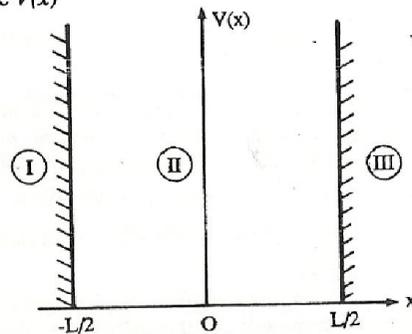
$$- \frac{L^2}{4\pi} \cdot \left[ \frac{\cos(p+q) \frac{\pi}{2}}{p+q} + \frac{\cos(p-q) \frac{\pi}{2}}{p-q} \right]$$

$$\int_0^{L/2} x^2 \sin^2 n \frac{\pi}{L} x \cdot \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{L^3}{8} \cdot \left( \frac{1}{6} - \frac{\cos n\pi}{n^2 \pi^2} \right)$$

$$\int_0^{L/2} x^2 \cos^2 n \frac{\pi}{L} x \cdot dx = \frac{L^3}{8} \cdot \left( \frac{1}{6} + \frac{\cos n\pi}{n^2 \pi^2} \right)$$

Extrait, Marrakech, MP2 - PC2, 1984.

1°) Représentation de  $V(x)$



2°) a) L'énergie totale de la particule est donnée par :  $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

b) A l'impulsion  $P$  est associé l'opérateur  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ , donc à  $P^2$  est associé l'opérateur  $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ . Au potentiel  $V(x)$  est associé  $V(X)$ . Il vient alors, l'hamiltonien du système indépendant du

temps :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(X).$$

L'équation de Schrödinger s'écrit donc :  $\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(X) \right] \psi = E\psi$

ou encore :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(X)) \psi = 0. \quad (1)$$

3°) Cette équation a des solutions quel que soit  $E > 0$ . La particule est confinée dans la région II. Le potentiel est nul dans cette région et égale à  $+\infty$  dans les régions I et III : C'est une barrière impénétrable. Nous avons donc  $\psi = 0$  dans les régions I et III.

Dans la région II, le potentiel est nul et l'équation (1) devient :  $\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$

la solution d'une telle équation :  $\psi_{II} = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$  avec  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

4°) a) La continuité de la fonction d'onde en  $x = -L/2$  et  $x = L/2$  exige que l'on ait :

$$A e^{-ikL/2} + B e^{ikL/2} = 0 ; \quad A e^{ikL/2} + B e^{-ikL/2} = 0$$

b) De ces deux relations on tire :

$$A = -B \quad (2) \quad \text{soit} \quad \sin \frac{kL}{2} = 0 \quad \longrightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n \text{ pair} > 0$$

$$\text{ou} \quad A = B \quad (3) \quad \text{soit} \quad \cos \frac{kL}{2} = 0 \quad \longrightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n \text{ impair} > 0$$

c) En définitive, (2) et (3) exigent :  $k_n^2 = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} = \frac{2m E_n}{\hbar^2}$

Soit

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2 \quad n \text{ entier} > 0$$

5°) a) ♦ Cas où  $A = -B$  (2) on a :  $\psi_n(x) = A(e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}) = 2iA \sin k_n x$

Soit

$$\psi_n(x) = 2iA \sin \left( \frac{n\pi x}{L} \right) \quad \text{avec } n \text{ pair} > 0$$

On voit que cette fonction est **impaire** (antisymétrique).

♦ Cas où  $A = B$  (3)  $\psi_n(x) = A(e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) = 2A \cos k_n x$

Soit

$$\psi_n(x) = 2A \cos \frac{n\pi x}{L} \quad \text{avec } n \text{ impair} > 0$$

Cette fonction est **paire** (symétrique).

En résumé, nous avons :  $\psi = 0$  pour  $x \leq \frac{-L}{2}$  et  $x \geq \frac{L}{2}$

$$\psi_n = \begin{cases} \psi_n(x) = A' \sin \frac{n\pi x}{L} & n \text{ pair} > 0 \\ \psi_n(x) = A'' \cos \frac{n\pi x}{L} & n \text{ impair} > 0 \end{cases} \quad (4) \quad (5)$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad n \text{ entier} > 0$$

Remarque : i) Si nous effectuons une translation de l'origine des coordonnées :  $x = x' - \frac{L}{2}$  les deux formes de  $\psi_n(x)$  se ramènent à la forme unique :  $\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$  .  $n = 1, 2, \dots$

ii) On retrouve les niveaux d'énergie en écrivant que l'onde de De Broglie est stationnaire :

$$L = n \frac{\lambda}{2} = n \frac{h}{2mv}$$

$$L^2 = \frac{n^2 h^2}{4m^2 v^2} = \frac{n^2 h^2}{8mE} \quad (E = \frac{1}{2} mv^2)$$

$$\text{d'où} \quad E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

b) La condition de normalisation, soit ici  $\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ , donne immédiatement :

$$|A'|^2 \int_{-L/2}^{L/2} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 2|A'|^2 \int_0^{L/2} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 2|A'|^2 \frac{L}{4} = 1$$

On a donc :

$$|A'|^2 = \frac{2}{L}$$

En choisissant  $A'$  réel et positif (si  $A' \in \mathbb{C}$ ), la fonction ne va différer que d'un facteur de phase près, d'où :

$$A' = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Par un raisonnement analogue, la condition de normalisation appliquée à l'égalité (5) nous exige :

$$A'' = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Il vient alors :

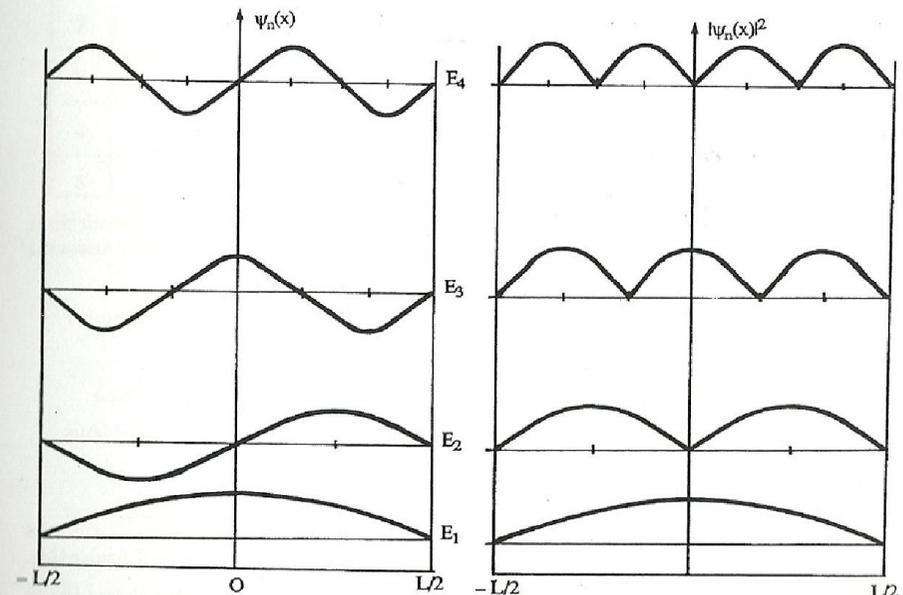
$$\boxed{\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} & n \text{ pair} > 0 \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{L} & n \text{ impair} > 0 \end{aligned}}$$

c) A partir des résultats précédents, nous pouvons compléter le tableau ci dessous. On pose

à cet effet :  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

$n$	$E_n$	$\psi_n(x)$	symétrie
1	$E_1$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{\pi x}{L}$	S
2	$4E_1$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L}$	A.S
3	$9E_1$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{3\pi x}{L}$	S
4	$16E_1$	$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{4\pi x}{L}$	A.S

d) Représentent graphiquement les fonctions d'onde  $\psi_n(x)$  et  $|\psi_n(x)|^2$  qui représentent la densité de probabilité des quatre premiers états.



e) A chaque valeur propre  $E_n$  correspond une seule fonction d'onde : On dit que les valeurs  $E_n$  sont des valeurs propres simples, leur degré de dégénérescence est égale à un.

f) Vérifions que  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$   $i, j = 1, 2, 3, 4$

nous avons montré que  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 1$  (condition de normalisation).

◆  $i, j$  sont paires :

$$\begin{aligned} \langle \psi_i | \psi_j \rangle &= \int_{-L/2}^{L/2} \psi_i^* \psi_j dx = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sin \frac{i\pi x}{L} \sin j \frac{\pi x}{L} dx \\ &= \frac{4}{L} \int_0^{L/2} \sin \frac{i\pi x}{L} \sin j \frac{\pi x}{L} dx \quad (\text{La fonction à intégrer étant paire}) \end{aligned}$$

En utilisant le formulaire joint, on obtient :

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \frac{\sin(i-j)\pi/2}{(i-j)\pi/2} - \frac{\sin(i+j)\pi/2}{(i+j)\pi/2}$$

$i \neq j$  et  $i-j = 2n$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) ; les deux termes sont nuls et par suite :  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0$

◆  $i, j$  sont impaires :

$$\begin{aligned} \langle \psi_i | \psi_j \rangle &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos \frac{i\pi x}{L} \cos \frac{j\pi x}{L} dx \\ &= \frac{4}{L} \int_0^{L/2} \cos \frac{i\pi x}{L} \cos \frac{j\pi x}{L} dx \quad (\text{la fonction à intégrer étant paire}) \\ &= \frac{\sin(i+j)\pi/2}{(i+j)\pi/2} + \frac{\sin(i-j)\pi/2}{(i-j)\pi/2} \end{aligned}$$

$i$  étant différent de  $j$  tel que :  $i-j$  et  $i+j$  sont toujours paires, d'où :  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0$

◆ Si  $i$  est paire,  $j$  est impaire :

$$\begin{aligned} \langle \psi_i | \psi_j \rangle &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sin \frac{i\pi x}{L} \cos \frac{j\pi x}{L} dx \\ &= 0 \quad (\text{car la fonction à intégrer est une fonction impaire}) \end{aligned}$$

6°) L'état décrivant la particule à l'instant  $t = 0$  est :

$$|\phi(0)\rangle = C_1 |\psi_1\rangle + C_2 |\psi_2\rangle + C_3 |\psi_3\rangle + C_4 |\psi_4\rangle$$

a) Lorsqu'on mesure l'énergie de la particule à  $t = 0$ , les résultats de mesure sont les valeurs propres  $E_n$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ).

L'énergie  $E = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$  correspond à  $E_2 < E < E_3$ . Donc la probabilité de trouver une valeur

inférieure à  $\frac{3\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$  est :

$$\mathcal{P} = |\langle \psi_1 | \phi(0) \rangle|^2 + |\langle \psi_2 | \phi(0) \rangle|^2$$

$$\mathcal{P} = |C_1|^2 + |C_2|^2$$

b) A. N :

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{10}}$$

$$\text{soit } \mathcal{P} = \frac{1}{5}$$

7°) La matrice représentative de l'opérateur position  $X$  dans la base  $\{|\psi_i\rangle\}$   $i = 1, 2, 3, 4$  est donnée par ses éléments de matrices :  $X_{ij} = \langle \psi_i | X | \psi_j \rangle$

Si  $i = j$ ,  $X_{ij}$  sont nuls car la fonction à intégrer est impaire.

Si  $i \neq j$  avec  $(i, j)$  soient toutes les deux paires, soient toutes les deux impaires : dans ce cas la fonction à intégrer est  $x \sin px \sin qx$  ou  $x \cos px \cos qx$ . Ces fonctions sont impaires et donc les  $X_{ij}$  sont nuls.

Si  $i \neq j$  (l'un est paire et l'autre impaire, la matrice est symétrique) :

$$\begin{aligned} X_{ij} &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x \sin i \frac{\pi x}{L} \cos j \frac{\pi x}{L} dx = \frac{4}{L} \int_0^{L/2} x \sin i \frac{\pi x}{L} \cos j \frac{\pi x}{L} dx \\ &= \frac{4}{L} \left\{ \frac{L^2}{2\pi^2} \left[ \frac{\sin(i+j)\pi/2}{(i+j)^2} + \frac{\sin(i-j)\pi/2}{(i-j)^2} \right] - \frac{L^2}{4\pi} \left[ \frac{\cos(i+j)\pi/2}{(i+j)^2} + \frac{\cos(i-j)\pi/2}{(i-j)^2} \right] \right\} \end{aligned}$$

Nous obtenons donc :

$i$	$j$	$(i+j)\pi/2$	$(i-j)\pi/2$	$\sin(i+j)\pi/2$	$\sin(i-j)\pi/2$	$X_{ij}$
2	1	$3\pi/2$	$\pi/2$	-1	1	$16L/9\pi^2$
2	3	$5\pi/2$	$-\pi/2$	1	-1	$-48L/25\pi^2$
4	1	$5\pi/2$	$3\pi/2$	1	-1	$-32L/225\pi^2$
4	3	$7\pi/2$	$\pi/2$	1	1	$96L/49\pi^2$

Il est facile de remarquer que cette matrice est symétrique : ( $X_{ij} = X_{ji}$ ).  
La matrice représentative de  $X$  s'écrit donc :

$$X = \frac{L}{\pi^2} \begin{pmatrix} 0 & \frac{16}{9} & 0 & \frac{-32}{225} \\ \frac{16}{9} & 0 & \frac{-48}{25} & 0 \\ 0 & \frac{-48}{25} & 0 & \frac{96}{49} \\ \frac{-32}{225} & 0 & \frac{96}{49} & 0 \end{pmatrix}$$

b) De telles transitions entre  $|\psi_m\rangle$  et  $|\psi_n\rangle$  ne sont permises que si les nombres  $m$  et  $n$  obéissent à la règle de sélection :  $m = n \pm 1$ .

8°) a) Les éléments diagonaux de  $X$  sont tous nuls, donc la valeur moyenne de  $X$ , quel que soit l'état  $\psi_i$ , est nulle :  $\langle X \rangle_i = \langle \psi_i | X | \psi_i \rangle = 0$

b) Calculons la valeur moyenne de  $X^2$  dans l'état  $\psi_i$ . Pour cela on a besoin seulement des éléments diagonaux de la matrice représentative de  $X^2$ .

La matrice  $X$  est de la forme : 
$$X = \frac{L}{\pi^2} \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & b \\ a & 0 & c & 0 \\ 0 & c & 0 & d \\ b & 0 & d & 0 \end{pmatrix}$$

et par suite : 
$$X^2 = \frac{L^2}{\pi^4} \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & & & \\ & a^2 + b^2 & & \\ & & c^2 + d^2 & \\ & & & b^2 + d^2 \end{pmatrix}$$

Il vient alors : 
$$\langle X^2 \rangle_1 = \frac{L^2}{\pi^4} (a^2 + b^2) = \frac{L^2}{\pi^4} \left[ \left(\frac{16}{9}\right)^2 + \left(\frac{32}{225}\right)^2 \right] = 3,2 L^2 / \pi^4$$

$$\langle X^2 \rangle_2 = \frac{L^2}{\pi^4} (a^2 + c^2) = \frac{L^2}{\pi^4} \left[ \left(\frac{16}{9}\right)^2 + \left(\frac{48}{25}\right)^2 \right] = 6,8 L^2 / \pi^4$$

$$\langle X^2 \rangle_3 = \frac{L^2}{\pi^4} (c^2 + d^2) = \frac{L^2}{\pi^4} \left[ \left(\frac{48}{25}\right)^2 + \left(\frac{96}{49}\right)^2 \right] = 7,5 L^2 / \pi^4$$

$$\langle X^2 \rangle_4 = \frac{L^2}{\pi^4} (d^2 + b^2) = \frac{L^2}{\pi^4} \left[ \left(\frac{96}{49}\right)^2 + \left(\frac{32}{225}\right)^2 \right] = 3,9 L^2 / \pi^4$$

On en déduit :

soit :

$$\begin{aligned} \Delta X &= \sqrt{\langle X^2 \rangle} \\ \Delta X_1 &\approx 1,8 L / \pi^2 ; \quad \Delta X_2 \approx 2,6 L / \pi^2 \\ \Delta X_3 &\approx 2,7 L / \pi^2 ; \quad \Delta X_4 \approx 2 L / \pi^2 \end{aligned}$$

b) ♦ A l'impulsion  $P_x$  est associé l'opérateur  $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ , il vient donc :

$$\langle P_x \rangle_n = \int \psi_n^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (\psi_n) dx$$

Les fonctions à intégrer sont de type  $\sin x \cos x$  (fonction impaire), donc les intégrales sont nulles. Soit :

$$\langle P_x \rangle_n = 0$$

$$\diamond \langle P_x^2 \rangle_n = 2m \langle \frac{P_x^2}{2m} \rangle_n = 2m E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} n^2$$

On en déduit :

$$\Delta P_x = \sqrt{\langle P_x^2 \rangle}$$

$$\Delta P_x = \frac{\hbar \pi n}{L}$$

c) Compte tenu des résultats obtenus de  $\Delta X$  et  $\Delta P_x$ , on obtient :

$$(\Delta X \cdot \Delta P_x)_1 = 1,8 \frac{\hbar}{\pi} \approx 0,57 \hbar$$

$$(\Delta X \cdot \Delta P_x)_2 = 5,2 \frac{\hbar}{\pi} \approx 1,66 \hbar$$

$$(\Delta X \cdot \Delta P_x)_3 = 8,1 \frac{\hbar}{\pi} \approx 2,58 \hbar$$

$$(\Delta X \cdot \Delta P_x)_4 = 7,84 \frac{\hbar}{\pi} \approx 2,5 \hbar$$

9°) L'énergie de la particule étant  $E_n = \frac{P_x^2}{2m}$  et sa position est  $X$ .

Le commutateur  $\left[ X, \frac{P_x^2}{2m} \right] \neq 0$  : il n'est donc pas possible de mesurer l'énergie et la position de la particule simultanément.

10°) Par contre le commutateur  $\left[ P_x, \frac{P_x^2}{2m} \right] = 0$ , il est alors possible de mesurer l'impulsion et l'énergie de la particule simultanément.

## 11 - Marches de potentiel - Coefficients de réflexion.

Dans un problème à une dimension, on considère une particule de masse  $m$  soumise à la marche de potentiel : 
$$V(x) = \begin{cases} -V_1, & x < x_0 \\ +V_2, & x > x_0 \end{cases}$$

où  $V_1$  et  $V_2$  sont des énergies potentielles constantes positives,  $x_0$  étant une valeur positive de la position de cette particule.

A / On se donne un état stationnaire de cette particule d'énergie propre  $E > V_2$  décrit par la fonction d'onde  $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$ .

1°)  $x$  et  $P$  étant les observables respectivement associées à la position et à l'impulsion d'une telle particule.

a) Ecrire son Hamiltonien  $H$ .

b) Cette particule est-elle conservative ? Pourquoi ?

c) Déduire de l'équation aux valeurs propres de l'observable  $H$  l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

2°) La particule se déplaçant dans le sens de croissance de  $x$ , écrire et résoudre cette équation dans chacune des régions de l'espace I et II respectivement définies par  $x < x_0$  et  $x > x_0$ .

3°) En identifiant chacun des termes de la solution et en écrivant les conditions de raccordement au point de discontinuité du potentiel, évaluer les amplitudes des différentes ondes planes monochromatiques associées à cette particule en fonction de l'amplitude de l'onde incidente. Présenter le

résultat sous la forme : 
$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_I(x), & x < x_0 \\ \varphi_{II}(x), & x > x_0 \end{cases}$$

4°) Calculer les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  ainsi que leur somme. Conclure.

B / On s'intéresse maintenant à un état stationnaire de cette particule d'énergie propre positive  $E < V_2$  décrit la fonction d'onde  $\phi(x) = \langle x | \phi \rangle$

1°) Ecrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les deux régions de l'espace I et II.

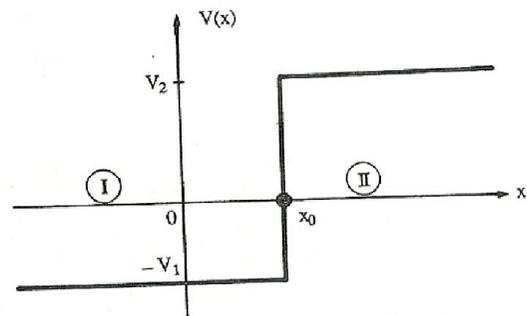
2°) Calculer les différentes constantes d'intégration en fonction de l'amplitude de l'onde incidente, la particule se déplaçant toujours dans le sens positif. Présenter la solution sous la forme :

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I(x) & , \quad x < x_0 \\ \phi_{II}(x) & , \quad x > x_0 \end{cases}$$

3°) Calculer le coefficient de réflexion  $R$  et en déduire celui de transmission  $T$ . Conclure.

Extrait, Fès, MP2 - PC2, Janvier 1988.

### I / Marches de potentiel



A / Cas où  $\varepsilon > V_2$  ; réflexion partielle.

1°) a) La particule  $m$  est placée dans un potentiel  $V(x)$  constant dans certaines régions l'hamiltonien du système est :  $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$

b) Les observables  $X$  et  $P$  sont des constantes du mouvements (indépendantes du temps). Ainsi  $H$  est indépendant du temps : propriétés générales des systèmes conservatifs.

c) En représentation  $\{|x\rangle$ , l'équation aux valeurs propres de  $H$  :  $H\phi = E\phi$  s'écrit :

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

ou encore

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \phi(x) = 0 \quad (1)$$

équation aux états stationnaires d'énergie

2°) Ecrivons l'équation aux états stationnaires d'énergie dans chacune des régions I et II :

$$\diamond \text{ Pour } x < x_0, \text{ l'équation (1) devient : } \frac{d^2 \phi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon + V_I) \phi_I(x) = 0 \quad (2)$$

Comme  $\varepsilon > V_2 > 0$ , il s'ensuit que  $\varepsilon + V_I > 0$

$$\text{Posons alors : } \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon + V_I)}$$

$$\text{L'équation (2) admet des solutions de types : } \phi_I(x) = A e^{i\alpha(x-x_0)} + B e^{-i\alpha(x-x_0)} \quad (3)$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes complexes.

$$\diamond \text{ Pour } x > x_0; \text{ l'équation (1) s'écrit : } \frac{d^2 \phi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - V_2) \phi_2(x) = 0 \quad (4)$$

Comme  $\varepsilon > V_2$  alors  $\varepsilon - V_2 > 0$

L'équation (4) admet des solutions auxquelles nous donnerons les formes suivantes, pour alléger les écritures (surtout, lors des conditions de raccordement) :

$$\phi_2(x) = C e^{i\beta(x-x_0)} + D e^{-i\beta(x-x_0)} \quad (5)$$

$$\text{avec } \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - V_2)}$$

3°)  $\diamond D e^{-i\beta(x-x_0)}$  est l'onde de retour de l'infini. Ainsi on a  $D = 0$  et il y a donc deux inconnues  $B$  et  $C$  ( $A$  étant l'amplitude de l'onde incidente).

$\diamond$  Ecrivons les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = x_0$  ; ce qui nous fournit du fait des expressions (3) et (5) ( $D = 0$ ) les deux relations :

$$\begin{cases} A + B = C \\ i\alpha(A - B) = i\beta C \end{cases} \quad (6)$$

$$\quad \quad \quad (7)$$

$$\text{De (6) et (7), on tire : } \quad 2A = C \left( 1 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \quad \quad 2B = C \left( 1 - \frac{\beta}{\alpha} \right)$$

$$\text{Soit } \quad C = \frac{2A}{1 + \beta/\alpha} \quad (8) \quad \text{et } \quad B = A \frac{1 - \beta/\alpha}{1 + \beta/\alpha} \quad (9)$$

Les expressions de  $\phi(x)$  sont alors :

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I(x) = A \left[ e^{i\alpha(x-x_0)} + \frac{1 - \beta/\alpha}{1 + \beta/\alpha} e^{-i\alpha(x-x_0)} \right] & x < x_0 \\ \phi_2(x) = \frac{2A}{1 + \beta/\alpha} e^{i\beta(x-x_0)} & x > x_0 \end{cases}$$

4°) Les coefficients de transmission  $T$  et de réflexion  $R$  sont définis grâce à la notion de courants de probabilité par :

$$T = \frac{\beta}{\alpha} \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad \text{et} \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Il vient alors :

$$T = \frac{\beta}{\alpha} \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{\beta}{\alpha} \frac{4}{(1+\beta/\alpha)^2}$$

soit

$$T = \frac{4\beta\alpha}{(\alpha + \beta)^2}$$

Compte tenu de (9), on a :

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(1 - \beta/\alpha)^2}{(1 + \beta/\alpha)^2}$$

soit alors

$$R = \frac{(\alpha - \beta)^2}{(\alpha + \beta)^2}$$

On vérifie aisément que  $R + T = 1$  :

$$R + T = \frac{4\beta\alpha + (\alpha - \beta)^2}{(\alpha + \beta)^2} = 1$$

**Conclusion :** Comme  $R$  et  $T$  sont supérieures à zéro ; la particule est donc soit transmise, soit réfléchi contrairement à la mécanique classique où la particule incidente a une probabilité nulle de revenir en arrière.

**B / Cas où  $\varepsilon < V_2$  ; réflexion totale.**

1°) Dans la région (I), on a comme en § A :

$$\phi_1(x) = A e^{i\alpha(x-x_0)} + B e^{-i\alpha(x-x_0)} \quad \text{avec} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon + V_1)$$

région II :

$$\frac{d^2\phi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_2 - \varepsilon) \phi_2(x) = 0$$

La solution est :

$$\phi_2(x) = C e^{-q(x-x_0)} + D e^{q(x-x_0)} \quad \text{avec} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_2 - \varepsilon)$$

2°) Une fonction d'onde doit être de carré sommable, il faut donc choisir  $D = 0$  sinon,  $\phi_2$  ne pourrait pas représenter un état physique. Ainsi :

$$\phi_2(x) = C e^{-q(x-x_0)}$$

Les conditions de raccordement en  $x = x_0$  donnent :  $A + B = C$  et  $i\alpha(A - B) = -qC$

On tire :

$$C = \frac{2A}{1 + iq/\alpha} \quad \text{et} \quad B = A \frac{1 - iq/\alpha}{1 + iq/\alpha}$$

La solution se présente donc sous la forme :

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_1(x) = A \left[ e^{i\alpha(x-x_0)} + \frac{\alpha - iq}{\alpha + iq} e^{-i\alpha(x-x_0)} \right] & x < x_0 \\ \phi_2(x) = \frac{2A\alpha}{\alpha + iq} e^{-q(x-x_0)} & x > x_0 \end{cases}$$

3°) Le coefficient de réflexion  $R$  vaut alors :

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{\alpha - iq}{\alpha + iq} \right|^2 = 1$$

**Conclusion :** On voit que  $R = 1$  (réflexion totale), comme en mécanique classique où la particule est toujours réfléchi. Cependant dans la région II la fonction d'onde n'est pas nulle (onde évanescente  $e^{-q(x-x_0)}$ ). Ainsi la probabilité de présence de la particule pour  $x > x_0$  n'est pas nulle qui, classiquement, lui serait interdite ; mais le courant associé par contre est nul. Ce fait ne se rencontre pas en mécanique classique, c'est un fait purement quantique : ce phénomène a donné naissance à l'effet Tunnel.

## 12 - Potentiel en escalier : Etats liés.

Considérons une particule de masse  $m$  se déplaçant dans le potentiel définie par :

$$\begin{aligned} V(x) &= +\infty & x < 0 \\ V(x) &= -4V_0 & 0 < x < a \\ V(x) &= -V_0 & a < x < 3a \\ V(x) &= 0 & x > 3a \end{aligned}$$

où  $a$  et  $V_0$  sont des réels positifs.

- Donner l'allure du puits de potentiel.

- A quelle condition existe-t-il un niveau d'énergie  $\varepsilon = -V_0$ . Illustrer votre réponse par une résolution graphique.

Extrait, Casablanca I, PC2, Mai 1985.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\text{s'écrit : } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi(x) = 0$$

On cherche à trouver une condition pour que  $E$  soit égale à  $-V_0$ . L'équation (1) devient :

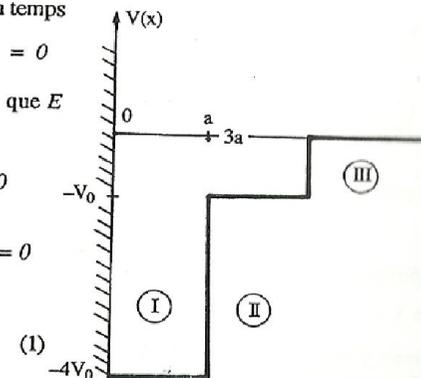
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_0 - V(x))\psi(x) = 0$$

$$\text{Région I : } \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (3V_0)\psi(x) = 0$$

Cette équation admet comme solution :

$$\psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{avec } k^2 = \frac{6mV_0}{\hbar^2}$$



Région II :  $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = 0$

Solution :  $\psi_2(x) = Cx + D$  qu'on peut écrire par commodité du calcul :

$$\psi_2(x) = C'(x - a) + D \quad (2)$$

région III :  $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(x) = 0$

solution :  $\psi_3(x) = E e^{-\alpha x} + F e^{+\alpha x}$  avec  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$

La fonction doit être bornée (de carré sommable), on choisit alors  $F = 0$ .

Soit :  $\psi_3(x) = E e^{-\alpha x}$

et par commodité de calcul :  $\psi_3(x) = E' e^{-\alpha(x-3a)}$  (3)

Pour  $x < 0$ ,  $V(x) = +\infty$  donc  $\psi(x)$  dans cette région est nulle. Les conditions de raccordement en  $x = 0$  nous impliquent :  $0 = A + B \Rightarrow A = -B$

soit  $\psi_1(x) = A' \sin kx$

En résumé et tenant compte de :  $k^2 = 3\alpha^2$

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A' \sin(\sqrt{3}\alpha x) & 0 < x < a \\ \psi_2(x) &= C'(x - a) + D & a < x < 3a \\ \psi_4(x) &= E' e^{-\alpha(x-3a)} & x > 3a \end{aligned} \quad (4)$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = a$  et  $x = 3a$  nous permet d'écrire :

$$x = a \begin{cases} A' \sin \sqrt{3} \alpha a = D & (5) \\ \sqrt{3} \alpha A' \cos \sqrt{3} \alpha a = C' & (6) \end{cases} \quad x = 3a \begin{cases} 2aC' + D = E' & (7) \\ C' = -\alpha E' & (8) \end{cases}$$

(5) et (7) nous donnent :  $\frac{1}{\sqrt{3}\alpha} \cdot \text{tg} \sqrt{3}\alpha a = \frac{D}{C'}$  (9)  $2a + \frac{D}{C'} = \frac{-1}{\alpha}$  (10)

remplaçons  $\frac{D}{C'}$  (9) par sa valeur dans (10) :  $2a + \frac{1}{\sqrt{3}\alpha} \text{tg} \sqrt{3}\alpha a = \frac{-1}{\alpha}$

soit  $\text{tg}(\sqrt{3}\alpha a) = -\sqrt{3} - 2(a\sqrt{3}\alpha)$

posons  $X = a\sqrt{3}\alpha$  :  $\text{tg} X = -2X - \sqrt{3}$  (11)

Le niveau d'énergie  $E = -V_0$  existe si l'équation (11) est vérifiée. Les solutions de cette équation sont les points d'intersection de la fonction  $\text{tg} X$  avec la droite d'équation,  $y = -2X - \sqrt{3}$ . (figure ci-après)

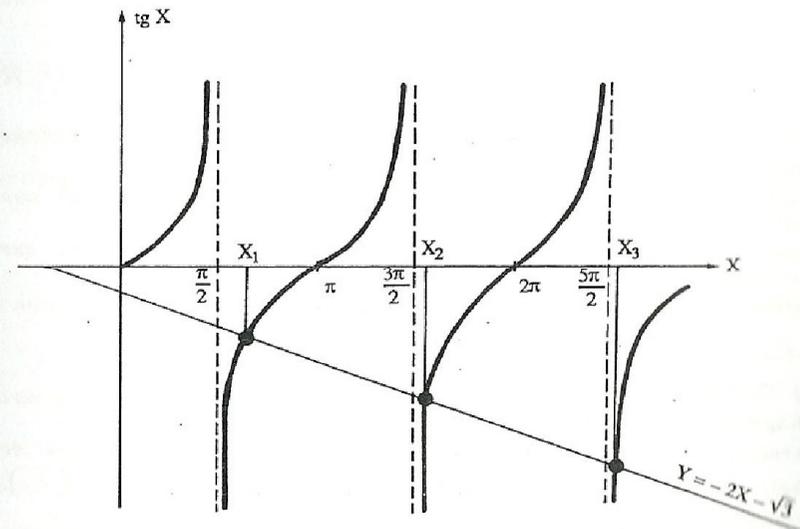


figure : Résolution graphique de l'équation (11), donnant les valeurs de  $(X = a\sqrt{3}\alpha)$ , pour lesquelles on obtient un état lié d'énergie  $E = -V_0$  dans un puits de potentiel en marche. Dans le cas présenté sur la figure, il existe 3 solutions ( $X_1, X_2$  ou  $X_3$ ).

### 13 - Etude très simplifiée du Deuteron : potentiel.

On considère le potentiel défini par la fonction  $V(x)$  :

$$\begin{aligned} V(x) &= +\infty & \text{pour } x < 0 \\ V(x) &= -V_0 < 0 & \text{pour } 0 < x < a \text{ (région I)} \\ V(x) &= 0 & \text{pour } a < x \text{ (région II)} \end{aligned}$$

1) Représenter la courbe  $V(x)$ .

On étudie seulement les états liés pour lesquels l'énergie totale  $E$  est telle que :  $-V_0 < E < 0$ .

2) a) Déterminer l'équation de Schrödinger du système.

b) Déterminer la forme générale de la fonction d'onde  $\psi(x)$ , définie par parties (régions I, II), sous forme d'exponentielles. On posera :

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

Garder tous les coefficients sans en donner l'interprétation.



d'autre part : 
$$\frac{1}{\sin^2 \rho a} = 1 + \cot^2 \rho a = 1 + \frac{k^2}{\rho^2} = \frac{\rho^2 + k^2}{\rho^2} = \frac{\rho_0^2}{\rho^2}$$

Soit

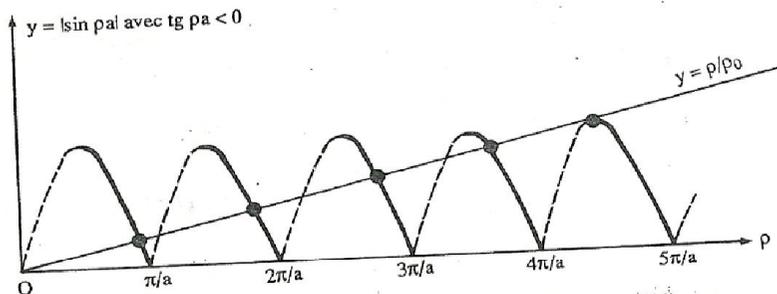
$$|\sin \rho a| = \frac{\rho}{\rho_0}$$

c) L'équation (11) permet d'écrire :  $\operatorname{tg} \rho a < 0$

L'équation (11) est donc équivalente au système :

$$\begin{cases} |\sin \rho a| = \frac{\rho}{\rho_0} \\ \operatorname{tg} \rho a < 0 \end{cases}$$

Les niveaux d'énergie sont alors déterminés par l'intersection d'une droite, de pente  $1/\rho_0$ , avec des arcs de sinusoides. Nous obtenons donc un certain nombre de niveaux d'énergie (figure ci-dessous)



Résolution graphique des solutions de l'équation (11), donnant les énergies des états liés. (en gras sont les arcs  $|\sin \rho a|$  répondant à la condition  $\operatorname{tg} \rho a < 0$ )

A partir de l'égalité  $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$ , on tire :

$$E_i = \frac{\hbar^2 \rho_i^2}{2m} - V_0$$

Remarque : Ce résultat peut être obtenu différemment à partir de l'équation (11). Soit :

$$\rho a \cotg \rho a = -ka \tag{12}$$

de plus

$$(\rho a)^2 + (ka)^2 = (\rho_0 a)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = \text{cte}$$

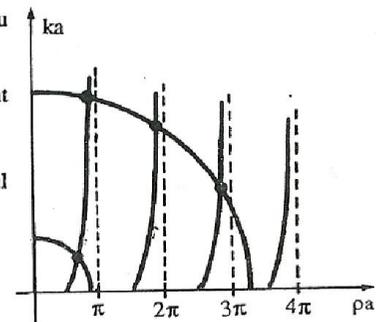
C'est l'équation d'un cercle de rayon :  $R = \rho_0 a = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a$

L'équation (12) exige qu'il y a des asymptotes pour  $\rho a = n\pi$  ( $n$  entier). Dans le plan repéré par des axes  $\rho a$  et  $ka$ , cette équation est celle d'un cercle. Nous étudions alors les intersections de ce cercle avec les courbes d'équations  $\rho a \cotg \rho a = -ka$  et ce dans le premier quadrant. Ces intersections sont en nombre fini.

Supposons  $a$  donné. Si  $V_0$  décroît, le rayon du cercle décroît et le nombre d'états liés décroît.

Si  $R = \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} < \frac{\pi}{2}$ , il n'y a aucun état lié.

Si  $\frac{\pi}{2} < R = \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} < \pi$ , il n'y a qu'un seul état lié.



### 14 - Etats liés d'une particule dans un puits en fonction delta.

On considère une particule dans un problème à une dimension dans un potentiel de la forme

$$V(x) = -\alpha \delta(x) \begin{cases} \alpha : \text{constante positive} \\ \delta(x) : \text{"Fonction" de Dirac} \end{cases}$$

On suppose que l'énergie  $E$  de la particule est négative (état lié), dans ce cas la fonction d'onde s'écrit :

$$\begin{aligned} x < 0 & \quad \psi(x) = A e^{qx} + B e^{-qx} \\ x > 0 & \quad \psi(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} \end{aligned}$$

où  $q$  est une constante qui dépend de  $E$  et  $m$ .

1°) La dérivée première ( $\psi'(x)$ ) de la fonction  $\psi(x)$  présente une discontinuité en  $x = 0$   $\Delta\psi'(0) \neq 0$ . On donne :

$$\Delta\psi'(0) = \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

En utilisant la continuité de  $\psi(x)$ . Donner la matrice  $M$  définie par :

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

2°) a) Sachant que  $\psi(x)$  représente un état physique, donner les expressions normalisées de  $\psi(x)$ . En déduire la valeur de l'énergie  $E$ .  
b) Représenter graphiquement ces fonctions en précisant leur portée  $l$  en fonction de  $q$ . En déduire leur largeur  $\Delta x$  ( $\Delta x$  : extension spatiale de  $\psi(x)$ ).

3°) a) Calculer la transformée de Fourier  $\phi(p)$  de la fonction  $\psi(x)$ .

b) Calculer  $|\phi(p)|^2$ , que représente ce terme ?

- c) Pour quelle valeur  $p_0$  de l'impulsion,  $|\varphi(p)|^2$  est maximale ?  
 d) On définit  $\Delta p$  (dispersion de l'impulsion de la particule dans son état lié) par  $\Delta p = p - p_0$  où  $p$  vérifie la relation  $|\varphi(p)|^2 = \frac{|\varphi(p_0)|^2}{2}$

Calculer  $\Delta p$ .

- e) Evaluer le produit  $\Delta x \cdot \Delta p$ . Conclure.

Extrait, Casablanca I, PC 2, Juin 1986

Considérons une particule dans un potentiel  $V(x) = -\alpha\delta(x)$

On s'intéresse au cas des états liés ( $E < 0$ ). Dans ce cas la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x) = A e^{qx} + B e^{-qx} \quad x < 0$$

$$\psi(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} \quad x > 0$$

où  $q$  est une constante :  $q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$  (à partir de l'équation de Schrödinger)

1°) Ecrivons les conditions de continuité de la fonction d'onde en  $x = 0$  :

$$A + B = C + D \quad (1)$$

La dérivée première de la fonction  $\psi(x)$  présente une discontinuité en  $x = 0$  :

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \quad (2)^*$$

or

$$\psi'(0^+) = [q(C e^{qx} - D e^{-qx})]_{x=0} = q(C - D)$$

$$\psi'(0^-) = [q(A e^{qx} - B e^{-qx})]_{x=0} = q(A - B)$$

L'équation (2) devient alors :  $q((C - D) - (A - B)) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} (A + B)$  (3)

On obtient alors un système : 
$$\begin{cases} C + D = A + B \\ C - D = -\frac{2m\alpha}{q\hbar^2} (A + B) + (A - B) \end{cases}$$

posons :  $k = \frac{-m\alpha}{q\hbar^2}$

Le système d'équations nous permet d'avoir : 
$$\begin{cases} C = A(1 + k) + kB \\ D = -kA + B(1 - k) \end{cases} \quad (4)$$

\* voir démonstration pb 15.

qu'on peut écrire sous forme matricielle : 
$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + k & k \\ -k & 1 - k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

2°) a)  $\psi(x)$  représente un état physique, donc elle doit être bornée, il faut alors choisir  $B = 0$  et  $C = 0$ .

Le système (4) devient : 
$$\begin{cases} 0 = A(1 + k) \\ D = -kA \end{cases} \quad (5)$$

$$(6)$$

L'équation (5) nous donne :  $k = -1$  soit  $\frac{m\alpha}{q\hbar^2} = 1$  et donc  $A = D$ .

Les fonctions d'onde correspondantes sont donc : 
$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{qx} & x < 0 & \quad (7-a) \\ \psi(x) &= A e^{-qx} & x > 0 & \quad (7-b) \end{aligned}$$

La condition de normalisation  $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$  nous exige :

$$|A|^2 \left[ \int_{-\infty}^0 e^{2qx} dx + \int_0^{\infty} e^{-2qx} dx \right] = 1$$

Soit  $A = \sqrt{q}$  (on choisit  $A$  réel  $> 0$ )

Les équations (7) deviennent : 
$$\psi(x) = q^{1/2} e^{-q|x|} \text{ pour tout } x$$

◆ Nous avons :  $k = -1$ , soit  $\frac{m\alpha}{q\hbar^2} = 1$

or  $q^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$

Il vient donc 
$$1 = \frac{m^2 \alpha^2}{q^2 \hbar^2} = -\frac{m^2 \alpha^2}{2mE \hbar^2} = \frac{-m\alpha^2}{2mE \hbar^2}$$

Soit

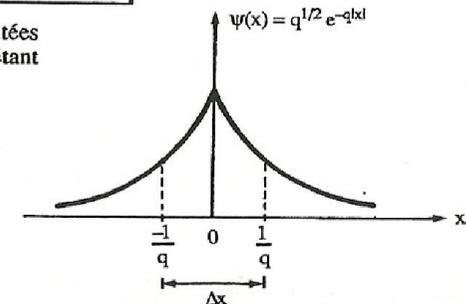
$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

b) Ces fonctions d'onde sont représentées sur la figure ci-contre (leur portée étant

$|l| = \frac{1}{q}$ ).

L'extension spatiale de  $\psi(x)$  est donc :

$$\Delta x = \frac{2}{q} = \frac{2\hbar}{\sqrt{-2mE}}$$



3°) a) La transformée de Fourier  $\varphi(p)$  de la fonction  $\psi(x)$  est donnée par :

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} q^{1/2} \left[ \int_{-\infty}^0 e^{x(q-ip/\hbar)} dx + \int_0^{\infty} e^{-x(q+ip/\hbar)} dx \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} q^{1/2} \left( \frac{1}{q-ip/\hbar} + \frac{1}{q+ip/\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} q^{1/2} \frac{2q}{q^2 + p^2/\hbar^2}\end{aligned}$$

Soit

$$\boxed{\varphi(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(\hbar q)^{3/2}}{\hbar^2 q^2 + p^2}}$$

b)  $|\varphi(p)|^2$  représente la probabilité de trouver la particule avec une impulsion  $p$  à l'instant

$$t = 0. \text{ Sa valeur est : } |\varphi(p)|^2 = \frac{2}{\pi} \frac{(\hbar q)^3}{(\hbar^2 q^2 + p^2)^2}$$

c) Elle présente un maximum pour  $p_0 = 0$ . En ce point, la valeur de  $|\varphi(p_0)|^2$  est égale à :

$$\frac{2}{\pi\hbar q} = \frac{2}{\pi\sqrt{-2mE}}$$

d) Nous cherchons à trouver pour quelle valeur de  $p$  on a :  $|\varphi(p)|^2 = \frac{|\varphi(p_0)|^2}{2}$

$$\text{Soit : } \frac{2}{\pi} \frac{(\hbar q)^3}{(\hbar^2 q^2 + p^2)^2} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\hbar q}$$

Il vient donc :  $2(\hbar q)^2 = p^2$  ou  $p^2 = 0$  (inacceptable physiquement)

$$\text{d'où } \boxed{p = 2\hbar q = 2\sqrt{-2mE}}$$

On définit  $\Delta p$  par :  $\Delta p = p - p_0 = 2\hbar q$

e) Le produit  $\Delta x \Delta p$  vaut donc :  $\Delta x \Delta p = \frac{2}{q} \cdot 2\hbar q = 4\hbar$

Comme d'après la relation de Heisenberg,  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ , on voit que cette valeur est supérieure à la borne inférieure.

**Complément :** Retrouver l'expression de  $\psi(x)$  et l'énergie  $E$  de l'état lié à l'aide du théorème du Viriel.

Le théorème du Viriel nous permet d'écrire :

$$2\langle E_c \rangle = \langle x \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = -\alpha \int x |\psi(x)|^2 \frac{\partial}{\partial x} \delta(x) dx$$

Pour une fonction continuellement dérivable au point  $x = 0$ , la dérivée de  $\delta(x)$  est définie par :

$$\int \left( \frac{\partial}{\partial x} \delta(x) \right) f(x) dx = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} f(x) \right]_{x=0}$$

En utilisant la condition de normalisation  $|A|^2 = q$ , on a alors :

$$2\langle E_c \rangle = -\alpha \left[ -\frac{\partial}{\partial x} (xq) \right]_{x=0} = \alpha q$$

D'autre part la valeur moyenne de l'énergie potentielle est donnée par :

$$\langle V \rangle = -\alpha \int |\psi(x)|^2 \delta(x) dx = -\alpha |A|^2 = -\alpha q$$

Il vient alors :  $E = \langle E_c \rangle + \langle V \rangle = \frac{\alpha q}{2} - \alpha q = \frac{-\alpha q}{2}$  avec  $q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

donc :  $E = \frac{-\hbar^2 q^2}{2m} = \frac{-\alpha q}{2} \Rightarrow \alpha = \frac{-\hbar^2 q}{m}$  et donc  $q = \frac{-m\alpha}{\hbar^2}$

d'où

$$\boxed{E = \frac{-\alpha q}{2} = \frac{m\alpha}{2\hbar^2}}$$

## 15 - Calcul du coefficient de transmission dans le cas d'une particule dans un puits en fonction delta.

On considère un "puits delta" centré sur le point  $a$  correspondant au potentiel singulier :  $V(x) = -\eta \delta(x-a)$  ( $\eta > 0$ )

où  $\delta(x-a)$  représente la distribution de Dirac.

1° Déterminer les conditions satisfaites par la fonction d'onde  $\psi(x)$  représentant un état stationnaire d'énergie  $E$  associée à ce puits.

2° Montrer qu'il existe un état lié dont on déterminera l'énergie et la fonction d'onde correspondantes.

3° Dans le cas où  $E > 0$ , calculer le coefficient de transmission  $T(E)$  en fonction de l'énergie. Donner sa représentation graphique.

Extrait, Rabat, PC 2, Juin 1985.

1° L'équation de Schrödinger indépendante du temps qui détermine les états stationnaires de la particule dans le potentiel  $-\eta \delta(x-a)$  s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - (\eta \delta(x-a) + E) \psi(x) = 0. \quad (1)$$

$\psi(x)$  est continu pour  $x = a$ , mais  $\psi'(x)$  est discontinue en ce point. En intégrant l'équation (1) entre  $a - \varepsilon$  et  $a + \varepsilon$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ;  $\varepsilon > 0$ ) on obtient :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} [\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon)] - \eta \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x-a) \psi(x) dx - E \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi(x) dx = 0$$

or  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi(x) dx = 0$  car  $\psi(x)$  est continue en  $x = a$

et  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x-a) \psi(x) dx = \psi(a)$

Il vient alors :  $\frac{-\hbar^2}{2m} [\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon)] - \eta \psi(a) = 0$

Soit  $\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) = \frac{-2m\eta}{\hbar^2} \psi(a)$

Posons :  $\frac{-2m\eta}{\hbar^2} = \gamma$  :  $\boxed{\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) = -\gamma \psi(a)}$  (2)

2°) Etat lié :  $E < 0$

Le potentiel est nul presque partout. Pour  $x \neq a$ , l'équation (1) s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right) \psi = 0$$

La fonction d'onde de l'état lié peut donc s'écrire :

$$\psi(x) = A e^{q(x-a)} + B e^{-q(x-a)} \quad \text{pour } x < a$$

$$\psi(x) = C e^{q(x-a)} + D e^{-q(x-a)} \quad \text{pour } x > a$$

avec  $q^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$

Comme  $\psi(x)$  doit être bornée dans les deux régions, il faut que :  $B = 0$  et  $C = 0$

Soit  $\begin{cases} \psi(x) = A e^{q(x-a)} & x < a \\ \psi(x) = D e^{-q(x-a)} & x > a \end{cases}$

Les conditions de raccordement en  $x = -a$  donnent alors :  $A = D$  (3)

L'équation (2) s'écrit alors :  $-qD - qA = -\gamma A$  (4)

Compte tenu de (3), on a :  $\gamma = 2q$  avec  $\gamma = \frac{-2m\eta}{\hbar^2}$  et  $q = \frac{-2mE}{\hbar^2}$

Soit  $\left(\frac{-2m\eta}{\hbar^2}\right)^2 = 4 \left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right)$

ou encore  $\boxed{E = -\frac{m\eta^2}{2\hbar^2}}$

La fonction d'onde correspondante est donc :  $\boxed{\psi(x) = A e^{-|q|(x-a)}}$  pour tout  $x$

3°) Cas où  $E > 0$  : coefficient de transmission.

Dans les deux régions que fait apparaître le puits, l'équation (1) s'écrit :  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$

Les fonctions d'ondes correspondantes s'écrivent par commodité de calcul :

$$\begin{cases} \psi(x) = A e^{ik(x-a)} + B e^{-ik(x-a)} & x < a \\ \psi(x) = C e^{ik(x-a)} + D e^{-ik(x-a)} & x > a \end{cases}$$

avec  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Prenons  $D = 0$  (particule incidente venant de  $x = -\infty$ )

On exprime la continuité de  $\psi(x)$  en  $x = a$  et on exprime (2); on a d'une part :  $A + B = C$

et d'autre part :  $ikC - ik(A - B) = -\gamma C$

Soit :  $\begin{cases} A + B = C \\ A - B = C \left(C_1 + \frac{\gamma}{ik}\right) \end{cases}$

D'où l'on déduit que :  $A = C \left(1 + \frac{\gamma}{2ik}\right)$  et  $B = \frac{-\gamma}{2ik} C$

Le coefficient de transmission  $T$  est donné par :

$$T = \frac{|\psi_t|^2}{|\psi_i|^2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{\left|1 + \frac{\gamma}{2ik}\right|^2} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma^2}{4k^2}}$$

soit  $T = \frac{4k^2}{4k^2 + \gamma^2}$

En tenant compte des valeurs de  $k^2$  et  $\gamma^2$ , on obtient :

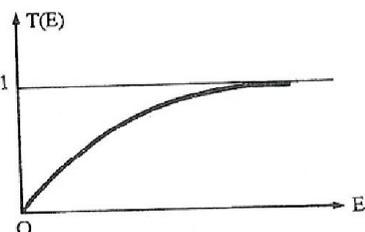
$$T = \frac{4\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)}{4\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right) + \frac{4m^2\eta^2}{\hbar^2}} = \frac{1}{1 + \frac{m\eta^2}{2\hbar^2 E}}$$

ou encore

$$T = \frac{E}{E + \frac{m \eta^2}{2\hbar^2}}$$

La dérivée  $\frac{dT}{dE} = \frac{\frac{m\eta^2}{2\hbar^2}}{\left(E + \frac{m\eta^2}{2\hbar^2}\right)^2}$  est toujours

positive ; donc  $T(E)$  tend vers la valeur limite  $T = 1$  (figure ci-contre)



## 16 - Etude de la vibration de la molécule HCl.

Dans la molécule d'acide chlorhydrique HCl l'atome Cl est assez lourd peut être supposé fixe. L'atome H de masse  $m$  est maintenu à une distance moyenne  $a$  de l'atome Cl par un potentiel  $V(x) = \frac{k}{2}(x-a)^2$  où  $x$  est la distance algébrique de H à Cl et  $k$  est la constante de force réelle. On s'intéresse aux mouvements de vibration de la molécule dans lesquels  $x$  varie de  $-\infty$  à  $+\infty$ .

1°) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps qui décrit les états stationnaires de vibration, représentés par les fonctions d'onde  $\psi(x)$ .

2°) La fonction d'onde de l'état fondamental est de la forme :

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-\alpha^2 (x-a)^2 / 2} \quad A_0 \text{ et } \alpha \text{ réels et positifs.}$$

En vérifiant qu'elle est bien fonction propre de l'équation de 1°) déduire  $\alpha$  et la valeur propre correspondante  $E_0$ , de l'énergie en fonction de  $\hbar$ ,  $m$

$$\text{et } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

3°) La fonction d'onde du 1<sup>er</sup> état excité est de la forme :

$$\psi_1(x) = A_1(x-a) e^{-\beta^2 (x-a)^2 / 2} \quad A_1 \text{ et } \beta \text{ réels et positifs.}$$

Déduire  $\beta$  et  $E_1$  valeur propre de l'énergie.

4°) Normaliser  $\psi_0(x)$  et  $\psi_1(x)$ . On donnera les valeurs de  $A_0$  et  $A_1$  en fonction de  $\alpha$ .

5°) Vérifier que la valeur moyenne  $\langle x \rangle$ , de  $x$  est bien égale à  $a$  dans chacun des états représentés par  $\psi_0(x)$  et  $\psi_1(x)$ .

6°) On définit l'incertitude  $\Delta x$  sur la distance de H à Cl par :

$$\Delta x = \sqrt{\langle \psi | (x-a)^2 | \psi \rangle}$$

Calculer  $\Delta x_0$  dans l'état  $\psi_0(x)$  et  $\Delta x_1$  dans l'état  $\psi_1(x)$ . Comparer  $\Delta x_0$  et  $\Delta x_1$ .

Donner une interprétation physique du résultat.

On utilisera les intégrales :

$$\int_0^{+\infty} y^{2n} e^{-\alpha^2 y^2} dy = \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{2^{n+1} \alpha^{2n+1}} \sqrt{\pi}$$

Extrait, Fes, PC 2, Mai 1985.

1°) L'équation de Schrödinger indépendante du temps qui détermine les états stationnaires de l'atome d'Hydrogène dans le potentiel  $\frac{1}{2} k(x-a)^2$  s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar} \left( \frac{1}{2} k(x-a)^2 - E \right) \psi = 0 \quad (1)$$

2°) Cette équation admet par hypothèse, une solution de la forme :

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-\alpha^2 (x-a)^2 / 2}$$

On en déduit :

$$\frac{d\psi_0}{dx} = \psi_0 (-\alpha^2 (x-a))$$

et

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = \alpha^2 \psi_0(x) [\alpha^2 (x-a)^2 - 1]$$

L'équation (1) étant vérifiée pour  $\psi = \psi_0$ , elle s'écrit alors :

$$\psi_0(x) \left[ \alpha^2 [(x-a)^2 - 1] \alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m k}{\hbar^2} (x-a)^2 \right] = 0$$

Soit après groupement des termes semblables :

$$\psi_0(x) \left\{ [(x-a)^2 \left( \alpha^4 - \frac{m k}{\hbar^2} \right)] + \left[ \frac{2mE_0}{\hbar^2} - \alpha^2 \right] \right\}$$

Le polynôme en  $(x-a)$  est identiquement nul lorsque ses coefficients sont tous nuls. Soit :

$$\alpha^4 - \frac{m k}{\hbar^2} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{2mE_0}{\hbar^2} - \alpha^2 = 0 \quad (3)$$

L'équation (2) de degré 4 en  $\alpha$  ( $\alpha > 0$ ), admet la solution

$$\alpha = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}}$$

L'équation (3) :

$$\frac{2m E_0}{\hbar^2} = \alpha^2 = \frac{m \omega}{\hbar} \quad , \text{ soit :}$$

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

3°) La fonction d'onde du 1<sup>er</sup> état excité est par hypothèse :

$$\psi_1(x) = A_1 (x-a) e^{-(x-a)^2 \beta^2 / 2} [1 - \beta^2 (x-a)^2]$$

et

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} = \beta^2 \psi_1(x) [-3 + \beta^2 (x-a)^2]$$

L'équation (1) est vérifiée pour  $\psi = \psi_1$ , elle devient après groupement des termes semblables :

$$\psi_1(x) \left[ (x-a)^2 \left( \beta^4 - \frac{m k}{\hbar^2} \right) + \left( \frac{2m E_1}{\hbar^2} - 3\beta^2 \right) \right] = 0$$

Le polynôme en  $(x-a)$  est nul si tous les coefficients de ce polynôme sont nuls. Soit :

$$\beta^4 - \frac{m k}{\hbar^2} = 0 \quad \rightarrow \quad \beta = \alpha \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}}$$

$$\frac{2m E_1}{\hbar^2} - 3\beta^2 = 0 \quad \rightarrow \quad E_1 = \frac{3\beta^2 \hbar^2}{2m} = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

4°) Ecrivons la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

◆ Pour  $\psi = \psi_0$  on a :  $|A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 (x-a)^2} dx = 1$

On fait le changement de variable :  $t = x-a$

$$|A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 t^2} dt = |A_0|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} = 1$$

ainsi on a :

$$|A_0|^2 = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} = 2 \sqrt{\frac{m \omega}{\pi \hbar}}$$

◆ Pour  $\psi = \psi_1$  on a :  $|A_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (x-a)^2 e^{-\alpha^2 (x-a)^2} dx = 1$

$$2 |A_1|^2 \int_0^{+\infty} t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt = 1$$

or :

$$\int_0^{+\infty} t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2^2 \alpha^3}$$

donc

$$|A_1|^2 = \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{m \omega}{\hbar} \right)^{3/2}$$

5°) Calculons la valeur moyenne de la coordonnée  $x$  dans l'état  $\psi(x)$  :

◆  $\langle X \rangle_{\psi_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* x \psi_0 dx = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha^2 (x-a)^2} dx$

On pose  $x-a = t$  :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_{\psi_0} &= |A_0|^2 \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} t e^{-\alpha^2 t^2} dt + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 t^2} dt \right] \\ &= |A_0|^2 \left[ \underbrace{\left( -\frac{e^{-\alpha^2 t^2}}{2\alpha^2} \right)}_{=0}^{+\infty} + a \frac{1}{|A_0|^2} \right] \end{aligned}$$

soit

$$\langle x \rangle_{\psi_0} = a$$

◆  $\langle x \rangle_{\psi_1} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_1(x)|^2 dx = |A_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x (x-a)^2 e^{-\alpha^2 (x-a)^2} dx$

$$= |A_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (t+a) t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt$$

$$= |A_1|^2 \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} t^3 e^{-\alpha^2 t^2} dt + a \int_{-\infty}^{+\infty} t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt \right] = |A_1|^2 a \frac{1}{|A_1|^2}$$

↑  
= 0 car  $t^3 e^{-\alpha^2 t^2}$  est une fonction impaire

soit :

$$\langle x \rangle_{\psi_1} = a$$

6°) Par définition, l'incertitude  $\Delta x$  sur la distance de  $H$  à  $Cl$  est :  $\Delta x = \sqrt{\langle \psi | (x-a)^2 | \psi \rangle}$

◆ Calculons  $\Delta x_0$  :

$$\begin{aligned} (\Delta x_0)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x-a)^2 |\psi_0(x)|^2 dx = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (x-a)^2 e^{-\alpha^2 (x-a)^2} dx \\ &= 2 |A_0|^2 \int_0^{+\infty} t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt \end{aligned}$$

En utilisant :

$$\int_0^{+\infty} t^2 e^{-\alpha^2 t^2} dt = \sqrt{\pi} / 2^2 \alpha^3 ;$$

on a :

$$(\Delta x_0)^2 = 2 |A_0|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3} = \frac{1}{\alpha^2} \quad \left( |A_0|^2 = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)$$

soit :

$$\Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \quad \left( \alpha = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} \right)$$

◆ Calculons  $\Delta x_1$  :

$$\begin{aligned} (\Delta x_1)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x-a)^2 |\psi_1|^2 dx = |A_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (x-a)^4 e^{-\alpha^2(x-a)^2} dx \\ &= 2 |A_1|^2 \int_0^{+\infty} t^4 e^{-\alpha^2 t^2} dt \end{aligned}$$

En utilisant l'intégrale :

$$\int_0^{+\infty} t^4 e^{-\alpha^2 t^2} dt = \frac{3\sqrt{\pi}}{2^3 \alpha^5};$$

on a :

$$(\Delta x_1)^2 = 2 \cdot \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{3\sqrt{\pi}}{2^3 \alpha^5} = \frac{3}{2\alpha^2}$$

soit :

$$\Delta x_1 = \sqrt{\frac{3}{2} \frac{\hbar}{m \omega}}$$

L'écart entre  $\Delta x_1$  et  $\Delta x_0$  est important, car l'influence des états excités devient non négligeable.

### 17 - Particule dans un double puits de potentiel.

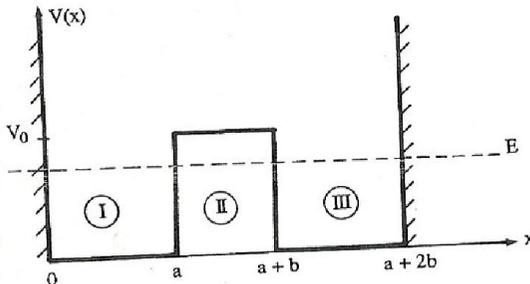
Dans un problème à une dimension, on considère une particule de masse  $m$  confinée dans la région de l'espace définie par  $0 \leq x \leq 2a + b$  sous l'effet de potentiel carré symétrique donné par la figure ci-contre.

On se propose de chercher la fonction d'onde :

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_I(x) & , 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{II}(x) & , 0 \leq x \leq a + b \\ \varphi_{III}(x) & , a + b \leq x \leq 2a + b \end{cases}$$

décrivant cette particule dans un état stationnaire d'énergie propre positive  $E < V_0$ .

1°) Ecrire et résoudre dans les trois régions I, II, III de l'espace l'équation



de Schrödinger indépendante de temps.

2°) Montrer, à partir de la continuité de la fonction d'onde stationnaire  $\varphi(x)$  aux points  $x = 0$  et  $x = 2a + b$ , que  $\varphi_I(x)$  et  $\varphi_{III}(x)$  peuvent s'écrire :

$$\varphi_I(x) = A \sin kx$$

$$\varphi_{III}(x) = D \sin k [x - (2a + b)],$$

où  $A$  et  $D$  sont des nombres d'intégration de  $k$  est tel que:  $k^2 = 2mE / \hbar^2$

3°) D'après les conditions de raccordement aux points  $x = a$  et  $x = a + b$ , établir deux relations différentes entre les amplitudes  $A$  et  $D$ .

En déduire l'équation de quantification des niveaux d'énergie sous la forme

$$\left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka + 1 \right) e^{qb} = \pm \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka - 1 \right)$$

où  $q$  est un paramètre réel positif :  $q^2 = 2m(V_0 - E) / \hbar^2$

4°) Dans le cas où  $qb \gg 1$ , déterminer à l'ordre zéro en  $k/q$  les niveaux d'énergie quantifiée de cette particule.

Extrait, Fès, MP 2, Juin 1988.

1°) ◆ Si  $x \leq 0$  ou  $x \geq 2a + b$ , la particule ne pouvant par se trouver dans cette intervalle, la fonction d'onde  $\varphi(x)$  est alors nulle.

◆ Si  $0 \leq x \leq a$  ou  $a + b \leq x \leq 2a + b$ , le potentiel  $V(x)$  est nul et la fonction d'onde  $\varphi(x)$  de la particule d'énergie  $E$ , vérifie l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k^2 \varphi = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Les solutions de cette équation sont donc sinusoidales. Nous donnerons à ces solutions les formes suivantes, pour alléger les écritures :

$$\varphi_I(x) = A \sin (kx + \varphi)$$

$$\varphi_{III}(x) = D \sin [k(x - (2a + b)) + \varphi']$$

◆ Si  $a \leq x \leq a + b$ , le potentiel  $V(x)$  est égale à  $V_0$  et la fonction d'onde  $\varphi(x)$  de la particule d'énergie  $0 < E < V_0$  vérifie :  $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi = 0$

ou  $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - q^2 \varphi = 0$  avec  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$

Pour tenir compte des propriétés de symétrie du puits, nous donnons à la solution de cette équation la forme suivante :  $\varphi_{II}(x) = B e^{q[x - (a + (b/2))]} + C e^{-q[x - (a + (b/2))]}$

2°) Les conditions de continuité de la fonction d'onde aux frontières du puits ( $x = 0$  et  $x = 2a + b$ ) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \varphi_I(0) = 0 & \quad \text{soit} \quad A \sin \varphi = 0, \quad \text{donc} \quad \varphi = 0 \\ \varphi_{III}(2a+b) = 0 & \quad \text{soit} \quad D \sin \varphi' = 0, \quad \text{donc} \quad \varphi' = 0 \end{aligned}$$

Les fonctions  $\varphi_I$ ,  $\varphi_{II}$ ,  $\varphi_{III}$  peuvent donc s'écrire :

$$\begin{aligned} \varphi_I(x) &= A \sin kx \\ \varphi_{II}(x) &= B e^{q[x-(a+(b/2))]} + C e^{-q[x-(a+(b/2))]} \\ \varphi_{III}(x) &= D \sin k[(x-(2a+b))] \end{aligned}$$

3° Les équations de continuité des fonctions d'onde  $\varphi(x)$  et de leur dérivée  $\frac{d\varphi}{dx} = \varphi'(x)$  s'écrivent :

$$\text{en } x = a \quad \begin{cases} \varphi_I(a) = \varphi_{II}(a) \quad \text{soit} \quad A \sin ka = B e^{-qb/2} + C e^{qb/2} \\ \varphi'_I(a) = \varphi'_{II}(a) \quad \text{soit} \quad k A \cos ka = q [B e^{-qb/2} - C e^{qb/2}] \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{en } x = a+b \quad \begin{cases} \varphi_{II}(a+b) = \varphi_{III}(a+b) \quad \text{soit} \quad B e^{qb/2} + C e^{-qb/2} = -D \sin ka \\ \varphi'_{II}(a+b) = \varphi'_{III}(a+b) \quad \text{soit} \quad q [B e^{qb/2} - C e^{-qb/2}] = kD \cos ka \end{cases} \quad (2)$$

Des équations (1) et (2), on tire :

$$\frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{B e^{-qb/2} + C e^{qb/2}}{B e^{-qb/2} - C e^{qb/2}} \quad (3) \quad \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = -\frac{B e^{qb/2} + C e^{-qb/2}}{B e^{qb/2} - C e^{-qb/2}} \quad (4)$$

L'égalité de ces deux relations nous donne :

$$(B e^{qb/2} - C e^{-qb/2})(B e^{-qb/2} + C e^{qb/2}) = -(B e^{-qb/2} - C e^{qb/2})(B e^{qb/2} + C e^{-qb/2})$$

$$\text{soit} \quad \begin{aligned} B^2 - C^2 &= -B^2 + C^2 \\ B^2 &= C^2 \end{aligned} \quad (5)$$

Il vient alors

$$\boxed{B = \pm C} \quad (5)$$

Introduisons ces égalités dans (1) et (2) :

$$\blacklozenge \text{ Si } B = C \quad A \sin ka = B (e^{-qb/2} + e^{qb/2}) \quad (1)$$

$$-D \sin ka = B (e^{qb/2} + e^{-qb/2}) \quad (2)$$

D'où

$$\boxed{A = -D}$$

$\blacklozenge$  Si  $B = -C$ , il est facile de montrer par un raisonnement analogue que :

$$\boxed{A = +D}$$

En tenant compte de l'égalité (5), les équations (3) et (4) deviennent confondues.

Soit donc :

$$\text{Si } (B = C, A = -D) : \quad \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{e^{-qb/2} + e^{qb/2}}{e^{-qb/2} - e^{qb/2}} = -\operatorname{coth} \frac{qb}{2} \quad (6)$$

ou encore :

$$\frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{1 + e^{qb}}{1 - e^{qb}}$$

$$\left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka - 1 \right) - e^{qb} \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka + 1 \right) = 0$$

donc :

$$\left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka + 1 \right) e^{qb} = \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka - 1 \right) \quad (7)$$

$$\text{Si } (B = -C, A = D) : \quad \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{e^{-qb/2} - e^{qb/2}}{e^{-qb/2} + e^{qb/2}} = -\operatorname{th} \frac{qb}{2} \quad (8)$$

ou encore par un raisonnement analogue, on obtient :

$$\left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka + 1 \right) e^{qb} = - \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka - 1 \right) \quad (9)$$

En résumé, nous avons :

$$\begin{cases} \varphi_I(x) = A \sin kx \\ \varphi_{II}(x) = \begin{cases} 2B \operatorname{ch} q \left( x - \left( a + \frac{b}{2} \right) \right) & \text{solution symétrique} \\ 2B \operatorname{sh} q \left( x - \left( a + \frac{b}{2} \right) \right) & \text{solution antisymétrique} \end{cases} \\ \varphi_{III}(x) = \pm A \sin k [x - (2a+b)] \end{cases}$$

Les équations transcendantes (6), (7), (8), (9) s'écrivent :

$$\frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = -\operatorname{coth} \frac{qb}{2} \quad \text{pour solution symétrique} \quad (6)$$

$$\frac{q}{k} \operatorname{tg} ka = -\operatorname{th} \frac{qb}{2} \quad \text{pour solution antisymétrique} \quad (8)$$

$$\text{ou encore} \quad \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka + 1 \right) e^{qb} = \pm \left( \frac{q}{k} \operatorname{tg} ka - 1 \right) \quad (7) \text{ et } (9)$$

4° Nous reprenons les équations (7) et (9) que nous écrivons sous la forme :

$$\operatorname{tg} ka = \frac{k}{q} \frac{1 + e^{qb}}{1 - e^{qb}} = \frac{k}{q} \frac{e^{-qb} + 1}{e^{-qb} - 1} \quad (10)$$

$$\text{et} \quad \operatorname{tg} ka = \frac{k}{q} \frac{1 - e^{qb}}{1 + e^{qb}} = \frac{k}{q} \frac{e^{-qb} - 1}{e^{-qb} + 1} \quad (11)$$

Si  $qb$  est très grand,  $e^{-qb}$  est petit devant l'unité ;  $\frac{1}{e^{-qb} \mp 1} \approx 1 \pm e^{-qb}$

$$(10) \text{ devient : } \begin{aligned} \operatorname{tg} ka &= -\frac{k}{q}(1 + e^{-qb})(1 + e^{-qb}) \\ &\approx -\frac{k}{q}(1 + 2e^{-qb}) \quad \text{au second ordre} \end{aligned}$$

$$(11) \text{ devient : } \begin{aligned} \operatorname{tg} ka &= \frac{k}{q}(e^{-qb} - 1)(1 - e^{-qb}) \\ &\approx \frac{k}{q}(1 - 2e^{-qb}) \quad \text{au second ordre} \end{aligned}$$

Si de plus on néglige  $e^{-qb}$  devant l'unité, les deux types de solution précédentes deviennent confondus.

$$\boxed{\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{q}}$$

qu'on peut écrire aussi :  $\operatorname{tg} ka = -\frac{kb}{qb}$

Si  $q \rightarrow \infty$ , on obtient alors  $\operatorname{tg} ka = 0$  avec  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Les solutions d'une telle équation :  $ka = n\pi$  ou  $k^2 a^2 = n^2 \pi^2$

soit alors :  $\frac{2mE_n}{\hbar^2} a^2 = n^2 \pi^2$

d'où

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} n^2}$$

**Remarque :** Ce résultat était prévisible, car lorsque  $q \rightarrow \infty$ ,  $V_0 \rightarrow \infty$  et le double puits de potentiel devient donc un puits simple de potentiel infini.

Les énergies pour un tel puits (cf exercice 18) sont :  $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} n^2$

**Complément :** Résoudre graphiquement les équations obtenues en 3°) en se plaçant dans le cas où  $E \ll V_0$ .

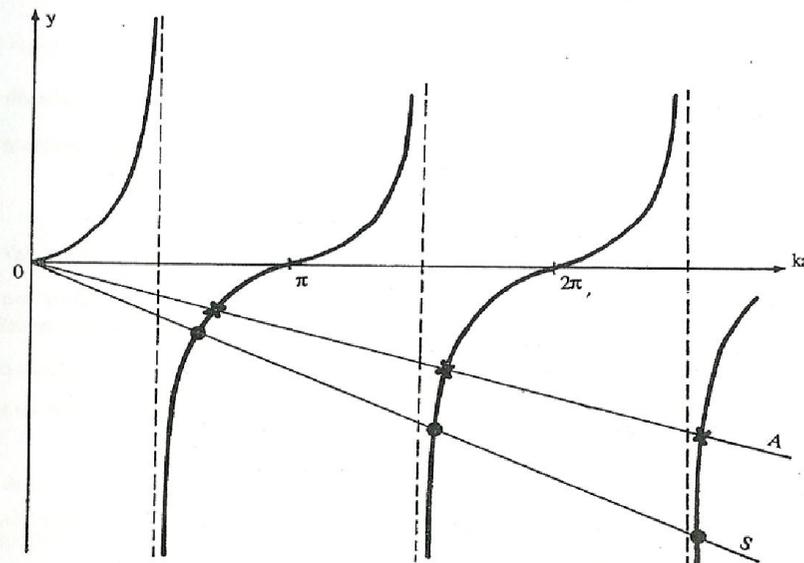
Dans ce cas,  $q \gg k$  et donc  $q \approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$

Nous pouvons alors écrire :  $\operatorname{tg} ka \approx -ka \left( \frac{1 \pm 2e^{-qb}}{q a} \right)$

Le signe + correspond à  $\varphi_s$  (solution symétrique), le signe - à  $\varphi_A$  (solution antisymétrique). Cette équation permet de calculer les valeurs quantifiées de  $ka$ . Ces valeurs sont obtenues graphiquement aux points d'abscisses des intersections des arcs successifs de  $y = \operatorname{tg} ka$  avec deux droites d'équations :

$$y = \begin{cases} -ka \lambda_A \\ -ka \lambda_S \end{cases} \quad (\text{figure ci-dessous})$$

$\lambda_A$  et  $\lambda_S$  sont deux constantes, petites par rapport à 1 ( $q \gg k$ ), voisines et telles que  $\lambda_A < \lambda_S$ .



18 - Particule dans un puits de potentiel infini - Etude physique - Evolution de la fonction d'onde et de la forme du paquet d'ondes - Mesures de l'énergie.

**Notation :**  $|\psi(x, t)\rangle$  désigne l'état quantique d'un système physique à l'instant  $t$ ,  $\psi(x, t)$  est la fonction d'onde correspondante à cet état. On considère une particule de masse  $m$ , soumise au potentiel  $V(x)$ .

L'hamiltonien de cette particule s'écrit :  $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ .

1°) L'évolution de cette particule est régie par l'équation de Schrödinger, écrire cette équation dans les deux représentations  $\{|x\rangle\}$  et  $\{|p\rangle\}$  ?

2°) La particule se trouve placée dans un puits de potentiel infini de largeur  $a$  :

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

Déterminer les états stationnaires de la particule et les valeurs propres qui leur correspondent lorsque  $0 \leq x \leq a$ .

3°) A l'instant  $t = 0$ , la particule a pour fonction d'onde :

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right\} \quad \text{si } 0 \leq x \leq a$$

$$\psi(x,0) = 0 \quad \text{ailleurs}$$

- a) Vérifier que cette fonction d'onde est normée ?  
 b) On mesure à cet instant l'énergie de la particule, quelles valeurs trouve-t-on et avec quelles probabilités ?  
 c) Quelle est la probabilité de trouver une valeur de l'énergie supérieure à  $\frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$  ?

4°) Calculer  $\psi(x, t)$  et démontrer que la densité de probabilité de présence de la particule, dépend de la fréquence de Bohr  $\frac{\omega_{21}}{2\pi}$  dont on précisera l'expression en fonction de  $m$ ,  $a$  et  $\hbar$ .

5°) Calculer la valeur moyenne de l'observable  $X$  :

$$\langle X \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx$$

Conclusion.

N.B : Pour éviter trop de calcul on peut poser, par raison de symétrie,  $X' = x - a/2$ .

On donne :

$$\int_0^a (z - a/2) \sin^2\left(\frac{n\pi z}{a}\right) dz = 0$$

et

$$\int_0^a z \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right) dz = -\frac{16}{18} \frac{\alpha^2}{\pi^2}$$

Extrait, Tétouan, MP-PC 2, Juin 1986.

1°) Considérons une particule de masse  $m$ , plongée dans un potentiel  $V(X)$ . L'hamiltonien de cette particule s'écrit :  $H = \frac{p^2}{2m} + V(X)$

Rappelons l'équation de Schrödinger dans les deux représentations  $\{|x\rangle\}$  et  $\{|p\rangle\}$

◆ Représentation  $\{|x\rangle\}$  :  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t)$

◆ Représentation  $\{|p\rangle\}$  :  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m} \bar{\psi}(p, t) + (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dp' \bar{V}(p-p') \bar{\psi}(p', t)$

avec  $\bar{\psi}(p, t)$  et  $\bar{V}(p)$  sont les transformées de Fourier respectives de  $\psi(x, t)$  et  $V(x)$ .

2°) Dans l'intervalle  $0 < x < a$ , l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (1)$$

Cette équation admet comme solution :  $\psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (2)$

avec  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Les conditions aux limites de la fonction d'onde au point  $x=0$  et  $x=a$  exigent que :

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

soit 
$$\begin{cases} A + B = 0 \\ A e^{ika} + B e^{-ika} = 0 \end{cases} \quad \text{d'où} \quad \begin{cases} A = -B \\ 2iA \sin ka = 0 \end{cases}$$

La solution (2) s'écrit alors :  $\psi(x) = A (e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx$

avec la condition :  $\sin ka = 0$  soit alors :  $ka = n\pi$

$n$  étant un nombre entier positif, car si  $n=0$ ,  $\psi=0$ .

On en déduit les valeurs quantifiées de l'énergie :  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2 \quad n=1, 2, \dots$

L'énergie de la particule ne peut prendre que des valeurs discrètes définies par l'équation (1), avec  $n=1, 2, \dots$  Il y a donc quantification des états d'énergie de la particule.

La fonction propre correspondante :  $\psi_n(x) = K \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

La constante  $K$  se détermine par la condition de normalisation :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1$

En choisissant  $K$  réel et positif ; on a :

$$\int_0^a K^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{K^2}{2} \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right) dx = \frac{K^2}{2} \left[ a - \frac{a}{2n\pi} \left( \sin \frac{2n\pi}{a} x \right)_0^a \right]$$

$$= \frac{K^2}{2} a = 1$$

D'où :

$$K = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

et

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad 0 < x < a$$

$$\psi_n(x) = 0 \quad \text{ailleurs}$$

3°) A l'instant  $t=0$ , la particule a pour fonction d'onde :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[ \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] \quad 0 \leq x \leq a$$

a) Calculons :

$$\int_0^a |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{1}{a} \left[ \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx + \int_0^a \sin^2 \frac{2\pi x}{a} dx + \int_0^a 2 \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} dx \right]$$

$$= \frac{1}{a} \left[ \frac{a}{2} + \frac{a}{2} + 0 \right] = 1$$

Nous vérifions bien que cette fonction d'onde est normée.

b)  $\psi(x, 0)$  est une combinaison linéaire des états  $\psi_1(x)$  et  $\psi_2(x)$  :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x))$$

Les valeurs des énergies qu'on peut trouver lors de la mesure de l'énergie à  $t = 0$  sont donc soit  $E_1$ , soit  $E_2$ .

◆ La probabilité  $\mathcal{P}(E_1)$  du résultat  $E_1$  que peut donner la mesure de l'observable  $H$  à  $t = 0$  est donc :

$$\mathcal{P}(E_1) = |\langle \psi_1 | \psi(x, 0) \rangle|^2 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

◆ Par un raisonnement analogue on a :  $\mathcal{P}(E_2) = |\langle \psi_2 | \psi(x, 0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$ .

c) La valeur de l'énergie  $E_2 = \frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$  correspond à  $n = 2$ .

La probabilité de trouver une valeur de l'énergie supérieur à  $E_2$  ( $n = 3, 4, \dots$ ) est alors :

$$\mathcal{P}(E > E_2) = 1 - [P(E_1) + P(E_2)]$$

Soit

$$\mathcal{P}(E > E_2) = 0$$

$$4^\circ) \text{ ◆ } |\psi(x, 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \sin \frac{\pi x}{a} + \sin \frac{2\pi x}{a} \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \sqrt{\frac{a}{2}} \left( \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x))$$

Appliquons la formule  $|\psi(x, t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{iE_n t / \hbar} |\psi_n\rangle$

Nous obtenons immédiatement :  $|\psi(x, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-iE_1 t / \hbar} |\psi_1\rangle + e^{-iE_2 t / \hbar} |\psi_2\rangle]$

avec  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$  et  $E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$

ou encore en supposant un facteur de phase global de  $|\psi(x, t)\rangle$  :

$$|\psi(x, t)\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\psi_1\rangle + e^{-i \left( \frac{\pi^2 \hbar}{2m a^2} + \frac{4\pi^2 \hbar}{2m a^2} \right) t} |\psi_2\rangle \right]$$

Soit  $|\psi(x, t)\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_1\rangle + e^{-i\omega_{21} t} |\psi_2\rangle]$

avec  $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2 \hbar}{2m a^2}$  (\*)

ou  $\nu_{21} = \frac{\omega_{21}}{2\pi} = \frac{3}{4} \frac{\pi \hbar}{m a^2}$

◆ La forme du paquet d'onde est donnée par la densité de probabilité :

$$|\psi(x, t)|^2 = \langle \psi(x, t) | \psi(x, t) \rangle$$

$$= \left[ \langle \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1 | + \langle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_{21} t} \psi_2 | \right] \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} | \psi_1 \rangle + e^{-i\omega_{21} t} | \psi_2 \rangle \right]$$

$$= \frac{1}{2} \psi_1^2(x) + \frac{1}{2} \psi_2^2(x) + \frac{1}{2} \psi_1 \psi_2 [e^{i\omega_{21} t} + e^{-i\omega_{21} t}]$$

$$= \frac{1}{2} \psi_1^2(x) + \frac{1}{2} \psi_2^2(x) + \psi_1 \psi_2 \cos \omega_{21} t$$

On voit que les variations dans le temps de la densité de probabilité sont dues au terme

d'interférence en  $\psi_1 \psi_2$ . Une seule fréquence de Bohr apparaît :  $\nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{2\pi \hbar} = \frac{3}{4} \frac{\pi \hbar}{m a^2}$

5°) Valeur moyenne de l'observable  $X$ .

Calculons la valeur moyenne  $\langle X \rangle_t$  de la position de la particule à l'instant  $t$  :

$$\langle X \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx$$

Pour éviter trop de calculs, il est commode de poser :  $X' = X - a/2$  car, par symétrie, les éléments de matrice diagonaux de  $X'$  sont nuls. En effet :

$$\langle \psi_1 | X' | \psi_1 \rangle \propto \int_0^a \left( x - \frac{a}{2} \right) \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

$$\langle \psi_2 | X' | \psi_2 \rangle \propto \int_0^a \left( x - \frac{a}{2} \right) \sin^2 \frac{2\pi x}{a} dx = 0$$

Il nous reste à calculer alors :

$$\langle \psi_1 | X' | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | X | \psi_2 \rangle - \frac{a}{2} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} dx$$

$$\langle \psi_1 | X' | \psi_2 \rangle = \frac{2}{a} \left( -\frac{16a^2}{18\pi^2} \right) = -\frac{16a}{19\pi^2}$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \langle X' \rangle_t &= \int_0^a x' \psi_1(x) \psi_2(x) \cos \omega_{21} t \, dx \\ &= \cos \omega_{21} t \langle \psi_1 | X' | \psi_2 \rangle = -\frac{16a}{9\pi^2} \cos \omega_{21} t \end{aligned}$$

Donc

$$\langle X \rangle_t = \langle X' \rangle_t + \frac{a}{2}$$

$$\langle X \rangle_t = \frac{a}{2} - \frac{16}{9\pi^2} \cos \omega_{21} t$$

Remarque :  $\langle X \rangle_t$  représente le mouvement de centre du paquet d'onde.

◆ La valeur moyenne de l'énergie de la particule dans l'état  $|\psi(x, t)\rangle$  s'obtient par :

$$\langle H \rangle_t = \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2 = \frac{5}{2} E_1$$

ainsi que :

$$\langle H^2 \rangle_t = \frac{1}{2} E_1^2 + \frac{1}{2} E_2^2 = \frac{17}{2} E_1^2$$

Ce qui donne :

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{3}{2} E_1$$

On voit que  $\langle H \rangle$ ,  $\langle H^2 \rangle$  et  $\Delta H$  sont indépendants du temps, ce qui est évident car  $H$  est une constante du mouvement.

◆ Le paquet d'onde évolue de manière appréciable au bout d'un temps de l'ordre de :

$$\Delta t \approx \frac{1}{\omega_{21}} \quad (\text{à cause du terme } \cos \omega_{21} t)$$

Soit alors :

$$\Delta H \Delta t \approx \frac{3}{2} E_1 \frac{1}{\omega_{21}}$$

Compte tenu de (\*), on a :

$$\omega_{21} = \frac{3E_1}{\hbar}$$

Soit

$$\Delta H \Delta t \approx \frac{3}{2} E_1 \frac{\hbar}{3E_1} = \frac{\hbar}{2}$$

Nous retrouvons donc la relation d'incertitude temps-énergie.

Complément : Tracer les courbes correspondantes aux variations des fonctions  $\psi_1^2(x)$ ,  $\psi_2^2(x)$  et  $\psi_1(x)\psi_2(x)$ .

La densité de probabilité :  $|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \psi_1^2(x) + \frac{1}{2} \psi_2^2(x) + \psi_1(x)\psi_2(x) \cos \omega_{21} t$

avec  $\psi_1^2(x) = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a}$ ;  $\psi_2^2(x) = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{2\pi x}{a}$ ;  $\psi_1(x)\psi_2(x) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a}$

Les courbes correspondantes aux variations des fonctions  $\psi_1^2$ ,  $\psi_2^2$  et  $\psi_1\psi_2$  sont tracées sur les figures a, b et c.

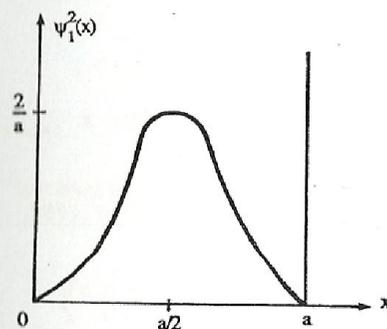


figure a : Densité de probabilité de présence pour le niveau fondamental ( $n = 1$ ).

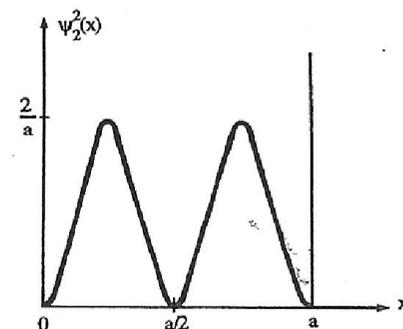


figure b : densité de probabilité de présence pour le 1er niveau excité.

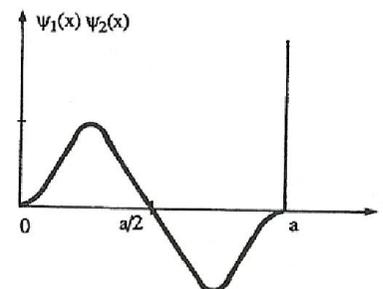


figure c : Terme d'interférence responsable de l'évolution de la forme du paquet d'ondes.

## 19 - Postulats de la mécanique quantique appliqués à une particule confinée dans un puits de potentiel infini.

1) Trouver les états propres et les valeurs propres d'une particule dans un puits de potentiel  $V(x) = 0$  pour  $0 < x < a$  et  $V(x) = \infty$  à l'extérieur.

2) La particule dans le puits précédent se trouve dans l'état  $f(x) = (a-x)x$  pour  $0 < x < a$  et  $\phi(x) = 0$  à l'extérieur. Trouver la probabilité pour qu'un résultat de mesure donne la valeur  $E_n$  à l'instant  $t$ . (Attention toutes les fonctions d'onde doivent être normées !).

Calculer numériquement en particulier les probabilités  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  et  $P_4$  correspondant à  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  et  $E_4$  : Conclure.

3) Exprimer l'énergie moyenne de la particule en fonction de  $E_1, E_2 \dots$  et  $P_1, P_2 \dots$  sachant que  $\sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^4} = \frac{\pi^4}{96}$

Rappel :

$$\int_0^x (Ax'^2 + Bx' + C) \sin x' dx' = (\alpha x^2 + \beta x + \gamma) \cos x + (\lambda x + \mu) \sin x.$$

$\alpha, \beta, \lambda, \gamma, \mu$  doivent être calculés en fonction de  $A, B, C$ .

Extrait, Rabat, MP 2, Mai 1985.

1°) Rappelons les résultats obtenus (cf exercice ...)  $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2 \quad (n \text{ entier} > 0)$$

2°) La particule se trouve dans l'état :  $\phi(x) = A x(a-x)$ .

La relation de normalisation nous impose :  $|A|^2 \int_0^a x^2 (a-x)^2 dx = 1$

En choisissant  $A$  réel et positif, on obtient :  $A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$

donc

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x)$$

Les coefficients  $C_n$  sont déterminés par la connaissance de  $\psi(x, 0)$  :  $\psi(x, 0) = \sum_n C_n \phi_n(x)$

Compte tenu de :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^* \phi_m dx = \delta_{nm}$  ( $\delta$  : symbole de Kronecher)

On a donc :  $C_n = \int_0^a \phi_n^* \psi(x, 0) dx$  (1)

dans notre cas,  $\psi(x, 0) = \phi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x)$

La valeur  $C_n$  est, dans ce cas (1) :

$$\begin{aligned} C_n &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) dx \\ &= \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x(a-x) dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_n &= \sqrt{\frac{60}{a^6}} \left[ a \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right] \\ &= \sqrt{\frac{60}{a^6}} (a I_1 - I_2) \end{aligned}$$

$$\text{avec } I_1 = \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \quad \text{et} \quad I_2 = \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

Ces deux intégrales se calculent aisément par la méthode d'intégration par parties, soit :

$$I_1 = \frac{-a}{n\pi} \left( x \cos \frac{n\pi x}{a} \right)_0^a + \frac{a}{n\pi} \int_0^a \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{-a^2}{n\pi} (-1)^n$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{-a^3}{n\pi} (-1)^n + \frac{2a}{n\pi} \int_0^a x \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= -(-1)^n \frac{a^3}{n\pi} + \frac{2a^3}{(n\pi)^2} [(-1)^n - 1] \end{aligned}$$

$$\text{Il vient alors : } C_n = \frac{\sqrt{60}}{a^3} \frac{2a^3}{(n\pi)^2} [1 - (-1)^n]$$

ou encore

$$C_n = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^2} [1 - (-1)^n] \quad (2)$$

L'état  $\psi(x, 0)$  est donc égal à :

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \sum_n C_n \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^2} [1 - (-1)^n] \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \\ &= \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) \quad 0 \leq x \leq a \end{aligned} \quad (3)$$

Ce développement est celui d'une série de Fourier.

Comme il y a conservation au cours du temps :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, 0) \psi(x, 0) dx = 1$$

donc

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

soit d'après (2) :

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{16 \times 15}{\pi^6} \frac{[1 - (-1)^n]^2}{n^6} = 1$$

d'où

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{[1 - (-1)^n]^2}{n^6} = \frac{\pi^6}{240}$$

\* Si  $n$  est pair ( $n = 2n'$ ) :

$$[1 - (-1)^n]^2 = 0$$

\* Si  $n$  est impair ( $n = 2n' + 1$ ):  $[1 - (-1)^n]^2 = 4$

d'où 
$$\frac{\pi^6}{240} = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{4}{(2n'+1)^6} \quad (n'=p)$$

soit 
$$\frac{\pi^6}{960} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^6}$$

ou encore

$$1 = \frac{960}{\pi^6} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^6} = |C_p|^2$$

$$1 = \frac{960}{\pi^6} \left( 1 + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \frac{1}{7^6} + \dots \right) \quad (4)$$

$$= |C_1|^2 + |C_3|^2 + |C_5|^2 \dots \quad (5)$$

Or  $|C_n|^2$  représente la probabilité  $P_n$  d'avoir le système dans l'état  $\phi_n$ .

En identifiant (4) et (5), on obtient :

$$P_1 = |C_1|^2 = \frac{960}{\pi^6} \leftrightarrow E_1$$

$$P_2 = |C_2|^2 = 0 \leftrightarrow E_2$$

$$P_3 = |C_3|^2 = \frac{960}{\pi^6} \cdot \frac{1}{3^6} \leftrightarrow E_3$$

$$P_4 = |C_4|^2 = 0 \leftrightarrow E_4$$

3°) ♦ L'énergie moyenne de la particule à l'instant  $t$  est :

$$\langle H \rangle_t = \langle \psi(x, t) | H | \psi(x, t) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |C_n|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n P_n$$

♦ L'énergie moyenne dans l'état  $\phi$  est :  $\langle H \rangle_\phi = \langle \phi(x) | H | \phi(x) \rangle$

Soit d'après (3) :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\phi &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n |C_n|^2 \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \cdot \frac{240}{\pi^6} \frac{[1 - (-1)^n]^2}{n^6} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} E_{2p+1} \frac{240}{\pi^6} \frac{4}{(2p+1)^6} \\ &= \frac{960}{\pi^6} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^6} E_{2p+1} \\ &= \frac{960}{\pi^6} \left( \frac{E_1}{1^6} + \frac{E_3}{3^6} + \frac{E_5}{5^6} + \dots + \frac{E_{2p+1}}{(2p+1)^6} + \dots \right) \end{aligned}$$

Or  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2 = n^2 E_1$

Donc :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\phi &= \frac{960}{\pi^6} E_1 \left( 1 + \frac{3^2}{3^6} + \frac{5^2}{5^6} + \dots + \frac{(2p+1)^2}{(2p+1)^6} + \dots \right) \\ &= \frac{960}{\pi^6} E_1 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^4} \end{aligned}$$

En utilisant :  $\sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)^4} = \frac{\pi^4}{96}$ , on obtient :

$$\langle H \rangle_\phi = \frac{960}{\pi^6} E_1 \frac{\pi^4}{96} = \frac{10}{\pi^2} E_1 = E_1$$

20 - Etats d'un système de deux particules - E.C.O.C. - Postulats de la mécanique quantique.

On considère 2 particules de masse  $M$  n'interagissant pas entre elles et soumises à un potentiel.  $V(x) = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2$

L'Hamiltonien du système est donné par  $H = H_1 + H_2$ ,  $H_1$  et  $H_2$  étant respectivement les hamiltoniens de la particule 1 et de la particule 2.

1°) A quelle grandeur physique est associé l'opérateur hamiltonien ? Donner les expressions de  $H_1$  et  $H_2$ .

2°) On appelle  $|\varphi_n\rangle$  l'état propre de  $H_1$ , correspondant à la valeur propre  $E_n$ , dans l'espace des états  $\mathcal{E}_1$ ,  $|\varphi_p\rangle$  l'état propre de  $H_2$  correspondant à la valeur propre  $E_p$  dans l'espace des états  $\mathcal{E}_2$ . L'état propre de  $H$  est défini par le Ket  $|\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle$  appartenant à l'espace  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  appelé produit tensoriel de  $\mathcal{E}_1$  et  $\mathcal{E}_2$ .

Les actions de  $H_1$  et  $H_2$  sur  $|\varphi_{n,p}\rangle$  sont telles que :

$$H_1 |\varphi_{n,p}\rangle = E_n |\varphi_{n,p}\rangle \text{ où } E_n = (n + 1/2) \hbar \omega \text{ et } H_2 |\varphi_{n,p}\rangle = E_p |\varphi_{n,p}\rangle$$

où  $E_p = (p + 1/2) \hbar \omega$ ,  $n$  et  $p$  sont des entiers naturels. Ecrire l'équation aux valeurs propres de  $H$ .

3°) Quel est le degré de dégénérescence des niveaux d'énergie suivants :

$\hbar \omega$ ,  $2\hbar \omega$ ,  $3\hbar \omega$ . Ecrire les kets propres  $|\varphi_{n,p}\rangle$  correspondants à ces 3 niveaux d'énergie.

4°) Lesquels des ensembles suivants forment un E.C.O.C :  $\{H_1\}$  dans  $\mathcal{E}_1$  ?,  $\{H_2\}$  dans  $\mathcal{E}_2$  ?,  $\{H_1\}$  et  $\{H_2\}$  dans  $\mathcal{E}$  ?,  $\{H_1, H_2\}$  dans  $\mathcal{E}$  ?

$\{H\}$  dans  $\mathcal{E}$ ? et  $\{H_1, H\}$  dans  $\mathcal{E}$ ?

Justifier votre réponse dans chaque cas.

5°) L'état du système à l'instant  $t = 0$  est décrit par le ket :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} (|\varphi_{0,0}\rangle + |\varphi_{0,1}\rangle + |\varphi_{1,0}\rangle + |\varphi_{1,1}\rangle).$$

a) Quels résultats peut-on trouver quand on mesure l'énergie du système à l'instant  $t = 0$ ? Avec quelles probabilités?

b) Même question pour l'énergie de la particule 1.

6°) La mesure de l'énergie à  $t = 0$  a donné le résultat  $2\hbar\omega$ .

a) Quelle est l'influence de la mesure? En déduire l'état du système à l'instant  $t$  quelconque.

b) Calculer à l'instant  $t$  la valeur moyenne de l'énergie de la particule 1.

Agadir, PC 2, Mai 1987.

1°) La grandeur physique à laquelle est associé l'Hamiltonien est l'énergie.

L'Hamiltonien du système s'écrit : 
$$H = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{1}{2} m \omega^2 X_i^2 + \frac{1}{2m} P_i^2 \right)$$

2°) L'état propre de  $H$  est défini par le ket  $|\varphi_{n,p}\rangle = |\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle$ . L'équation aux valeurs propres de  $H$  s'écrit donc :

$$(H_1 + H_2) |\varphi_{n,p}\rangle = (E_n + E_p) |\varphi_{n,p}\rangle$$

Les états stationnaires du système global sont des produits tensoriels de la forme :

$$|\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle$$

leurs énergies étant : 
$$E_{np} = E_n + E_p = (n + p + 1)\hbar\omega$$

3°)  $n$  et  $p$  sont des entiers, le niveau fondamental est donc obtenu lorsque  $n = 0$  et  $p = 0$ .

L'énergie correspondante est :  $E_{00} = \hbar\omega$

Ce niveau n'est donc pas dégénéré.

◆ Le premier niveau excité est obtenu soit pour  $n = 1$  et  $p = 0$ , soit pour  $n = 0$  et  $p = 1$  :

$$E_{01} = E_{10} = 2\hbar\omega$$

Ce niveau est deux fois dégénéré puisque à ce même niveau correspond deux états différents qui sont indépendants :  $|\varphi_{1,0}\rangle$  et  $|\varphi_{0,1}\rangle$ .

◆ Le second niveau excité correspond à  $n = 2$  et  $p = 0$ , ou  $n = 0$  et  $p = 2$ , ou  $n = 1$  et  $p = 1$  :

$$E_{20} = E_{02} = E_{11} = 3\hbar\omega$$

Ce niveau est donc trois fois dégénéré.

◆ Les kets propres  $|\varphi_{n,p}\rangle$  correspondants à ces trois niveaux d'énergie sont :

$$\{|\varphi_{0,0}\rangle\}; \{|\varphi_{0,1}\rangle \text{ et } |\varphi_{1,0}\rangle\}; \{|\varphi_{2,0}\rangle, |\varphi_{0,2}\rangle \text{ et } |\varphi_{1,1}\rangle\}$$

4°) D'après les propriétés de l'oscillateur harmonique à une dimension,  $E_n$  est non dégénéré dans  $\mathcal{E}_1$ , et  $E_p$  dans  $\mathcal{E}_2$ ; par conséquent  $\{H_1\}$  constitue à lui seul un E.C.O.C dans  $\mathcal{E}_1$  et  $\{H_2\}$  constitue également un E.C.O.C dans  $\mathcal{E}_2$ .

$\{H_1\}$  ne constitue pas à lui seul un E.C.O.C dans  $\mathcal{E}$  car les valeurs propres correspondantes à  $H_1(E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega)$  sont associées à une infinité de vecteurs propres  $|\varphi_{n,p}\rangle$  ( $n$  étant fixé,  $p$  peut prendre n'importe quelle valeur). Le raisonnement est analogue pour  $\{H_2\}$  dans  $\mathcal{E}$ .

Nous avons vu à la troisième question qu'à un couple  $(n, p)$  correspond plusieurs vecteurs propres  $|\varphi_{n,p}\rangle$  de  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}$ , donc  $\{H_1 + H_2 = H\}$  ne constitue pas un E.C.O.C dans  $\mathcal{E}$ . Par contre, l'ensemble des deux hamiltoniens  $H_1$  et  $H_2$  constitue, lui un E.C.O.C. En effet, il n'y a pas deux vecteurs  $|\varphi_{n,p}\rangle$  qui aient les mêmes valeurs propres, à la fois pour  $H_1$  et  $H_2$ . C'est pourquoi, le système de vecteurs propres communs à  $H_1$  et  $H_2$  est unique (à des facteurs de phases près).

$\{H_1, H_2\}$  forme lui aussi un E.C.O.C dans  $\mathcal{E}$ . En effet, les valeurs propres de  $H_1$  et  $H_2$  sont respectivement  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  et  $(p + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . Pour tout  $n$ , il existe plusieurs vecteurs  $|\varphi_{n,p}\rangle$ , mais le vecteur propre associé à  $H$  exige que l'on fixe de même  $p$ : il n'y a pas donc deux vecteurs propres  $|\varphi_{n,p}\rangle$  qui aient les mêmes valeurs propres à la fois à  $H_1$  et  $H_2$ .

5°) L'état du système à  $t = 0$  est décrit par le ket :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} [|\varphi_{0,0}\rangle + |\varphi_{0,1}\rangle + |\varphi_{1,0}\rangle + |\varphi_{1,1}\rangle]$$

a) Les résultats de mesure de l'énergie sont les valeurs propres des vecteurs  $|\varphi_{n,p}\rangle$  constituant  $|\psi(0)\rangle$ . Soit alors,  $\hbar\omega$ ,  $2\hbar\omega$  et  $3\hbar\omega$ . La probabilité  $\mathcal{P}_{a_{np}}$  d'obtenir comme résultat la valeur propre  $a_{np}$  de l'observable  $H$  correspondante est :

$$\mathcal{P}_{a_{np}} = \sum_i^g | \langle \varphi_{n,p}^i | \psi(0) \rangle |^2$$

où  $g_n$  est le degré de dégénérescence de  $a_{np}$  et  $|\varphi_{n,p}^i\rangle$  un système orthonormé de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre  $\mathcal{E}_n$  associé à la valeur propre  $a_{np}$  de  $H$ .

Soit :

$$\mathcal{P}_{\hbar\omega} = | \langle \varphi_{0,0} | \psi(0) \rangle |^2 = 1/4$$

$$\mathcal{P}_{2\hbar\omega} = | \langle \varphi_{0,1} | \psi(0) \rangle |^2 + | \langle \varphi_{1,0} | \psi(0) \rangle |^2 = 1/2$$

$$\mathcal{P}_{3\hbar\omega} = | \langle \varphi_{1,1} | \psi(0) \rangle |^2 = 1/4$$

Remarquons que :

$$\mathcal{P}_{\hbar\omega} + \mathcal{P}_{2\hbar\omega} + \mathcal{P}_{3\hbar\omega} = 1$$

b) Energie de la particule 1 :

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

$$\text{et } H_1 |\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} (E_0 |\varphi_{0,0}\rangle + E_0 |\varphi_{0,1}\rangle + E_1 |\varphi_{1,0}\rangle + E_1 |\varphi_{1,1}\rangle)$$

Les seules valeurs possibles sont donc  $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$  et  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$  avec les probabilités respectives :

$$\mathcal{P}_{E_0} = |\langle \varphi_{0,0} | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle \varphi_{0,1} | \psi(0) \rangle|^2 = 1/2$$

$$\mathcal{P}_{E_1} = |\langle \varphi_{1,0} | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle \varphi_{1,1} | \psi(0) \rangle|^2 = 1/2$$

6°) La mesure de l'énergie totale à  $t = 0$  a donné le résultat  $2\hbar \omega = E_{0,1} = E_{1,0}$ . L'état du système juste après la mesure est la projection normée  $\frac{P_n |\psi(0)\rangle}{\sqrt{\langle \psi(0) | P_n | \psi(0) \rangle}}$

de  $|\psi(0)\rangle$  sur le sous espace propre associé à  $2\hbar \omega$ .

Soit donc :  $P_n = |\varphi_{0,1}\rangle \langle \varphi_{0,1}| + |\varphi_{1,0}\rangle \langle \varphi_{1,0}|$

Il vient alors :

$$\begin{cases} P_n |\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} [|\varphi_{0,1}\rangle + |\varphi_{1,0}\rangle] \\ \langle \psi(0) | P_n | \psi(0) \rangle = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} \end{cases}$$

d'où l'état du système est :  $|\phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_{0,1}\rangle + |\varphi_{1,0}\rangle]$

On voit que la mesure de l'énergie a perturbé l'état du système.

L'état du système à un instant  $t$  quelconque est donné par :

$$|\phi(t)\rangle = \sum C_{np}(0) e^{-i E_{np} t / \hbar} |\varphi_{n,p}\rangle$$

$$\text{Soit } |\phi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i E_{01} t / \hbar} |\varphi_{0,1}\rangle + e^{-i E_{10} t / \hbar} |\varphi_{1,0}\rangle]$$

$$\text{Comme } E_{01} = E_{10} = 2\hbar\omega, \text{ alors : } |\phi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2i\omega t} [|\varphi_{0,1}\rangle + |\varphi_{1,0}\rangle]$$

Remarque :  $|\phi(0)\rangle$  et  $|\phi(t)\rangle$  ne diffèrent donc l'un de l'autre que par le facteur de phase global  $e^{-2i\omega t}$ . Ces deux états sont physiquement indiscernables : toutes les propriétés physiques d'un système physique qui se trouve dans un état propre de  $H$  ne varient pas au cours du temps. Ces états propres sont appelés pour cette raison états stationnaires.

b) La valeur moyenne de l'énergie de la particule 1 est donnée par :

Compte tenu de la remarque précédente :  $\langle H_1 \rangle_t = \langle H_1 \rangle_0$

Soit  $\langle H_1 \rangle_0 = \langle \phi(0) | H_1 | \phi(0) \rangle$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} [\langle \varphi_{0,1} | H_1 | \varphi_{0,1} \rangle + \langle \varphi_{1,0} | H_1 | \varphi_{1,0} \rangle + \langle \varphi_{0,1} | H_1 | \varphi_{1,0} \rangle + \langle \varphi_{1,0} | H_1 | \varphi_{0,1} \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [2\hbar\omega + 2\hbar\omega] \end{aligned}$$

Donc

$$\langle H_1 \rangle_0 = 2\hbar\omega$$

## 21 - Postulats de la mécanique quantique - Ensembles complets d'observables qui commutent : E.C.O.C.

On considère que l'espace des états à trois dimensions est rapporté à la base orthonormée  $\{|u_i\rangle\}$   $i = 1, 2, 3$ . L'Hamiltonien  $H$  et deux observables  $A$  et  $B$  sont représentées par les matrices :

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

$\omega_0$ ,  $a$  et  $b$  sont des constantes réelles positives. A l'instant  $t = 0$  le système physique est décrit par :

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

1°) a) On mesure à l'instant initial l'énergie du système, quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

b) Calculer dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ ,  $\langle H \rangle$  et  $\Delta H$ .

2°) a) Au lieu de mesurer  $H$  à l'instant  $t = 0$ , on mesure  $A$ . Quels sont les résultats possibles et leurs probabilités ? Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?

b)  $H$  et  $A$  forment-elles un E.C.O.C ?

3°) Calculer  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$ .

4°) Calculer les valeurs moyennes  $\langle A \rangle_t$  et  $\langle B \rangle_t$ , de  $A$  et  $B$  à l'instant  $t$ .

5°) Quels résultats obtient-on si l'on mesure à l'instant  $t$  l'observable  $A$  ? Même question pour l'observable  $B$ , avec quelles probabilités ? Retrouver  $\langle B \rangle_t$  en utilisant les probabilités.

1°) a) L'hamiltonien  $H$  est diagonal dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

Les résultats possibles de l'énergie sur une mesure de l'énergie sont les valeurs propres de  $H$  qui sont :  $\hbar \omega_0$  (valeur propre simple) et  $2\hbar \omega_0$  (valeur propre double).

La probabilité qu'une mesure de  $H$  donne  $\hbar \omega_0$  est  $\mathcal{P}_1$  :  $\mathcal{P}_1 = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$

La probabilité qu'une mesure de  $H$  donne  $2\hbar \omega_0$  est  $\mathcal{P}_2$  :

$$\mathcal{P}_2 = |\langle u_2 | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle u_3 | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

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

Comme  $H$  est diagonal, il n'y a que les termes diagonaux qui ne sont pas nuls. Il vient alors :

$$\langle H \rangle_0 = \sum_{i=1}^3 |c_i|^2 \langle u_i | H | u_i \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 + \frac{1}{4} (2\hbar \omega_0 + 2\hbar \omega_0)$$

$$\langle H \rangle_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$$

♦ L'écart quadratique moyen est défini par :

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}$$

Avec

$$\langle H^2 \rangle = \langle \psi(0) | H^2 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 \omega_0^2 + \frac{1}{4} (4\hbar^2 \omega_0^2 + 4\hbar^2 \omega_0^2)$$

$$\langle H^2 \rangle = \frac{5}{2} \hbar^2 \omega_0^2$$

$$\text{On en déduit : } \Delta H^2 = \frac{5}{2} \hbar^2 \omega_0^2 - \frac{9}{4} \hbar^2 \omega_0^2 = \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{4}$$

$$\text{Soit : } \Delta H = \frac{\hbar \omega_0}{2}$$

2°) a) La matrice représentative de  $A$  dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  s'écrit :

$$A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de la sous-matrice non diagonale sont  $\lambda_{\pm}$  telles que :  $\lambda^2 - a^2 = 0$

$$\text{Soit : } \lambda_{\pm} = \pm a$$

et les vecteurs propres correspondants s'écrivent aisément :

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle + |u_3\rangle] \quad \leftrightarrow \quad (\text{valeur propre } +a)$$

$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle - |u_3\rangle] \quad \leftrightarrow \quad (\text{valeur propre } -a)$$

$$|\varphi_0\rangle = |u_1\rangle \quad \leftrightarrow \quad (\text{valeur propre } +a)$$

Les résultats possibles lors de la mesure de  $A$  à  $t=0$  sont  $+a$  et  $-a$  avec les probabilités  $\mathcal{P}_a^+$  et  $\mathcal{P}_a^-$  telles que :

$$\mathcal{P}_a^- = |\langle \varphi_- | \psi(0) \rangle|^2 \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_a^+ = 1 - \mathcal{P}_a^-$$

Notons que l'état  $|\psi(0)\rangle$  peut s'écrire en fonction des  $|\varphi_i\rangle$  :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_0\rangle + i|\varphi_-\rangle) \quad (1)$$

Il vient alors :

$$\mathcal{P}_a^- = |\langle \varphi_- | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\mathcal{P}_a^+ = 1 - \mathcal{P}_a^- = \frac{1}{2}$$

♦ Si la mesure de  $A$  a donné  $(+a)$ , l'état du système immédiatement après la mesure est le ket normé

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

où  $P_a$  est le projecteur défini dans le sous-espace associé à la valeur propre  $(+a)$  engendré par  $|\varphi_0\rangle$  et  $|\varphi_+\rangle$ . Soit :

$$P_a = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| + |\varphi_+\rangle\langle\varphi_+|$$

$$P_a |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_0\rangle \quad \text{et} \quad \langle \psi(0) | P_a | \psi(0) \rangle = \frac{1}{2}$$

D'où

$$|\phi_a\rangle = |\varphi_0\rangle \quad \text{à un facteur de phase près.}$$

♦ Si la mesure de  $A$  a donné  $(-a)$ , l'état du système juste après la mesure est :

$$|\phi_{-a}\rangle = \frac{P_{-a} |\psi(0)\rangle}{\sqrt{\langle \psi(0) | P_{-a} | \psi(0) \rangle}} \quad \text{avec } P_{-a} = |\varphi_-\rangle\langle\varphi_-|$$

$$\text{Donc } P_{-a} |\psi(0)\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} |\varphi_-\rangle \quad \text{et} \quad \sqrt{\langle \psi(0) | P_{-a} | \psi(0) \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Il vient alors :  $|\phi_{-a}\rangle = i|\varphi_-\rangle$  Ou encore  $|\phi_{-a}\rangle = |\varphi_-\rangle$  à un facteur de phase près.

b) Les vecteurs propres communs à  $H$  et  $A$  sont donnés par :

	valeur propre de $H$	valeur propre de $A$
$ \varphi_0\rangle =  u_1\rangle$	$\hbar \omega_0$	$a$
$ \varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ u_2\rangle +  u_3\rangle]$	$2\hbar \omega_0$	$a$
$ \varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ u_2\rangle -  u_3\rangle]$	$2\hbar \omega_0$	$-a$

On voit sur le tableau que  $H$  a une valeur propre dégénérée deux fois ( $2\hbar\omega_0$ ) et  $A$  a elle aussi une valeur dégénérée deux fois ( $a$ ). Donc, aucun des ensembles  $\{H\}$  ou  $\{A\}$  ne constitue à lui seul, un E.C.O.C. Par contre, l'ensemble des deux observables  $\{H, A\}$  constitue, lui, un E.C.O.C car il n'a y pas deux vecteurs  $|\varphi_i\rangle$  qui aient les mêmes valeurs propres, à la fois pour  $H$  et  $A$ .

3°) L'état du système à un instant  $t$  ultérieur est donné par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

En utilisant le tableau ci-dessus et l'expression de  $|\psi(0)\rangle$  (1), on obtient :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-i\omega_0 t} |\varphi_0\rangle + i e^{-2i\omega_0 t} |\varphi_-\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-i\omega_0 t} |\varphi_0\rangle + e^{-i(2\omega_0 t - \frac{\pi}{2})} |\varphi_-\rangle \right] \end{aligned}$$

Qu'on peut écrire autrement en supprimant un facteur de phase global ( $e^{-i\omega_0 t}$ ):

$$|\psi(t)\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\varphi_0\rangle + e^{-i(\omega_0 t - \frac{\pi}{2})} |\varphi_-\rangle \right] \quad (2)$$

4°) ♦ La valeur moyenne de  $A$  est définie par :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left[ \left( \langle \varphi_0 | + e^{i(\omega_0 t + \frac{\pi}{2})} \langle \varphi_- | \right) A \left( |\varphi_0\rangle + e^{-i(\omega_0 t + \frac{\pi}{2})} |\varphi_-\rangle \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle \varphi_0 | A | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_- | A | \varphi_- \rangle \right] \\ &\quad \uparrow = a \qquad \qquad \qquad \uparrow = -a \end{aligned}$$

Soit alors :

$$\langle A \rangle_t = 0$$

♦ Il est facile de remarquer que  $B$  et  $H$  ne commutent pas et donc  $B$  n'est pas une constante du mouvement : le résultat de  $\langle B \rangle_t$  va dépendre automatiquement du temps.

Ecrivons :  $|\psi(t)\rangle$  en fonction des  $|u_i\rangle$  :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |u_n\rangle \\ &= \frac{e^{-2i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle - \frac{i}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle \end{aligned}$$

Ou encore  $|\psi(t)\rangle \propto \frac{e^{i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{2} (|u_2\rangle - |u_3\rangle) = \sum_n C_n(t) |u_n\rangle$

avec  $C_1(t) = \frac{e^{i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} |u_1\rangle$  ;  $C_2(t) = \frac{i}{2}$  ;  $C_3(t) = \frac{-i}{2}$

La valeur moyenne de  $B$  à l'instant  $t$  est :

$$\langle B \rangle_t = \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle = \sum_{ij} C_i^* C_j \langle u_j | B | u_i \rangle$$

Avec  $\langle u_j | B | u_i \rangle = B_{ji}$  les éléments de matrice de  $B$  dans la base des  $|u_i\rangle$ . Les seuls non nuls sont :

$$\langle u_1 | B | u_2 \rangle = \langle u_2 | B | u_1 \rangle = \langle u_3 | B | u_3 \rangle = b$$

Il vient donc :

$$\langle B \rangle_t = C_2^* C_1 B_{12} + C_1 C_2^* B_{21} + C_3^* C_3 B_{33}$$

Compte tenu des définitions des  $C_i$ , on obtient :

$$\langle B \rangle_t = b \left[ \frac{i}{2} \frac{e^{-i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} + \frac{e^{i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} \left( \frac{-i}{2} \right) + \left( \frac{-i}{2} \right) \left( \frac{i}{2} \right) \right]$$

$$\langle B \rangle_t = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t}}{2i} \right) + \frac{1}{4} \right]$$

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

La valeur moyenne de  $B$  oscille alors entre  $b \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$  et  $b \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$

5°) ♦ Les résultats de mesure de  $A$  à  $t > 0$  sont ( $a$ ) ou ( $-a$ ) avec les probabilités respectives  $\mathcal{P}_a$  et  $\mathcal{P}_{-a}$  telles que :

$$* \mathcal{P}_a = |\langle \varphi_0 | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle \varphi_+ | \psi(t) \rangle|^2 = 1/2$$

$$* \mathcal{P}_{-a} = |\langle \varphi_- | \psi(t) \rangle|^2 = 1/2$$

♦ Les résultats possibles lors de la mesure de  $B$  sont les valeurs propres de  $B$ . Pour cela, la diagonalisation de la sous-matrice de  $B$  donne  $b$  et  $-b$  comme valeurs propres. Les vecteurs propres correspondants s'écrivent aisément :

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |u_1\rangle + |u_2\rangle ] \quad \leftrightarrow \quad b$$

$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |u_1\rangle - |u_2\rangle ] \quad \leftrightarrow \quad -b$$

$$|\varphi_0'\rangle = [ |u_3\rangle ] \quad \leftrightarrow \quad b$$

La probabilité de trouver la valeur ( $-b$ ) est :  $\mathcal{P}_{-b} = |\langle \varphi_- | \psi(t) \rangle|^2$

En utilisant (3), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{-b} &= \left| \langle \varphi_1' | \frac{e^{i\omega_0 t}}{\sqrt{2}} u_1 \rangle + \langle \varphi_2' | \frac{i}{2} u_2 \rangle + \langle \varphi_3' | \frac{-i}{2} u_3 \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{e^{i\omega_0 t}}{2} - \frac{i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{4} \left| \cos \omega_0 t - i \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - \sin \omega_0 t \right) \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left[ \cos^2 \omega_0 t + \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - \sin \omega_0 t \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Soit :

$$\mathcal{P}_{-b} = \frac{3}{8} - \frac{\sin \omega_0 t}{2\sqrt{2}}$$

Nous avons :

$$\mathcal{P}_{+b} + \mathcal{P}_{-b} = 1, \text{ on en déduit } \mathcal{P}_{+b} :$$

$$\mathcal{P}_{+b} = \frac{5}{8} - \frac{\sin \omega_0 t}{2\sqrt{2}}$$

◆ En utilisant la relation :

$$\langle B \rangle_t = \sum_n b_n \mathcal{P}_{b_n}$$

On obtient :

$$\langle B \rangle_t = b \left( \frac{5}{8} + \frac{\sin \omega_0 t}{2\sqrt{2}} \right) - b \left( \frac{3}{8} + \frac{\sin \omega_0 t}{2\sqrt{2}} \right)$$

$$\langle B \rangle_t = b \left( \frac{1}{4} + \frac{\sin \omega_0 t}{2\sqrt{2}} \right) \quad \text{c.q.f.d}$$

## 22 - Postulats de la mécanique quantique - Mesures simultanées.

On considère un système conservatif à trois niveaux décrit par l'hamiltonien  $H_0$  ; les trois états de base du système sont représentés par les trois vecteurs  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle$  états propres de  $H_0$  avec la même valeur propre  $E_0$ .

$$H_0 |\varphi_1\rangle = E_0 |\varphi_1\rangle ; H_0 |\varphi_2\rangle = E_0 |\varphi_2\rangle ; H_0 |\varphi_3\rangle = E_0 |\varphi_3\rangle$$

Le couplage entre les différents états précédents est décrit par un hamiltonien  $V$  dont les seuls éléments de matrice non nuls sont :

$$\langle \varphi_1 | V | \varphi_3 \rangle = \langle \varphi_3 | V | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | V | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_2 | V | \varphi_1 \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$$

où  $\lambda$  est une constante réelle telle que  $0 < \lambda < E_0$

1°) Ecrire la matrice représentant l'hamiltonien total  $H = H_0 + V$  dans la base  $\{ |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle \}$ .

2°) a) Déterminer, en fonction de  $E_0$  et de  $\lambda$ , les valeurs propres  $\varepsilon_-, \varepsilon_0, \varepsilon_+$  de l'hamiltonien total  $H$  (remarquer que  $0 < \varepsilon_- < \varepsilon_0 < \varepsilon_+$ )

b) Déterminer les kets propres correspondants aux valeurs propres que l'on notera respectivement  $|\psi_-\rangle, |\psi_0\rangle$  et  $|\psi_+\rangle$  et que l'on exprimera dans la base  $\{ |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle \}$ .

3°) Le système est à l'instant  $t = 0$  dans l'état  $|\mathcal{E}(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$ ,

a) Déterminer l'état du système à un instant  $t$  ultérieur que l'on notera  $|\mathcal{E}(t)\rangle$ . Le système a-t-il évolué ?

b) Calculer la valeur moyenne de  $H$  dans l'état  $|\mathcal{E}(t)\rangle$ .

Retrouver la définition classique d'un système conservatif.

4°) Soit l'observable  $A$  dont la matrice dans la base  $\{ |\psi_-\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_+\rangle \}$

$$\text{est : } \begin{pmatrix} -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +a \end{pmatrix}$$

Si on mesure simultanément les observables  $A$  et  $H$  à l'instant  $t$ .

- L'état du système étant  $|\mathcal{E}(t)\rangle$ , quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

5°) On considère l'observable  $B$  dont la matrice dans la base

$$\{ |\psi_-\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_+\rangle \} \text{ est : } B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix}$$

a) Si l'état du système à l'instant  $t = 0$  est :

$$|\mathcal{E}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi_-\rangle + \frac{1}{2} |\psi_0\rangle + \frac{1}{2} |\psi_+\rangle,$$

et si on mesure l'observable  $B$ , quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Doit-on s'attendre à ce résultat ?

b) Déterminer l'état  $|\mathcal{E}(t)\rangle$  du système à un instant  $t$  ultérieur. Le système a-t-il évolué ?

c) Quels résultats obtiendra-t-on si l'on remesure à l'instant  $t$  l'observable  $B$  et avec quelle probabilité ?

Retrouver le résultat de la question a).

Méknès, PC 2, Mai 1987.

1°) Sur la base  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle$ , la matrice représentant  $H = H_0 + V$  s'écrit :

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & E_0 & 0 \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad \text{avec } 0 < \lambda < E_0$$

2°) a) Les valeurs propres cherchées sont racines de :

$$\text{Dét} \begin{vmatrix} E_0 - \alpha & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & E_0 - \alpha & 0 \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & 0 & E_0 - \alpha \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_0 - \alpha) [(E_0 - \alpha)^2 - \lambda^2] = 0$$

Soit

$$\varepsilon_0 = E_0 ; \varepsilon_- = E_0 - \lambda ; \varepsilon_+ = E_0 + \lambda$$

On voit que :

$$0 < \varepsilon_- < E_0 < \varepsilon_+$$

b) Les kets propres correspondants aux valeurs propres  $\varepsilon_-$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_+$  sont notés respectivement  $|\psi_- \rangle$ ,  $|\psi_0 \rangle$  et  $|\psi_+ \rangle$

◆ On fait agir le ket  $|\psi_- \rangle = x|\varphi_1 \rangle + y|\varphi_2 \rangle + z|\varphi_3 \rangle$  sur la matrice représentant l'Hamiltonien  $H$  :

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & E_0 & 0 \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & 0 & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (E_0 - \lambda) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} E_0 x + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(y+z) = (E_0 - \lambda)x \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}}x + E_0 y = (E_0 - \lambda)y \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}}x + E_0 z = (E_0 - \lambda)z \end{cases}$$

On en déduit :  $x = -\sqrt{2}z = -\sqrt{2}y$

Soit  $x = 1 ; y = \frac{-1}{\sqrt{2}} ; z = \frac{-1}{\sqrt{2}}$

Le ket  $|\psi_- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1 \rangle - \frac{1}{2}(|\varphi_2 \rangle + |\varphi_3 \rangle)$  correspond donc à la valeur  $(E_0 - \lambda)$ .

◆ On fait agir de nouveau le ket  $|\psi_+ \rangle$  sur  $H$  :  $H|\psi_+ \rangle = (E_0 + \lambda)|\psi_+ \rangle$

On en déduit facilement :  $x = \sqrt{2}z = \sqrt{2}y$

Soit  $|\psi_+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1 \rangle + \frac{1}{2}(|\varphi_2 \rangle + |\varphi_3 \rangle)$

◆ Par un raisonnement analogue on obtient :  $|\psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_2 \rangle - |\varphi_3 \rangle)$

En résumé, on a :

$$(1) \quad |\psi_- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1 \rangle - \frac{1}{2}[|\varphi_2 \rangle + |\varphi_3 \rangle] \rightarrow \varepsilon_- = E_0 - \lambda$$

$$(2) \quad |\psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\varphi_2 \rangle - |\varphi_3 \rangle] \rightarrow \varepsilon_0 = E_0$$

$$(3) \quad |\psi_+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1 \rangle + \frac{1}{2}[|\varphi_2 \rangle + |\varphi_3 \rangle] \rightarrow \varepsilon_+ = E_0 + \lambda$$

3°) a) Le système est à l'instant  $t = 0$  dans l'état  $|\mathcal{E}(0) \rangle = |\varphi_1 \rangle$ .

Exprimons d'abord  $|\varphi_1 \rangle$  dans la base  $|\psi_- \rangle, |\psi_0 \rangle, |\psi_+ \rangle$

$$|\mathcal{E}(0) \rangle = |\varphi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_- \rangle + |\psi_+ \rangle] \quad (4)$$

A un instant  $t > 0$ , le système sera décrit par le vecteur  $|\mathcal{E}(t) \rangle$  :

$$|\mathcal{E}(t) \rangle = \sum_{n=1}^2 C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n \rangle$$

Soit :  $|\mathcal{E}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i(E_0 - \lambda)t/\hbar} |\psi_- \rangle + e^{-i(E_0 + \lambda)t/\hbar} |\psi_+ \rangle)$

$$|\mathcal{E}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0 t/\hbar} [e^{i\lambda t/\hbar} |\psi_- \rangle + e^{-i\lambda t/\hbar} |\psi_+ \rangle]$$

ou encore à un facteur de phase global près :

$$|\mathcal{E}(t) \rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_- \rangle + e^{-2i\lambda t/\hbar} |\psi_+ \rangle] \quad (6)$$

La présence du couplage ( $V$ ) introduit donc un terme  $e^{-2i\lambda t/\hbar}$  entre le coefficient affecté au ket  $|\psi_+\rangle$  : le système a donc évolué au cours du temps.

b) Par définition, la valeur moyenne de  $H$  dans l'état  $|\mathcal{E}(t)\rangle$  normé est :

$$\langle H \rangle_t = \langle \mathcal{E}(t) | H | \mathcal{E}(t) \rangle$$

$$\text{D'après (6) : } H | \mathcal{E}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (E_0 - \lambda) | \psi_-\rangle + (E_0 + \lambda) e^{-2i\lambda t/\hbar} | \psi_+\rangle \right]$$

$$\text{Or } \langle \mathcal{E}(t) | = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \langle \psi_- | + e^{2i\lambda t/\hbar} \langle \psi_+ | \right]$$

$$\text{Il vient alors : } \langle H \rangle_t = \frac{1}{2} \left[ (E_0 - \lambda) + (E_0 + \lambda) \right]$$

$$\boxed{\langle H \rangle_t = E_0}$$

4°) Soit l'observable  $A$  dont la matrice dans la base  $\{ | \psi_-\rangle, | \psi_0\rangle, | \psi_+\rangle \}$  est :

$$\begin{pmatrix} -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$$

On voit aisément que  $HA = AH$  : donc il est possible de mesurer simultanément  $A$  et  $H$ .

Les vecteurs propres communs à  $H$  et  $A$  sont donnés par :

	valeur propre de $H$	valeur propre de $A$
$ \psi_-\rangle$	$\varepsilon_- = E_0 - \lambda$	$-a$
$ \psi_0\rangle$	$\varepsilon_0 = E_0$	$0$
$ \psi_+\rangle$	$\varepsilon_+ = E_0 + \lambda$	$a$

Les résultats de mesure de  $H$  et  $A$  simultanément à l'instant  $t$  donnent les couples suivants ;  $(\varepsilon_-, -a)$  ;  $(\varepsilon_+, a)$ . Les probabilités correspondantes sont :

$$\mathcal{P}_{(\varepsilon_-, -a)} = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

$$\mathcal{P}_{(\varepsilon_+, a)} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2i\lambda t/\hbar} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

5°) Considérons l'observable  $B$  dont la matrice dans la base  $\{ | \psi_-\rangle, | \psi_0\rangle, | \psi_+\rangle \}$  est :

$$B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Les valeurs propres sont :  $b$ ,  $b$  et  $-b$ . Cherchons les vecteurs propres associés à  $B$  :

◆ Il est facile de remarquer que  $B | \psi_-\rangle = b | \psi_-\rangle$  ; donc  $b$  est une valeur propre associée au vecteur  $|\psi_-\rangle$

◆ Nous avons d'après (4) :  $B | \psi_0\rangle = b | \psi_+\rangle$  et  $B | \psi_+\rangle = b | \psi_0\rangle$

On en déduit :  $B [ | \psi_0\rangle + | \psi_+\rangle ] = B [ | \psi_0\rangle + | \psi_+\rangle ]$

Donc  $b$  est une valeur propre associée au vecteur propre  $|\psi_0\rangle + |\psi_+\rangle$ , que si on le norme à l'unité, devient  $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ | \psi_0\rangle + | \psi_+\rangle ]$

◆ Le ket  $|\phi_2\rangle$  associé à la valeur propre  $(-b)$  se déduit facilement du fait que :

$$\langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 1 \quad ; \quad \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \phi_2 | \phi_+ \rangle = 0$$

Soit :  $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ | \psi_0\rangle - | \psi_+\rangle ]$

On peut vérifier aisément que :  $B | \phi_2\rangle = -b | \phi_2\rangle$ .

En résumé, nous avons :  $B | \psi_-\rangle = -b | \psi_-\rangle$  ;  $B | \phi_1\rangle = b | \phi_1\rangle$  ;  $B | \phi_2\rangle = -b | \phi_2\rangle$

Avec  $|\phi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ | \psi_0\rangle \pm | \psi_+\rangle ]$

a) L'état du système à l'instant  $t = 0$  est :  $|\mathcal{E}'(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} | \psi_-\rangle + \frac{1}{2} | \psi_0\rangle + \frac{1}{2} | \psi_+\rangle$

qu'on peut écrire en fonction des vecteurs propres associés à  $B$  :

$$|\mathcal{E}'(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ | \psi_-\rangle + | \phi_1\rangle ]$$

Si on mesure l'observable  $B$ , la seule valeur possible qu'on peut trouver est  $b$  (valeur propre dégénérée deux fois associée à  $|\psi_-\rangle$  et  $|\phi_1\rangle$ ) avec la probabilité  $\mathcal{P}$  :

$$\mathcal{P} = | \langle \psi_-\rangle | \mathcal{E}'(0)\rangle |^2 + | \langle \phi_1 | \mathcal{E}'(0)\rangle |^2 = 1$$

Ce résultat est évident car la mesure de  $B$  ne peut donner que la valeur  $b$  à coup sûr, donc avec une probabilité égale à 1.

b) L'état du système  $|\mathcal{E}'(t)\rangle$  à un instant  $t > 0$  est obtenu en utilisant la formule générale :

$$|\mathcal{E}'(t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} | \psi_n\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(E_0 - \lambda) t/\hbar} | \psi_-\rangle + \frac{1}{2} e^{-iE_0 t/\hbar} | \psi_0\rangle + \frac{1}{2} e^{-i(E_0 + \lambda) t/\hbar} | \psi_+\rangle$$

$$\boxed{|\mathcal{E}'(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0 t/\hbar} \left[ e^{+i\lambda t/\hbar} | \psi_-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | \psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\lambda t/\hbar} | \psi_+\rangle \right]}$$

$|\mathcal{E}'(t)\rangle$  et  $|\mathcal{E}'(0)\rangle$  diffèrent l'un de l'autre par des termes  $e^{\pm i\lambda t/\hbar}$  affectés aux coefficients de  $|\psi_-\rangle$  et  $|\psi_+\rangle$ . Le système a donc évolué.

c) Si l'on remesure à l'instant  $t$  l'observable  $B$ , on trouve  $b$  ou  $-b$  avec les probabilités  $\mathcal{P}(b)$  et  $\mathcal{P}(-b)$  telle que :  $\mathcal{P}(b) = |\langle \psi_- | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2 + |\langle \phi_1 | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2$

$$\text{D'une part : } |\langle \psi_- | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{D'autre part : } |\langle \phi_1 | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \langle \psi_0 | \mathcal{E}'(t) \rangle + \langle \psi_+ | \mathcal{E}'(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} (1 + e^{-i\lambda t/\hbar}) \right|^2$$

$$= \frac{1}{8} \left[ \left(1 + \cos \frac{\lambda t}{\hbar}\right)^2 + \sin^2 \frac{\lambda t}{\hbar} \right] = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\lambda t}{2\hbar}$$

Soit alors :

$$\mathcal{P}(b) = \frac{1}{2} \left( 1 + \cos^2 \frac{\lambda t}{2\hbar} \right)$$

$$\mathcal{P}(-b) = |\langle \phi_2 | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\langle \psi_0 | \mathcal{E}'(t) \rangle - \langle \psi_+ | \mathcal{E}'(t) \rangle|^2$$

$$= \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} (1 + e^{-i\lambda t/\hbar}) \right|^2$$

$$= \frac{1}{8} \left[ \left(1 - \cos \frac{\lambda t}{\hbar}\right)^2 + \sin^2 \frac{\lambda t}{\hbar} \right] = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\lambda t}{2\hbar}$$

Soit donc

$$\mathcal{P}(-b) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\lambda t}{2\hbar}$$

On vérifie aisément que la probabilité pour que la mesure de  $B$  donne indifféremment  $b$  ou  $-b$  est égale à 1 :

$$\mathcal{P}(b) + \mathcal{P}(-b) = 1$$

$$\text{Si } t = 0 : \quad \cos^2 \frac{\lambda t}{2\hbar} = 1 \quad \text{et} \quad \sin^2 \frac{\lambda t}{2\hbar} = 0$$

Il vient donc  $\mathcal{P}(b)_{t=0} = 1$  et  $\mathcal{P}(-b)_{t=0} = 0$  résultats que nous avons trouvés à la question 5°a).

### 23 - Mise en évidence de la fréquence de Bohr - Observable dépendant du temps.

On considère un système quantique conservatif à trois niveaux ayant pour hamiltonien  $H_0$ . Soient  $|u_1\rangle$ ,  $|u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$  les états propres normés de  $H_0$  d'énergie respective  $E_1$ ,  $E_2$  et  $E_3$ . On suppose  $E_1 < E_2 < E_3$ .

1°) L'état du système à l'instant  $t = 0$  est donné par

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

a) On mesure à cet instant l'énergie du système. Quelles est la probabilité de trouver la valeur  $E_3$  ? Dans quels états peut-on trouver le système lors de cette mesure et avec quelles probabilités ?

b) Calculer la valeur moyenne  $\langle H_0 \rangle_{t=0}$  dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ .

c) Déterminer, à partir de  $|\psi(0)\rangle$ , l'état  $|\psi(t)\rangle$  du système à l'instant  $t$ . L'état  $|\psi(0)\rangle$  est-il stationnaire ?

d) Pouvez-vous prévoir sans calcul la valeur moyenne  $\langle H_0 \rangle_t$  à l'instant  $t$  ?

2°) On considère l'observable  $D$  attachée à ce système et représentée dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  par la matrice dont les seuls éléments non nuls sont :

$$\langle u_1 | D | u_2 \rangle = \langle u_2 | D | u_1 \rangle = d$$

a) Cette observable est-elle une constante du mouvement ?

b) Calculer à l'aide de l'état  $|\psi(t)\rangle$  déterminé à la première question la valeur moyenne de  $D$  à l'instant  $t$ . Donner le résultat en fonction de

$$\omega_{12} = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$$

En déduire la fréquence susceptible d'être émise ou absorbée par le système (fréquence de Bohr).

3°) On suppose maintenant que le système est décrit par l'Hamiltonien  $H(t) = H_0 + H_1(t)$  où  $H_1(t)$  est une observable dépendant au temps.

a) Ecrire l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution dans le temps de l'état  $|\psi(t)\rangle$  de ce système.

b) On pose  $|\psi(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |\varphi(t)\rangle$  ; quelle est l'équation d'évolution dans le temps de l'état  $|\varphi(t)\rangle$  ?

c) L'observable  $H_1(t)$  est représentée dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  par une matrice dont les seuls éléments non nuls sont :

$$\langle u_3 | H_1(t) | u_2 \rangle = \langle u_2 | H_1(t) | u_3 \rangle = \omega_1 \sin t \quad \text{où } \omega_1 \text{ est une constante réelle.}$$

Par ailleurs, la décomposition de  $|\varphi(t)\rangle$  sur la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  s'écrit :  $|\varphi(t)\rangle = \alpha_1(t) |u_1\rangle + \alpha_2(t) |u_2\rangle + \alpha_3(t) |u_3\rangle$ .

Déterminer à l'aide de l'équation trouvée au 3°) b), le système d'équations différentielles satisfaites par  $\alpha_1(t)$ ,  $\alpha_2(t)$  et  $\alpha_3(t)$ .

$$\text{On posera } \frac{(E_3 - E_2)}{\hbar} = \omega_{32}$$

On rappelle que si  $A |u\rangle = a |u\rangle$ , alors :  $e^A |u\rangle = e^a |u\rangle$

4°) On suppose que  $\alpha_1(0) = \alpha_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$  ;  $\alpha_3(0) = 0$  et on propose d'intégrer le système d'équations précédent. Pour cela, on admettra que l'on peut négliger dans ces équations les termes en :

$$e^{\pm i(\omega + \omega_{32})} \text{ où } \omega_{32} = (E_3 - E_2) / \hbar \text{ et que } \omega = \omega_{32}$$

Montrer alors que :

$$\alpha_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \alpha_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_{11} t}{2\hbar}, \text{ et } \alpha_3(t) = \frac{-1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_{11} t}{2\hbar}$$

En déduire  $|\psi(t)\rangle$  ; cet état est-il normé ?

Extrait, Agadir, PC 2, Mai 1986.

1°) La matrice représentant  $H_0$  est diagonale, elle s'écrit dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  par :

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & E_2 & \\ & & E_3 \end{pmatrix}$$

Supposons qu'à l'instant  $t = 0$ , le système soit dans l'état :

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

a)  $|u_3\rangle$  est le vecteur propre de  $H_0$  correspondant à la valeur propre  $E_3$  (non dégénéré). La probabilité de trouver  $E_3$  lorsqu'on mesure  $H_0$  sur le système dans l'état  $|\psi(0)\rangle$  vaut :

$$\mathcal{P}(E_3) = |\langle u_3 | \psi(0) \rangle|^2 = 0$$

Le système peut se trouver à  $t = 0$  dans l'état  $|u_1\rangle$  ou  $|u_2\rangle$ . Les probabilités correspondantes sont :

$$\mathcal{P}(E_1) = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2} ; \quad \mathcal{P}(E_2) = |\langle u_2 | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

b) La valeur moyenne  $\langle H_0 \rangle_0$  dans l'état  $|\psi(0)\rangle$  s'écrit :  $\langle H_0 \rangle_0 = \langle \psi(0) | H_0 | \psi(0) \rangle$

soit

$$\langle H_0 \rangle_0 = E_1 + E_2$$

c) Le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  est obtenu en utilisant la formule générale :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t / \hbar} |u_n\rangle$$

soit :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-iE_1 t / \hbar} |u_1\rangle + e^{-iE_2 t / \hbar} |u_2\rangle \right]$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t / \hbar} \left[ |u_1\rangle + e^{-i(E_2 - E_1) t / \hbar} |u_2\rangle \right]$$

ou encore, en supprimant un facteur de phase global  $e^{-iE_1 t / \hbar}$  de  $|\psi(t)\rangle$  :

$$|\psi(t)\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |u_1\rangle + e^{-i\omega_{21} t} |u_2\rangle \right] \quad (*)$$

$$\text{avec } \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

L'état  $|\psi(t)\rangle$  introduit un terme  $e^{-i\omega_{21} t}$  comme coefficient du ket  $|u_2\rangle$  (différent de celui affecté à  $|u_1\rangle$ ). L'état du système a donc évolué.

d) Appliquons le théorème d'Ehrenfest à l'observable  $H_0$  :

$$\frac{d}{dt} \langle H_0 \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [H_0, H_0] \rangle + \left\langle \frac{\partial H_0}{\partial t} \right\rangle$$

$$H_0 \text{ ne dépend pas du temps, donc } \frac{\partial H_0}{\partial t} = 0. \text{ Donc : } \frac{d}{dt} \langle H_0 \rangle = 0$$

On en déduit  $\langle H_0 \rangle_t$  est une constante. Soit :  $\langle H_0 \rangle_t = \langle H_0 \rangle_0 = (E_1 + E_2)$

2°) La matrice représentatrice de l'observable  $D$  s'écrit dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

a) Nous pouvons vérifier aisément que  $D$  ne commute pas avec  $H_0$ , donc  $D$  n'est pas une constante du mouvement.

b) La valeur moyenne de  $D$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  (équation (\*)) s'obtient par :

$$\langle D \rangle_t = \langle \psi(t) | D | \psi(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \langle u_1 | + e^{i\omega_{21} t} \langle u_2 | \right] D \left[ |u_1\rangle + e^{-i\omega_{21} t} |u_2\rangle \right]$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \langle u_1 | D | u_1 \rangle + \langle u_2 | D | u_2 \rangle + \langle u_1 | D | u_2 \rangle e^{-i\omega_{21} t} + \langle u_2 | D | u_1 \rangle e^{i\omega_{21} t} \right]$$

$$= \frac{1}{2} \left[ 0 + 0 + d(e^{-i\omega_{21} t} + e^{i\omega_{21} t}) \right]$$

soit :

$$\langle D \rangle_t = d \cos(\omega_{21} t) \quad \text{avec } \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

On en déduit la valeur de la fréquence de Bohr :

$$\nu_{21} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

3°) On suppose maintenant que le système est décrit par l'Hamiltonien  $H(t) = H_0 + H_1(t)$

a) L'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  en présence de  $H_1(t)$  est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H_0 + H_1(t)) |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

b) Soit :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle \quad (2)$$

$$\text{Calculons : } i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left[ e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle \right]$$

$$= i\hbar \left[ \left( \frac{-iH_0}{\hbar} \right) e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle + e^{-iH_0 t / \hbar} \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle \right]$$

$$= H_0 e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle + i\hbar e^{-iH_0 t / \hbar} \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle$$

$$\text{Calculons : } [H_0 + H_1(t)] |\psi(t)\rangle = H_0 e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle + H_1(t) e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle$$

On en déduit d'après (1) :

$$i\hbar e^{-iH_0 t / \hbar} \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = H_1(t) e^{-iH_0 t / \hbar} |\varphi(t)\rangle \quad (3)$$

c)  $H_1(t)$  est représenté dans la base  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$  par la matrice :

$$H_1(t) = \begin{pmatrix} 0 & \omega_1 \sin \omega t & 0 \\ 0 & 0 & \omega_1 \sin \omega t \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Par ailleurs la décomposition de  $|\varphi(t)\rangle$  sur la même base s'écrit :

$$|\varphi(t)\rangle = \alpha_1(t) |u_1\rangle + \alpha_2(t) |u_2\rangle + \alpha_3(t) |u_3\rangle \quad (5)$$

En utilisant (3), (4), et (5), nous pouvons écrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$i\hbar e^{-iH_0 t / \hbar} \left[ \frac{d}{dt} \alpha_1(t) |u_1\rangle + \frac{d}{dt} \alpha_2(t) |u_2\rangle + \frac{d}{dt} \alpha_3(t) |u_3\rangle \right]$$

$$= H_1(t) e^{-iH_0 t / \hbar} (\alpha_1(t) |u_1\rangle + \alpha_2(t) |u_2\rangle + \alpha_3(t) |u_3\rangle) \quad (6)$$

Projetons l'équation (6) sur les vecteurs d'états  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ , nous obtenons :

$$\begin{cases} i\hbar e^{-iE_1 t / \hbar} \frac{d\alpha_1(t)}{dt} = 0 & (7) \\ i\hbar e^{-iE_2 t / \hbar} \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = \alpha_3(t) e^{-iE_3 t / \hbar} \omega_1 \sin \omega t & (8) \\ i\hbar e^{-iE_3 t / \hbar} \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = \alpha_2(t) e^{-iE_2 t / \hbar} \omega_1 \sin \omega t & (9) \end{cases}$$

$$4^\circ) \diamond \text{ L'équation (7) permet de trouver : } \alpha_1(t) = \text{cte} = \alpha_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (9)$$

$\diamond$  Les équations (8) et (9) peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = \alpha_3(t) \omega_1 \sin \omega t e^{-i(E_3 - E_2) t / \hbar} \\ i\hbar \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = \alpha_2(t) \omega_1 \sin \omega t e^{i(E_3 - E_2) t / \hbar} \end{cases}$$

$$\text{Soit avec } \omega_{32} = \frac{E_3 - E_2}{\hbar} = \omega$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = \alpha_3(t) \omega_1 \sin \omega t e^{-i\omega_{32} t} \\ i\hbar \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = \alpha_2(t) \omega_1 \sin \omega t e^{+i\omega_{32} t} \end{cases}$$

$$\text{Or } \sin \omega t = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}; \text{ ces équations deviennent :}$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = \frac{\alpha_3(t) \omega_1}{2i} [e^{i(\omega - \omega_{32})t} - e^{-i(\omega + \omega_{32})t}] \\ i\hbar \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = \frac{\alpha_2(t) \omega_1}{2i} [e^{i(\omega + \omega_{32})t} - e^{-i(\omega - \omega_{32})t}] \end{cases}$$

On admettra que l'on peut négliger dans ces équations les termes en  $e^{\pm i(\omega + \omega_{32})t}$  et que  $\omega = \omega_{32}$ . Soit :

$$\begin{cases} \frac{d\alpha_2(t)}{dt} = -\frac{\alpha_3(t)}{2\hbar} \omega_1 & (10) \\ \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = +\frac{\alpha_2(t)}{2\hbar} \omega_1 & (11) \end{cases}$$

$$\text{Dérivons (10) par rapport au temps : } \frac{d^2 \alpha_2(t)}{dt^2} = -\frac{\omega_1}{2\hbar} \frac{d\alpha_3(t)}{dt} = -\frac{\omega_1^2}{4\hbar^2} \alpha_2(t)$$

$$\text{ou encore : } \frac{d^2 \alpha_2(t)}{dt^2} + \frac{\omega_1^2}{4\hbar^2} \alpha_2(t) = 0$$

La solution d'une telle équation est :  $\alpha_2(t) = A \sin \frac{\omega_1 t}{2\hbar} + B \cos \frac{\omega_1 t}{2\hbar}$  (12)

or à  $t=0$   $\alpha_2(0) = B = \frac{1}{\sqrt{2}}$

Dérivons (12) par rapport à  $t$  et utilisons l'équation (10) :

$$\frac{d\alpha_2(t)}{dt} = \frac{\omega_1}{2\hbar} \left[ A \cos \frac{\omega_1 t}{2\hbar} - B \sin \frac{\omega_1 t}{2\hbar} \right] = -\alpha_3(t) \frac{\omega_1}{2\hbar}$$

On en déduit :  $\alpha_3(t) = A \cos \frac{\omega_1 t}{2\hbar} - B \sin \frac{\omega_1 t}{2\hbar}$  (13)

Or à  $t=0$   $\alpha_3(0) = 0 = A$

Les expressions (9), (12) et (13) deviennent alors en tenant compte des valeurs de  $A$  et  $B$  :

$$\alpha_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} ; \quad \alpha_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_1 t}{2\hbar} ; \quad \alpha_3(t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_1 t}{2\hbar}$$

On en déduit l'état  $|\psi(t)\rangle$  :

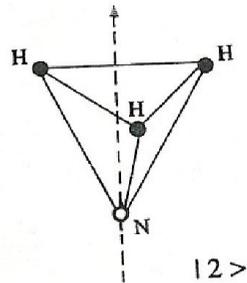
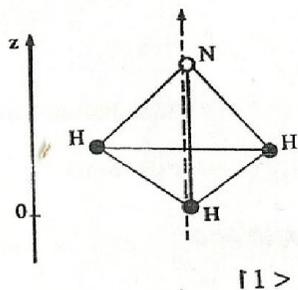
$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_1 t}{2\hbar} |u_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_1 t}{2\hbar} |u_3\rangle$$

Il est facile de montrer que  $|\psi(t)\rangle$  est normé :

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left( \cos^2 \frac{\omega_1 t}{2\hbar} + \sin^2 \frac{\omega_1 t}{2\hbar} \right) = 1$$

## 24 - Etude de la molécule d'ammoniac $\text{NH}_3$ (système à deux niveaux) - Influence d'un champ électrique.

La molécule d'ammoniac  $\text{NH}_3$  à la forme d'une pyramide à base triangulaire :



l'atome d'azote se trouve dans l'une des deux positions symétriques par

rapport au plan des atomes d'hydrogène, la molécule  $\text{NH}_3$  possède un moment dipolaire électrique permanent pouvant prendre les valeurs :

$$\delta_z = \pm d$$

1°) Nous supposons que les états de base nécessaires pour la description de la molécule  $\text{NH}_3$  sont :

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

et que dans cette base son hamiltonien est :

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & -w \\ -w & E_0 \end{pmatrix} \quad E_0, w \text{ constante} \in \mathbb{R}^+$$

Déterminer l'énergie des états stationnaires de  $\text{NH}_3$  et exprimer ceux-ci dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ .

2°) Expliquer pourquoi dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ , l'observable  $D_z$  associée à la mesure du moment dipolaire  $\delta_z$  de la molécule est :

$$D_z = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix}$$

3°) On suppose maintenant que la molécule est placée dans un champ électrique statique  $\vec{\varepsilon}(z)$  parallèle à  $oz$ . On rappelle que classiquement l'énergie d'interaction d'un dipole électrique  $\vec{\delta}$  dans un champ électrique  $\vec{\varepsilon}$  est :

$$u = -\vec{\delta} \cdot \vec{\varepsilon}$$

Construire dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  l'hamiltonien de la molécule  $\text{NH}_3$

dans le champ  $\vec{\varepsilon}$  en supposant que celui-ci est la somme du hamiltonien  $H_0$  et d'un terme d'interaction obtenu en remplaçant le moment dipolaire par l'observable convenable dans l'expression classique de l'énergie

4°) Déterminer l'énergie des nouveaux états stationnaires de la molécule dans le champ  $\vec{\varepsilon}$ .

5°) On suppose maintenant que le champ  $\vec{\varepsilon}(z)$  est faible ( $ed \ll w$ ) mais  $\mathcal{E}^2$  présente un gradient dans la direction  $z$ .

Montrer que des molécules  $\text{NH}_3$  dans des états stationnaires différents sont soumises à des forces opposées que l'on déterminera.

Tétouan, PC2, Juin 1984.

1°) Si l'on veut trouver les valeurs propres des états stationnaires de  $\text{NH}_3$ , il faut alors

diagonaliser l'opérateur hamiltonien total  $H_0$ , dont la matrice s'écrit :  $H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & -w \\ -w & E_0 \end{pmatrix}$

Un calcul élémentaire donne les valeurs propres de  $H_0$  :  $\det |H_0 - \lambda I| = 0$

$$\text{soit } (E_0 - \lambda)^2 - w^2 = 0$$

$E_0 - w$  correspond au ket propre  $|\varphi_1\rangle$  ;  $E_0 + w$  correspond au ket propre  $|\varphi_2\rangle$

$$\text{avec } |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1\rangle - |2\rangle ] \quad \text{et} \quad |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1\rangle + |2\rangle ]$$

2°) Sous l'effet du couplage la molécule d'ammoniac s'inverse de manière périodique. Donc, le moment dipolaire électrique de la molécule dans les états  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ , prend deux valeurs opposées notées  $+d$  et  $-d$ . L'observable  $D_z$  associée à la mesure du moment dipolaire  $\delta_z$  de la molécule est représentée dans la base  $\{ |1\rangle, |2\rangle \}$  par une matrice diagonale dont les valeurs propres sont  $+d$  et  $-d$  :

$$D_z = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix}$$

3°) Lorsque la molécule de  $NH_3$  est placée dans un champ électrique statique  $\vec{\varepsilon}$  parallèle à  $Oz$ , l'énergie d'interaction avec ce champ s'écrit :  $U = -\varepsilon D$

Ce terme de l'hamiltonien est représenté dans la base  $\{ |1\rangle, |2\rangle \}$  par la matrice :

$$U(\varepsilon) = -d\varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Ecrivons donc la matrice représentative, dans la base  $\{ |1\rangle, |2\rangle \}$ , l'opérateur hamiltonien total de la molécule  $H_0 + U(\varepsilon)$  :

$$H = H_0 + U(\varepsilon) = \begin{pmatrix} E_0 - d\varepsilon & -w \\ w & E_0 + d\varepsilon \end{pmatrix}$$

4°) Cette matrice peut être facilement diagonalisée ; ses énergies propres  $E_+$  et  $E_-$  et ses vecteurs propres  $|\psi_+\rangle$  et  $|\psi_-\rangle$  sont donnés par :  $\det(H - \lambda I) = 0$

$$(E_0 - d\varepsilon - \lambda)(E_0 + d\varepsilon - \lambda) - w^2 = 0$$

$$(E_0 - \lambda)^2 - (d^2\varepsilon^2 + w^2) = 0$$

soit :

$$E_+ = E_0 + \sqrt{w^2 + d^2\varepsilon^2}$$

$$E_- = E_0 - \sqrt{w^2 + d^2\varepsilon^2}$$

Le ket normé le plus général est de la forme :  $|\psi\rangle = \alpha |1\rangle + \beta |2\rangle$

$$\text{avec } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1)$$

Compte tenu de (1), il existe forcément un angle  $\theta$  tel que :  $|\alpha| = \cos \frac{\theta}{2}$ ,  $|\beta| = \sin \frac{\theta}{2}$

Donc les états  $|\psi_+\rangle$  et  $|\psi_-\rangle$  sont donnés par :

$$|\psi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |2\rangle \quad ; \quad |\psi_-\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |2\rangle$$

où l'on a posé :  $\text{tg } \theta = \frac{-w}{d\varepsilon} \quad 0 \leq \theta \leq \pi$

5°) En champ faible ( $\varepsilon d \ll w$ ), on peut développer  $E_+$  et  $E_-$  en puissances de  $\left(\frac{\varepsilon d}{w}\right)$  :

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= E_0 \pm w \sqrt{1 + \left(\frac{d\varepsilon}{w}\right)^2} \\ &= E_0 \pm w \left( 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{d\varepsilon}{w}\right)^2 + \dots \right) \end{aligned}$$

soit

$$E_- = E_0 - w - \frac{1}{2} \frac{d^2\varepsilon^2}{w} + \dots \quad (2)$$

$$E_+ = E_0 + w + \frac{1}{2} \frac{d^2\varepsilon^2}{w} + \dots$$

Supposons que les molécules d'ammoniac qui se déplacent dans une région où  $\vec{\varepsilon}(t)$  est faible, mais présente un fort gradient dans la direction  $Oz$  de l'axe des molécules :

$$\frac{d}{dz}(\varepsilon^2) = \lambda$$

D'après (2), les molécules qui sont dans l'état  $|\psi_-\rangle$  sont soumises à une force parallèle à  $Oz$

qui vaut :

$$F_- = - \left( \frac{dE_-}{dz} \right) = - \left( \frac{-1}{2} \frac{d^2}{w} \frac{d(\varepsilon^2)}{dz} \right)$$

$$F_- = \frac{1}{2} \frac{d^2\lambda}{w}$$

D'après (3) et par un raisonnement analogue :  $F_+ = - \left( \frac{dE_+}{dz} \right)$

$$F_+ = \frac{-1}{2} \frac{d^2\lambda}{w} = -F_-$$

Cette égalité montre que les molécules de  $NH_3$  qui sont dans l'état  $|\psi_+\rangle$  sont soumises à une force opposée.

Remarque : Ce résultat est à la base de la méthode qui sert, dans le MASER à ammoniac à lier les molécules et sélectionner celles qui sont dans l'état d'énergie la plus grande. En effet, on utilise un dispositif où règne un fort gradient de champs électrique ; les

molécules traversent cette région et suivent selon le cas de leur état  $|\psi_-\rangle$  ou  $|\psi_+\rangle$  des trajectoires différentes. Par un diaphragme convenable, on peut isoler l'un quelconque des deux états.

• **25 - Oscillateur harmonique chargé placé dans un champ électrique uniforme - Equation aux valeurs propres de  $H$  en représentation  $\{|x\rangle\}$**

On considère un oscillateur harmonique à une dimension constitué par une microparticule de masse  $m$ , soumise à une force de rappel  $F = -kx$  ( $k > 0$ ).

1°) Ecrire l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien de cet oscillateur dans la représentation  $\{|x\rangle\}$ , puis dans la représentation  $\{|p\rangle\}$ .

2°) Soit  $\varphi_n(x)$  les fonctions propres relatives aux états stationnaires de cette microparticule. Rappeler l'expression de la valeur  $E_n$  des niveaux d'énergie correspondante.

3°) On suppose maintenant que cette microparticule porte une charge  $q$  et est soumise, en plus de la force  $F = -kx$ , à un champ électrique uniforme  $\vec{\epsilon}$  parallèle à l'axe  $Ox$ . Ecrire l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien de ce nouveau système dans la représentation  $\{|x\rangle\}$ .

4°) Déterminer les états stationnaires et les niveaux d'énergie de ce système respectivement en fonction de  $\varphi_n(x)$  et de  $E_n$ . Quelle remarque peut-on faire sur l'ensemble de ces niveaux d'énergie.

Extrait, Casablanca I, MP2, Juin 1986.

1°) Pour une particule plongée dans un potentiel scalaire  $V(X)$ , l'opérateur hamiltonien  $H$  s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + V(X)$$

◆ Nous cherchons à écrire cette équation en représentation  $\{|x\rangle\}$ , c'est-à-dire en faisant intervenir la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  définie par :  $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$

L'équation de Schrödinger :  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$  (1)

En projetant cette équation sur  $|x\rangle$ , nous obtenons :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2m} \langle x | P^2 | \psi(t) \rangle + \langle x | V(X) | \psi(t) \rangle$$

Les équations qui interviennent dans cette relation peuvent être exprimées en fonction de

$\psi(x, t)$ ; en effet, nous avons :  $\frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$

$$\langle x | V(X) | \psi(t) \rangle = V(x) \psi(x, t)$$

L'élément de matrice  $\langle x | P^2 | \psi(t) \rangle$  peut être calculé en utilisant le fait qu'en

représentation  $\{|x\rangle\}$ ,  $P$  agit comme  $\frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$\langle x | P^2 | \psi(t) \rangle = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = -\hbar^2 \Delta \psi(x, t)$$

L'équation aux valeurs propres devient alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(X) \right] \psi(x, t)$$

◆ En représentation  $\{|p\rangle\}$ , la fonction d'onde est représentée par :  $\bar{\psi}(p, t) = \langle p | \psi(t) \rangle$

En projetant (1) sur le ket  $|p\rangle$ , nous obtenons :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle p | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2m} \langle p | P^2 | \psi(t) \rangle + \langle p | V(X) | \psi(t) \rangle$$

Or  $\frac{\partial}{\partial t} \langle p | \psi(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(p, t)$  et  $\langle p | P^2 | \psi(t) \rangle = p^2 \bar{\psi}(p, t)$

Calculons la quantité :  $\langle p | V(X) | \psi(t) \rangle = \int dp' \langle p | V(X) | p' \rangle \langle p' | \psi(t) \rangle$

Or  $\langle p | V(X) | p' \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \bar{V}(p-p')$

avec  $\bar{V}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dx e^{-ipx/\hbar} V(x)$

Il vient alors :  $\langle p | V(X) | \psi(t) \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dp' \bar{V}(p-p') \bar{\psi}(p', t)$

L'équation de Schrödinger en représentation  $\{|p\rangle\}$  s'écrit donc :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m} \bar{\psi}(p, t) + (2\pi\hbar)^{-1/2} \int dp' \bar{V}(p-p') \bar{\psi}(p', t)$$

où  $\bar{\psi}(p, t)$  et  $\bar{V}(p)$  sont les transformées de Fourier respectives de  $\psi(x, t)$  et  $V(x)$ .

2°) En représentation  $\{|x\rangle\}$ , l'équation (2) aux valeurs propres s'écrit :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad (3)$$

La résolution de cette équation nous donne les valeurs d'énergie acceptables que nous rappelons :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{où } n \text{ est un nombre entier positif.}$$

3°) Supposons de plus que cette particule porte une charge  $q$  et qu'elle est plongée dans un champ électrique uniforme  $\vec{\varepsilon}$  parallèle à l'axe  $Ox$ . L'énergie potentielle classique d'une particule placée dans un champ uniforme vaut :  $W = -q \varepsilon x$ .

Pour obtenir en mécanique quantique l'opérateur  $H'(\varepsilon)$  en présence du champ  $\varepsilon$ , il faut donc ajouter à l'énergie potentielle  $\frac{1}{2} m^2 \omega^2 X^2$  de l'oscillateur harmonique le terme  $W(\varepsilon) = -q \varepsilon X$

Ce qui donne :

$$H' = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - q \varepsilon X \quad (4)$$

Soit  $|\varphi'\rangle$  un vecteur propre de  $H'$  :  $H'|\varphi'\rangle = E'|\varphi'\rangle$

En utilisant (4), on peut écrire cette équation en représentation  $\{|x\rangle\}$  :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - q \varepsilon x\right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (5)$$

Dans le premier membre de (5), groupons dans un carré les termes en  $x^2$  et en  $x$  :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (6)$$

Remplaçons la variable  $x$  par une nouvelle variable  $u$ , telle que :  $u = x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}$

$\varphi'$  est alors une fonction de  $u$  et l'équation (6) devient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2\right] \varphi'(u) = \left(E' + \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\right) \varphi'(u) = E'' \varphi'(u) \quad (7)$$

L'équation (7) est la même que celle qui permet d'obtenir les états stationnaires de l'oscillateur harmonique en l'absence du champ électrique (3). Nous savons que les valeurs acceptables de  $E''$  sont données par :  $E''_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$  (8)

où  $n$  est un nombre entier positif ou nul.

On déduit d'après (7) et (8), les énergies  $E'$  des états stationnaires de l'oscillateur

harmonique :

$$E''_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = E'_n + \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

soit :

$$E'_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \quad (9)$$

Remarque : i) Le spectre de l'oscillateur harmonique est donc décalé "en bloc" de la quantité  $\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$ .

◆ Les fonctions propres  $\varphi'_n(x)$  associées aux valeurs propres (7) s'obtiennent toutes à partir des  $\varphi_n(x)$ , par une même translation.

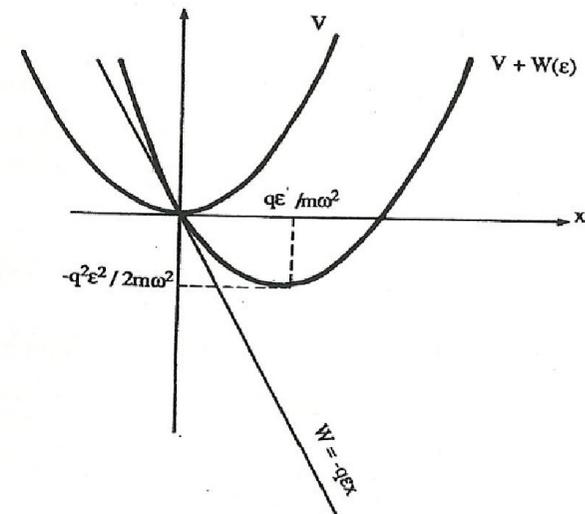
En effet, la solution de (7) correspondant à une valeur donnée de  $n$  est  $\varphi'_n(u)$  :

$$\varphi'_n(u) = \varphi_n\left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)$$

ii) La translation provient du fait que le champ électrique exerce une force sur la particule.

Complément : Représenter  $V$ ,  $W(\varepsilon)$  et  $V+W(\varepsilon)$

La présence du champ électrique uniforme  $\varepsilon$  a pour effet de déplacer la parabole représentant  $V$  de l'oscillateur harmonique.



## 26 - Propriétés des états $|\alpha\rangle$ (états propres de l'opérateur d'annihilation $a$ ) - Valeurs possibles de l'énergie.

Soit  $H$  l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension de masse  $m$  et de pulsation  $\omega$ . Soient  $|\varphi_n\rangle$  et  $E_n$  les états propres et valeurs propres de  $H$  :  $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

Considérons l'opérateur d'annihilation  $a$  dont les états propres  $|\alpha\rangle$  et les valeurs propres  $\alpha$ , sont définis par :  $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  avec  $|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha)|\varphi_n\rangle$  où  $C_0(\alpha)$  est réel positif et  $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$

1°) L'opérateur  $a$  est-il une observable ?

2°) Montrer que  $C_{n+1}(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} C_n(\alpha)$ .

En déduire  $C_n(\alpha)$  en fonction de  $C_0(\alpha)$ , et calculer  $C_n(\alpha)$  en fonction de  $n$  et  $\alpha$  (utiliser le fait que  $\sum_n \frac{x^n}{n!} = e^x$ ).

3°) A l'instant  $t = 0$ , le système est dans l'état  $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ . On mesure l'énergie à cet instant. Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Exprimer ces probabilités en fonction de  $n$  et  $\alpha$ .

4°) Calculer la valeur moyenne de  $H$  dans l'état  $|\alpha\rangle$ .

5°) Calculer l'état du système à l'instant  $t$ , ainsi que  $\langle H \rangle(t)$ .

Extrait, Casablanca I, MP2, Janvier 1987.

1°) Rappelons tout d'abord quelques définitions.

On définit les observables  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$  sans dimension par :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad \text{et} \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P$$

La relation de commutation s'écrit :  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$

L'hamiltonien s'écrit alors :  $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$

Nous posons :  $a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P})$  et  $a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P})$

$\hat{X}$  et  $\hat{P}$  sont hermitiques,  $a$  et  $a^*$  ne le sont pas à cause du facteur  $i$  mais sont adjoints l'un de l'autre. Donc  $a$  n'est pas une observable.

2°) ♦ On a  $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  (1)

Or  $a|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha) a|\varphi_n\rangle = \sum_n C_n(\alpha) \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$

En reportant cette égalité dans (1), et avec  $|\alpha\rangle = \sum_n C_{n-1}(\alpha) |\varphi_{n-1}\rangle$ , obtenons :

$$\sum_n C_n(\alpha) \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle = \alpha |\alpha\rangle = \alpha \sum_n C_{n-1}(\alpha) |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\text{soit } C_{n-1}(\alpha) = \frac{C_n(\alpha)\sqrt{n}}{\alpha} \quad \text{ou encore} \quad \boxed{\frac{\alpha C_n(\alpha)}{\sqrt{n+1}} = C_{n+1}(\alpha)}$$

♦ Cette relation nous permet d'obtenir par récurrence tous les coefficients  $C_n(\alpha)$  en fonction de  $C_0(\alpha)$  :

$$C_1(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{1}} C_0(\alpha)$$

$$C_2(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} C_1(\alpha)$$

$$\vdots$$

$$C_n(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} C_{n-1}(\alpha)$$

$$\text{soit} \quad C_n(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \frac{\alpha}{\sqrt{n-1}} \frac{\alpha}{\sqrt{n-2}} \dots \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\sqrt{1}} C_0(\alpha)$$

$$\boxed{C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0(\alpha)} \quad (2)$$

♦ Ecrivons la condition de normalisation du ket  $|\alpha\rangle$  :  $\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n |C_n(\alpha)|^2 = 1$  remplaçons  $C_n(\alpha)$  par sa valeur obtenue en (2) :

$$\sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} |C_0(\alpha)|^2 = |C_0(\alpha)|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1$$

Utilisons le fait que  $\sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = e^x$  :  $|C_0(\alpha)|^2 e^{|\alpha|^2} = 1$

avec la convention prise où  $C_0(\alpha)$  est réel positif :  $C_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}$

L'expression (2) devient alors :  $C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2}$

et finalement :  $|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle$

3°) A l'instant  $t = 0$ , le système se trouve dans l'état

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle \quad (3)$$

On voit que dans  $|\alpha\rangle$  figure  $|\varphi_n\rangle$  qui sont états propres de l'oscillateur harmonique avec valeurs propres  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ .

Donc, une mesure de l'énergie peut donner le résultat  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$  avec la probabilité

$$\mathcal{P}(E_n) = |\langle \varphi_n | \alpha \rangle|^2 = |C_n(\alpha)|^2$$

$$\text{soit } \boxed{\mathcal{P}(E_n) = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2/2}} \quad (4)$$

4°) Pour calculer la valeur moyenne  $\langle H \rangle_\alpha$  de l'énergie, on utilise :

$$\langle H \rangle_\alpha = \langle \alpha | H | \alpha \rangle = \langle \varphi_n | \sum_n C_n^* H \sum_n C_n | \varphi_n \rangle = \sum_n E_n |C_n(\alpha)|^2 = \sum_n E_n \mathcal{P}_n(E_n)$$

$$\text{soit } \langle H \rangle_\alpha = \sum_n \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2/2}$$

$$= \hbar \omega \left( \sum_n n \mathcal{P}_n(E_n) + \frac{1}{2} \sum_n \mathcal{P}_n(E_n) \right)$$

Remarquons que la distribution des probabilités  $\mathcal{P}_n(E_n)$  est une distribution de Poisson.

$$\text{Il vient alors : } \sum_n \mathcal{P}_n = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{n=0}^{\infty} n \mathcal{P}_n = \left(0 + \sum_{n=1}^{\infty} n \mathcal{P}_n\right)$$

$$\text{On pose } |\alpha|^2 = \lambda \quad \text{et} \quad e^{-\lambda/2} = A$$

$$\text{en utilisant l'expression (4), on obtient : } \sum_n n \mathcal{P}_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n |\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2/2}}{n!}$$

$$\sum_n n \mathcal{P}_n = A \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} = A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^{n+1}}{n!} = A \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}$$

$$= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}_n = \lambda = |\alpha|^2$$

$$\text{L'expression (4) devient donc : } \boxed{\langle H \rangle_\alpha = \hbar \omega \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)} \quad (6)$$

Remarque : Ce résultat peut être obtenu autrement en remarquant que :

$$\text{i) } a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \rightarrow \langle \alpha | a^\dagger = \alpha^* \langle \alpha |$$

d'où

$$\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2$$

$$\text{ii) } H = \hbar \omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

ainsi

$$\langle H \rangle_\alpha = \hbar \omega \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

5°) L'état du système à un instant  $t > 0$  est donnée par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(\alpha) e^{-iE_n t / \hbar} |\varphi_n\rangle$$

soit

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} e^{-iE_n t / \hbar} |\varphi_n\rangle$$

en utilisant le fait que  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ , on obtient :

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n e^{-in\omega t}}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle}$$

Si on compare ce résultat à l'état  $|\psi(0)\rangle$  (3), il apparaît que pour passer de  $|\psi(0)\rangle$  à  $|\psi(t)\rangle$ , il suffit de changer  $\alpha$  en  $\alpha e^{-i\omega t}$ , et de multiplier le ket obtenu par  $e^{-i\omega t/2}$  (facteur de phase global sans conséquences physiques). Il vient alors :

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle} \quad (7)$$

On voit donc qu'un état quasi classique reste toujours vecteur propre de  $a$  au cours du temps, avec une valeur propre  $\alpha e^{-i\omega t}$ .

Rappelons que

$$\langle X \rangle_\alpha = \langle \alpha | X | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}(\alpha)$$

$$\langle P \rangle_\alpha = \langle \alpha | P | \alpha \rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}(\alpha)$$

En utilisant (7) et en changeant dans ces dernières expressions  $\alpha$  par  $\alpha e^{-i\omega t}$ , on obtient aisément :

$$\langle X \rangle_t = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}(\alpha e^{-i\omega t})$$

$$\langle P \rangle_t = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}(\alpha e^{-i\omega t})$$

L'énergie moyenne est donc indépendante du temps. En effet :

$$\langle H \rangle_t = \hbar \omega \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

## 27 - Oscillateur harmonique à une dimension - Fonction d'onde associée à l'état fondamental - Mesures de l'énergie.

Les parties A et B sont indépendantes.

A / 1° Soit  $|\varphi_k\rangle$  l'un quelconque des états stationnaires normés de cette particule d'énergie propre  $E_k$ , trouver l'équation différentielle satisfaite par la fonction d'onde  $\varphi_k(x) = \langle x | \varphi_k \rangle$ .

2° Montrer que  $\varphi_0(x) = N \exp\left[-(m\omega/2\hbar)x^2\right]$ ,  $N$  étant une constante de normalisation, est une solution de cette équation ; en déduire la valeur de l'énergie propre correspondante  $E_0$ .

3° Donner une détermination réelle de la constante  $N$ .

4° Calculer les valeurs moyennes de la position  $\langle X \rangle_0$  et de l'impulsion  $\langle P \rangle_0$  de l'oscillateur harmonique dans l'état fondamental décrit par la fonction d'onde  $\varphi_0(x)$ . Calculer de même les valeurs moyennes  $\langle X^2 \rangle_0$  et  $\langle P^2 \rangle_0$ .

5° En déduire les écarts quadratiques moyens de la position  $(\Delta X)_0 = (\langle X^2 \rangle_0 - \langle X \rangle_0^2)^{1/2}$  et de l'impulsion  $(\Delta P)_0 = (\langle P^2 \rangle_0 - \langle P \rangle_0^2)^{1/2}$  dans l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Les interpréter physiquement. Le principe d'incertitude de Heisenberg est-il satisfait par l'oscillateur harmonique dans l'état fondamental ?

On donne les intégrales d'Euler :

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = (\pi/\beta)^{1/2} \quad \text{et} \quad I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = (1/2 \beta) I_0,$$

où  $\beta$  est une constante réelle positive.

B/ Dans le cas général, on montre que les énergies propres de l'oscillateur harmonique unidimensionnel correspondantes aux états stationnaires

orthonormés  $|\varphi_k\rangle$  sont données par  $E_k = (k + 1/2)\hbar\omega$ ,  $k \in \mathbb{N}$

1° Ces niveaux d'énergie sont-ils dégénérés ? Pourquoi ?

2° A l'instant  $t_0$ , l'oscillateur considéré est dans l'état

$$|\psi(t_0)\rangle = (i/\sqrt{2}) |\varphi_0\rangle + (1/2) [|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle]$$

Lors d'une mesure de l'énergie de cette particule à l'instant  $t_0$ , est-il possible de trouver la valeur  $\hbar\omega$  ? Pourquoi ? Est-il possible de trouver

la valeur  $3\hbar\omega/2$  ? Pourquoi ?

3° Quelle est la probabilité  $\mathcal{P}(t_0, 3\hbar\omega/2)$  de trouver la valeur  $3\hbar\omega/2$  comme résultat de mesure de l'énergie à l'instant  $t_0$  ?

4° Aucune mesure n'étant effectuée entre les instants  $t_0$  et  $t$ , évaluer l'état  $|\varphi(t)\rangle$  du système à l'instant  $t$ .

5° Calculer la probabilité  $\mathcal{P}(t, 3\hbar\omega/2)$  de trouver la valeur  $3\hbar\omega/2$  lors de la mesure de l'énergie à l'instant  $t$ . Conclure. Donner une interprétation physique à ce résultat.

Extrait, Fès, MP2 - PC2, Mai 1987

I 1° L'énergie totale d'une particule de masse  $m$  soumise au potentiel  $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

En mécanique quantique, les grandeurs  $x$  et  $p$  sont remplacées respectivement par les observables  $X$  et  $P$  qui vérifient :  $[X, P] = i\hbar$ .

On obtient alors aisément l'opérateur hamiltonien du système :  $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$

2°  $H$  étant indépendant du temps : système conservatif.

I - A 1° L'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :  $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$

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

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi_k(x) = E_k \varphi_k(x) \quad (1)$$

2° On a à résoudre une équation différentielle du second ordre ; sa solution générale est :

$$\varphi_0(x) = N e^{-m\omega x^2 / 2\hbar} \quad N \text{ étant une constante de normalisation}$$

Posons  $\lambda = \frac{m\omega}{2\hbar}$ , il vient alors  $\varphi_0(x) = N e^{-\lambda x^2}$

$$\frac{d\varphi_0(x)}{dx} = -2\lambda x N e^{-\lambda x^2} \quad \text{et} \quad \frac{d^2\varphi_0(x)}{dx^2} = (-2\lambda + 4\lambda^2 x^2) \varphi_0(x)$$

L'équation (1) devient :  $\left[ \frac{2\hbar^2\lambda}{2m} (1 - 2\lambda x^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi_0(x) = E_0 \varphi_0(x)$

$$x^2 \left( \frac{1}{2} m\omega^2 - \frac{4\lambda^2 \hbar^2}{2m} \right) + \left( \frac{\hbar^2\lambda}{m} - E_0 \right) = 0$$

↑  
= 0

Le terme constant est son identification à zéro exige :  $E_0 = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{m} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{m\omega}{2\hbar}$

soit :

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

3°) La condition de normalisation, soit ici  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_0(x)|^2 dx = 1$  nous permet d'écrire (on choisit  $N$  réel positif) :

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda x^2} dx = 1$$

or

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

donc

$$N^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} = 1 \Rightarrow N^2 = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \quad (\lambda = \frac{m\omega}{2\hbar})$$

soit

$$N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

et donc la fonction d'onde du fondamental est :  $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2 / 2\hbar}$

4°) ♦ La valeur moyenne de la position est, pour un état  $\varphi_0(x)$ ,

$$\langle x \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) x \varphi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \varphi_0^2(x) dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-2\lambda x^2} dx$$

la fonction à intégrer étant une fonction impaire et l'intégration étant sur un intervalle symétrique par rapport à l'origine, on a :  $\langle x \rangle_0 = 0$  (2)

♦ La valeur moyenne  $\langle x^2 \rangle_0$  est :  $\langle x^2 \rangle_0 = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\lambda x^2} dx$

en utilisant  $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = \frac{1}{2\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$ , on obtient :

$$\langle x^2 \rangle_0 = N^2 \frac{1}{4\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} = \frac{1}{4\lambda} \quad \left(N^2 = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\right)$$

soit :

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (3)$$

♦ La valeur moyenne de l'impulsion  $p$  est, par définition

$$\langle P \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi_0(x)\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0(x) \left[-i\hbar (-2\lambda x \varphi_0(x))\right] dx$$

$$\langle P \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} 2i\hbar \lambda x \varphi_0^2(x) dx$$

donc

$$\langle P \rangle = 0 \quad (4) \quad \text{pour les mêmes raisons que (2).}$$

♦ D'autre part,  $\langle P^2 \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \varphi_0(x)\right) dx$

$$= 2\hbar^2 \lambda \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^2(x) dx - 2\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \varphi_0^2(x) dx \right]$$

$$= 2\hbar^2 \lambda [1 - 2\lambda \langle x^2 \rangle_0]$$

Compte tenu de la valeur de  $\lambda$ , on obtient aisément :

$$\langle P^2 \rangle_0 = \frac{\hbar m \omega}{2}$$

5°) L'écart quadratique moyen de la position à pour expression :

$$(\Delta x_0) = \sqrt{\langle X^2 \rangle_0 - \langle X \rangle_0^2}$$

soit d'après (2) et (3) :

$$\Delta x_0 = \sqrt{\hbar / 2m\omega}$$

On définit également d'après (4) et (5), l'écart quadratique moyen de l'impulsion par :

$$\Delta p_0 = \sqrt{\hbar m \omega / 2}$$

De (6) et (7), il résulte :  $\Delta x_0 \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$

Comme d'après la relation de Heisenberg,  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  on voit que la borne inférieure  $\frac{\hbar}{2}$  est atteinte dans le cas de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.

B-1°) Les énergies propres de l'oscillateur harmonique sont données par :

$E_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$  avec  $k \in \mathbb{N}$ .  $E_k$  est non dégénéré : à toute valeur de  $k$  correspond un vecteur  $|\varphi_k\rangle$ , unique.

2°) A l'instant  $t_0$ , l'oscillateur considéré est dans l'état :

$$|\psi(t_0)\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} |\varphi_0\rangle + \frac{1}{2} |\varphi_1\rangle - \frac{1}{2} |\varphi_2\rangle$$

♦ Aucune valeur propre ne peut être égale à  $\hbar \omega$ , donc lors d'une mesure de l'énergie, il n'est pas possible de trouver la valeur  $\hbar \omega$ .

◆ Par contre la valeur  $E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega$  est une valeur possible qui correspond à l'état propre  $|\varphi_3\rangle$ . On voit que dans l'état  $|\psi(t_0)\rangle$ ,  $|\varphi_3\rangle$  est affecté d'un coefficient nul. Il n'est donc pas possible de trouver cette valeur lors de la mesure de l'énergie à l'instant  $t_0$ .

3°)  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$  valeur propre correspondante à l'état propre  $|\varphi_1\rangle$ . Il vient alors :

$$\mathcal{P}(E_1) = |\langle \varphi_1 | \psi(t_0) \rangle|^2 = \frac{1}{4}$$

4°) L'état du système à un instant  $t > t_0$  est exprimée par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k=0}^2 C_k e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} |\varphi_k\rangle$$

soit :

$$|\psi(t)\rangle = \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\right) e^{-i\omega(t-t_0)/2} |\varphi_0\rangle + \frac{1}{2} e^{-3i\omega(t-t_0)/2} |\varphi_1\rangle + \frac{1}{2} e^{-5i\omega(t-t_0)/2} |\varphi_2\rangle$$

$$5^\circ) \mathcal{P}\left(t, \frac{3\hbar\omega}{2}\right) = \mathcal{P}(t, E_1) = |\langle \varphi_1 | \psi(t) \rangle|^2$$

soit

$$\mathcal{P}\left(t, \frac{3\hbar\omega}{2}\right) = \frac{1}{4}$$

Nous retrouvons la même valeur que celle obtenue à  $t = t_0$ . Ce résultat est évident car  $H$  est une constante du mouvement.

## 28 - Opérateurs $a$ et $a^+$ - Valeurs possibles de l'énergie.

Dans tout le problème  $X$  et  $P$  représentent respectivement les observables position et impulsion.

L'hamiltonien d'une particule en mouvement oscillatoire unidimensionnel s'écrit :  $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$ , où  $m$  et  $\omega$  désignent respectivement la masse et la pulsation.

Soient  $a$  et  $a^+$  deux opérateurs adjoints l'un de l'autre, agissant sur les états stationnaires  $|\phi_n\rangle$  du système telles que :

$$a |\phi_n\rangle = \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle ; a^+ |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle ; [a, a^+] \neq 0$$

1°)  $\{|\phi_n\rangle\}$  est une base orthonormée et complète. Généraliser les

relations qu'elle doit vérifier.

2°) Calculer les éléments de matrice :  $\langle \phi_n | a | \phi_n \rangle$ ,  $\langle \phi_n | a^+ | \phi_n \rangle$ ,  $\langle \phi_n | a a^+ | \phi_n \rangle$ ,  $\langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle$ ,  $\langle \phi_n | a^2 | \phi_n \rangle$  et  $\langle \phi_n | a^{+2} | \phi_n \rangle$

3°) On pose  $X = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$  et  $P = (m\hbar\omega)^{1/2} \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a)$

Démontrer que les valeurs moyennes des 2 observables dans un état stationnaire  $|\phi_n\rangle$ , sont nulles ?

En déduire : - Les états quadratiques moyens  $(\Delta X)^2$  et  $(\Delta P)^2$   
- Les valeurs moyennes des deux énergies cinétique et potentielle ? Le produit  $\Delta X \cdot \Delta P$  est-il conforme à la relation d'incertitude d'Heisenberg ?

4°) Démontrer que l'hamiltonien du système s'écrit :  $H = \frac{\hbar\omega}{2} (a a^+ + a^+ a)$  ayant pour valeurs propres, associées aux états stationnaires,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

5°) A l'instant  $t = 0$ , l'état du système est donné par :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} |\phi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_1\rangle + \frac{1}{2} |\phi_2\rangle$$

a) On mesure à cet instant l'énergie du système, quelles valeurs trouve-t-on et avec quelles probabilités ?

b) Quelle est la probabilité  $\mathcal{P}(t)$ , pour qu'à l'instant  $t > 0$ , une mesure

de l'énergie donne un résultat supérieur à  $2\hbar\omega$  ?

c) Calculer les valeurs moyennes de  $X$  et  $P$  à l'instant  $t$  et montrer que leur évolution dans le temps vérifie le théorème d'Ehrenfest ?

Rappel de formules :  $[X, F(P)] = i\hbar \frac{dF(P)}{dP}$  ;  $[P, G(X)] = i\hbar \frac{dG(X)}{dX}$

Ecart quadratique moyen d'une observable  $A$ :  $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

Extrait, Tétouan, PC 2-MP 2, Janvier 1987.

1°) ◆  $H$  étant hermitique, les kets  $|\phi_n\rangle$  correspondant à des valeurs de  $n$  différentes sont orthogonaux ; comme chacun d'eux est normé, ils vérifient alors la relation d'orthonormalisation :  $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = \delta_{nn}$ .

◆  $H$  est une observable : l'ensemble des  $|\phi_n\rangle$  constitue donc une base dans  $\mathcal{E}_x$ , ce qui s'exprime par la relation de fermeture :  $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$

◆ Nous avons  $a^+ | \phi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} | \phi_n \rangle$

$$\text{soit } | \phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^+ | \phi_{n-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (a^+)^2 | \phi_{n-2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} \dots \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+)^n | \phi_0 \rangle$$

soit

$$| \phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n | \phi_0 \rangle$$

2°) Nous avons :  $a | \phi_n \rangle = \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle$  et  $a^+ | \phi_n \rangle = \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle$

Les équations adjointes sont :  $\langle \phi_n | a^+ = \sqrt{n} \langle \phi_{n-1} |$  et  $\langle \phi_n | a = \sqrt{n+1} \langle \phi_{n+1} |$

Les éléments de matrice des opérateurs  $a, a^+, aa^+, a^+a, a^2$  et  $(a^+)^2$  en représentation  $\{ | \phi_n \rangle \}$

$$\text{sont : } \langle \phi_{n'} | a | \phi_n \rangle = \langle \phi_{n'} | \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} \delta_{n'(n-1)} \quad (1)$$

$$\langle \phi_{n'} | a^+ | \phi_n \rangle = \langle \phi_{n'} | \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n'(n+1)} \quad (2)$$

$$\langle \phi_{n'} | aa^+ | \phi_n \rangle = \langle \phi_{n'} | a \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = \sqrt{n+1} \langle \phi_{n'} | \sqrt{n+1} | \phi_n \rangle = (n+1) \delta_{n'n} \quad (3)$$

$$\langle \phi_{n'} | a^+a | \phi_n \rangle = \langle \phi_{n'} | a^+ \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} \langle \phi_{n'} | \sqrt{n} | \phi_n \rangle = n \delta_{n'n} \quad (4)$$

$$\langle \phi_{n'} | a^2 | \phi_n \rangle = \langle \phi_{n'} | a \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} \langle \phi_{n'} | \sqrt{n-1} | \phi_{n-2} \rangle = \sqrt{n(n-1)} \delta_{n'(n-2)} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n'} | (a^+)^2 | \phi_n \rangle &= \langle \phi_{n'} | a^+ \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = \sqrt{n+1} \langle \phi_{n'} | \sqrt{n+2} | \phi_{n+2} \rangle \\ &= \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n'(n+2)} \end{aligned} \quad (6)$$

$$3^\circ) \text{ ◆ Posons } X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a) \quad \text{et} \quad P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} i(a^+ - a)$$

Nous avons :

$$X | \phi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a) | \phi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [ \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle ]$$

$$P | \phi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^+ - a) | \phi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [ \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle - \sqrt{n} | \phi_{n-1} \rangle ]$$

Les éléments de matrice des opérateurs  $X$  et  $P$  sont donc :

$$\langle \phi_{n'} | X | \phi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [ \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1} ] \quad (7)$$

$$\langle \phi_{n'} | P | \phi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [ \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1} ] \quad (8)$$

Pour  $n = n'$ , nous voyons que les valeurs moyennes des deux observables  $X$  et  $P$  sont nulles.

◆ Pour obtenir les écarts quadratiques moyens  $(\Delta X)^2$  et  $(\Delta P)^2$ , il nous faut calculer les valeurs moyennes de  $X^2$  et  $P^2$  :

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^+ + a)(a^+ + a) = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{+2} + aa^+ + a^+a + a^2) \quad (9-a)$$

$$P^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} (a^+ - a)(a - a^+) = -\frac{m\hbar\omega}{2} (a^{+2} - aa^+ - a^+a + a^2) \quad (9-b)$$

Les termes en  $a^2$  et  $a^{+2}$  ne contribuent pas aux éléments diagonaux (d'après (5) et (6)). Par contre d'après (3) et (4), on a :  $\langle \phi_n | a^+a + aa^+ | \phi_n \rangle = (2n+1)$

$$\begin{aligned} \text{Il vient alors : } \Delta X^2 &= \langle \phi_n | X^2 | \phi_n \rangle - (\langle \phi_n | X | \phi_n \rangle)^2 = \langle \phi_n | X^2 | \phi_n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Delta P^2 &= \langle \phi_n | P^2 | \phi_n \rangle - (\langle \phi_n | P | \phi_n \rangle)^2 = \langle \phi_n | P^2 | \phi_n \rangle \\ &= \frac{m\hbar\omega}{2} (2n+1) = \left(n + \frac{1}{2}\right) m\hbar\omega \end{aligned} \quad (11)$$

◆ On en déduit le produit  $\Delta X \cdot \Delta P$  :  $\Delta X \cdot \Delta P = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar$

Nous trouvons qu'il est supérieur ou égal à  $\frac{\hbar}{2}$ . La borne inférieure est atteinte pour l'état fondamental, c'est-à-dire pour  $n = 0$  (cf exercice 27).

4°) L'hamiltonien du système s'écrit :  $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$   
en utilisant les expressions de  $P^2$  et de  $X^2$  (9)

$$P^2 = \frac{-m\hbar\omega}{2} (a^{+2} - aa^+ - a^+a + a^2) \quad X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{+2} + aa^+ + a^+a + a^2)$$

D'où

$$H = \frac{-\hbar\omega}{4} (a^{+2} - aa^+ - a^+a + a^2) + \frac{\hbar\omega}{4} (a^{+2} + aa^+ + a^+a + a^2)$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (aa^+ + a^+a)$$

On en déduit les valeurs propres, associées aux états stationnaires :

$$E_n = \langle H \rangle = \langle \phi_n | H | \phi_n \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} \langle \phi_n | (aa^\dagger + a^\dagger a) | \phi_n \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} (2n + 1)$$

soit

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, \dots$$

Remarque : Ce résultat peut être obtenu à partir des résultats (10) et (11) en calculant  $E_n = \langle E_c \rangle + \langle E_p \rangle$ . En effet :

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} (2n + 1) \quad \text{et} \quad \langle E_p \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle X^2 \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} (2n + 1)$$

On en déduit : 
$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Les énergies cinétique et potentielle moyennes sont donc égales.

5°) A l'instant  $t = 0$ , l'oscillateur harmonique est dans l'état :

$$| \psi(0) \rangle = \frac{1}{2} | \phi_0 \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | \phi_1 \rangle + \frac{1}{2} | \phi_2 \rangle$$

a) Remarquons d'abord que  $| \psi(0) \rangle$  est normé. La mesure de l'énergie du système à l'instant  $t = 0$  peut donner comme valeurs, celles correspondantes aux états  $| \phi_0 \rangle$ ,  $| \phi_1 \rangle$  ou

$| \phi_2 \rangle$ ; soit : 
$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega, \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega.$$

Les postulats de la mécanique quantique nous permettent d'obtenir les probabilités  $\mathcal{P}(E_k)$  des différentes valeurs  $E_k$ ; en effet :

$$\mathcal{P}(E_0) = | \langle \phi_0 | \psi(0) \rangle |^2 = \frac{1}{4}; \quad \mathcal{P}(E_1) = | \langle \phi_1 | \psi(0) \rangle |^2 = \frac{1}{2}$$

et 
$$\mathcal{P}(E_2) = | \langle \phi_2 | \psi(0) \rangle |^2 = \frac{1}{4}$$

b) L'état  $| \psi(t) \rangle$  à l'instant  $t > 0$  est donné par :

$$| \psi(t) \rangle = \sum_{n=0}^2 C_n(t) e^{-iE_n t / \hbar} | \phi_n \rangle = \sum_{n=0}^2 C_n(t) e^{-i(n + \frac{1}{2}) \omega t} | \phi_n \rangle$$

avec 
$$C_0(t) = \frac{1}{2}; \quad C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad C_2(t) = \frac{1}{2}$$

Soit à l'instant  $t > 0$ , une mesure de l'énergie donne un résultat supérieur à  $2 \hbar \omega$ . (c'est-à-dire  $\frac{5}{2} \hbar \omega$  qui correspond à  $n = 2$ ).

La probabilité de se trouver donc dans l'état  $| \phi_2 \rangle$  s'écrit :

$$P(t) = | \langle \phi_2 | \psi(t) \rangle |^2 = | C_2(t) |^2 = | C_2(0) |^2$$

soit :

$$P(t) = \frac{1}{4}$$

e) La valeur moyenne d'une grandeur physique quelconque  $A$  est donnée en fonction du temps par : 
$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} C_{n'}^*(t) \langle \phi_{n'} | A | \phi_n \rangle C_n(t) e^{i(E_{n'} - E_n)t / \hbar}$$

$$= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} C_{n'}^*(0) C_n(0) A_{n'n} e^{i(n' - n) \omega t}$$

avec

$$A_{n'n} = \langle \phi_{n'} | A | \phi_n \rangle \quad \text{et } n', n \text{ sont des entiers.}$$

◆ Appliquons ce résultat aux observables  $X$  et  $P$ .

D'après l'égalité (7), les seuls éléments de matrice  $X_{n'n}$  et  $P_{n'n}$  non nuls de  $X$  et  $P$  sont tels que  $n' = n \pm 1$ . Par conséquent, les valeurs moyennes de  $X$  et  $P$  comprennent uniquement des termes en  $e^{\pm i \omega t}$ .

Ecrivons alors les matrices correspondantes à  $A = X$  et  $A = P$  dans la base  $\{ | \phi_0 \rangle, | \phi_1 \rangle \text{ et } | \phi_2 \rangle \}$ . Soit d'après (7) et (8) :

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad P = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

La valeur moyenne de  $X$  est donc :

$$\langle X \rangle_t = C_0(0) C_1(0) [X_{01} e^{-i\omega t} + X_{10} e^{i\omega t}] + C_1(0) C_2(0) [X_{12} e^{-i\omega t} + X_{21} e^{i\omega t}]$$

soit d'après les valeurs de  $C_0, C_1, C_2$  et  $A_{01}, A_{10}, A_{12}$  et  $A_{21}$

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_t &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) + \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{2} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (1 + \sqrt{2}) \cos \omega t \end{aligned} \quad (12)$$

Par un raisonnement analogue, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle P \rangle_t &= C_0(0) C_1(0) [P_{01} e^{-i\omega t} + P_{10} e^{i\omega t}] + C_1(0) C_2(0) [P_{12} e^{-i\omega t} + P_{21} e^{i\omega t}] \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \frac{1}{2\sqrt{2}} [(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) + \sqrt{2} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})] \end{aligned}$$

$$\langle P \rangle_t = - \frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{2} (1 + \sqrt{2}) \sin \omega t \quad (13)$$

◆ Appliquons le théorème d'Ehrenfest aux observables  $X$  et  $P$  :

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{1}{i\hbar} [X, H] = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (14)$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} [P, H] = -m \omega^2 \langle X \rangle \quad (15)$$

D'après (12), nous avons : 
$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{-\omega}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} (1 + \sqrt{2}) \sin \omega t$$

$$= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{\hbar \omega}{m}} (1 + \sqrt{2}) \sin \omega t = \frac{\langle P \rangle}{m}$$

Donc l'équation (14) est vérifiée.

D'après (13) : 
$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = -\omega \frac{\sqrt{m \hbar \omega}}{2} (1 + \sqrt{2}) \cos \omega t$$

$$= -m \omega^2 \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}} (1 + \sqrt{2}) \cos \omega t = -m \omega^2 \langle X \rangle$$

L'équation (15) est donc vérifiée.

## 29 - Les matrices de Pauli.

Considérons les trois matrices de Pauli  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$  qui, dans la base des vecteurs propres normés  $|+\rangle_x$  et  $|-\rangle_x$  de  $\sigma_z$  avec les valeurs propres respectives  $+1$  et  $-1$ , s'écrivent :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Et considérons les trois observables  $S_x = (\hbar/2) \sigma_x$ ;  $S_y = (\hbar/2) \sigma_y$ , et  $S_z = (\hbar/2) \sigma_z$ .

Pour la terminologie, les observables  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  représentent trois grandeurs physiques mesurables attachées à l'électron appelées composantes du moment cinétique de spin de l'électron. Ces matrices agissent dans un espace à deux dimensions appelé des états de spin de l'électron et noté  $\mathcal{E}_s$ .

1°) Quelles sont les valeurs et vecteurs propres de  $S_x$  ?

2°) Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres normés notés

$(|+\rangle_x, |-\rangle_x)$  et  $(|+\rangle_y, |-\rangle_y)$  de  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$ , respectivement.

En déduire les valeurs et états propres de  $S_x$  et  $S_y$ .

3°) Montrer que  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$  obéissent aux relations de commutation :

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z; \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i \sigma_x \quad \text{et} \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i \sigma_y.$$

En déduire les commutateurs  $[S_x, S_y]$ ,  $[S_y, S_z]$  et  $[S_z, S_x]$ .

4°) Soit  $S^2$  l'observable associée au carré du moment cinétique de spin de l'électron définie par :  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ , évaluer le commutateur  $[S^2, S_z]$ . Que peut-on déduire ?  $S^2$  et  $S_z$  représentent-elles des grandeurs physiques compatibles ?

5°) Evaluer l'action de  $S^2$  sur les états  $|+\rangle_x$  et  $|-\rangle_x$ . Conclure.

6°)  $S^2$  et  $S_z$  forment-elles un ensemble complet d'observables qui commutent ? Que peut-on conclure ?

7°) On mesure l'observable  $S^2$ , l'électron étant dans l'état de spin décrit par le vecteur  $|\psi\rangle = \alpha |+\rangle_x + \beta |-\rangle_x$ ,  $(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2$  de l'espace  $\mathcal{E}_s$ , quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

8°) La mesure de  $S^2$  n'étant pas effectuée, une mesure de  $S_x$  donne la valeur  $\hbar/2$ , quel est l'état de spin de l'électron immédiatement après la mesure ? Quelles valeurs peut-on alors trouver lors d'une mesure de  $S_y$  et avec quelles probabilités ?

Extrait, Fès, MP 2-PC 2, Juin 1986.

1°)  $\sigma_z$  est une matrice hermitique, diagonalisable. Ces valeurs propres sont donc :  $\pm 1$ . Les vecteurs propres de  $\sigma_z$  sont  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ . Ces mêmes vecteurs propres sont les mêmes que ceux de  $S_z$ , par contre ses valeurs propres sont  $\pm \hbar/2$ .

2°)  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$  ont toutes la même équation caractéristique :  $\lambda^2 - 1 = 0$

Les valeurs propres de  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$  sont donc :  $\lambda = \pm 1$ .

Donc les valeurs propres de  $S_x$  et  $S_y$  sont  $\pm \hbar/2$ . Cherchons les vecteurs propres de  $\sigma_x$  qui sont aussi ceux de  $S_x$ .

En représentative  $|+\rangle_x = c_1 |+\rangle_x + c_2 |-\rangle_x$  : 
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

On choisit :  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$  ;  $c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$  pour que  $|+\rangle_x$  soit normé

Il vient alors : 
$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x + |-\rangle_x)$$

Il est facile de montrer par un raisonnement analogue que :  $|->_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+>_z - |->_z)$

ou en remarquant que  $\langle + | ->_x = 0$ .

Pour  $\sigma_y$ , on fait agir le vecteur colonne  $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$  pour trouver  $+I \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$-ic_2 = c_1 \quad \text{et} \quad ic_1 = c_2$$

De plus  $c_1^2 + c_2^2 = 1$ . Il vient alors :  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} ; c_2 = \frac{i}{\sqrt{2}}$

Soit :  $|+>_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+>_z + i|->_z)$

Le ket  $|->_y$  doit être normé et orthogonal à  $|+>_y$ , il vient :

$$|->_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+>_z - i|->_z)$$

En résumé :

$$\begin{aligned} S_{x,y,z} |\pm>_{x,y,z} &= \frac{\hbar}{2} |\pm>_{x,y,z} \\ \text{avec} \quad |\pm>_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+>_z \pm |->_z) \\ |\pm>_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+>_z \pm i|->_z) \end{aligned}$$

0) D'après la définition de matrices  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  il est facile de vérifier les égalités suivantes :

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad (I : \text{matrice unité } 2 \times 2) \quad (1)$$

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \quad (2)$$

ainsi que les équations qui se déduisent par permutation circulaire de  $x, y$  et  $z$ .

De (2) on tire :  $[\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z$

ainsi que les égalités obtenues par permutation circulaire.

Soit :  $[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x ; [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$

On en déduit :  $[S_x, S_y] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_x, \sigma_y] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 2i\sigma_z = i\hbar S_z$

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

4°) Commutateur  $[S^2, S_z]$  :

$$[S^2, S_z] = [S_x^2 + S_y^2 + S_z^2, S_z] = [S_x^2, S_z] + [S_y^2, S_z] + [S_z^2, S_z]$$

or  $[S_x^2, S_z] = S_x [S_x, S_z] + [S_x, S_z] S_x = -i\hbar [S_x S_y + S_y S_x]$

$$[S_y^2, S_z] = S_y [S_y, S_z] + [S_y, S_z] S_y = i\hbar [S_y S_x + S_x S_y]$$

$$[S_z^2, S_z] = 0$$

d'où :

$$[S^2, S_z] = 0$$

On voit que  $S^2$  et  $S_z$  commutent. Ils ont donc des fonctions propres communes et, plus précisément, ils ont une base propre complète commune qui est celle de  $S_z$  ( $|+>_z, |->_z$ )

5°) On voit que le carré de chaque matrice de Pauli est la matrice unité :

$$\text{Donc :} \quad S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} I$$

ou encore

$$S^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

D'où

$$S^2 |+>_z = \frac{3\hbar^2}{4} |+>_z ; \quad S^2 |->_z = \frac{3\hbar^2}{4} |->_z$$

On conclut que :

$$S^2 |\pm> = \hbar^2 S(S+1) |\pm> \quad S \text{ étant un demi-entier} = \frac{1}{2}$$

6°)  $S^2$  et  $S_z$  commutent et forment une base propre complète. Donc l'ensemble  $\{S^2, S_z\}$  constitue un ensemble complet d'observables qui commutent (E.C.O.C). Par conséquent le résultat de la mesure par les différentes observables  $S^2$  ou  $S_z$  est suffisant pour déterminer l'état du système après la mesure.

7°) L'électron se trouve dans l'état de spin décrit par le vecteur :  $|\psi\rangle = \alpha |+>_z + \beta |->_z$

Les valeurs propres de  $S^2$  sont  $\frac{3\hbar^2}{4}$  (valeur deux fois dégénérée) et les vecteurs propres

de  $S^2$  sont  $|+>_z$  et  $|->_z$ . Donc, la mesure de  $S^2$  donne à coup sûr  $\frac{3\hbar^2}{4}$  avec

probabilité :

$$\mathcal{P}(E = \frac{3\hbar^2}{4}) = | \langle + | \psi \rangle |^2 + | \langle - | \psi \rangle |^2$$

Soit :

$$\mathcal{P}(E = \frac{3\hbar^2}{4}) = |\alpha|^2 + |\beta|^2$$

$|\psi\rangle$  doit être normé, donc  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Il vient alors :  $\mathcal{P}(E = \frac{3\hbar^2}{4}) = 1$

8°) ♦ Remarquons d'abord que les valeurs propres de  $S_x$  et  $S_y$  sont  $\pm \hbar/2$ . Pour  $S_x$ , on a obtenu :

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm |-\rangle_z) \quad (1)$$

et pour  $S_y$ , on a obtenu :  $|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm i|-\rangle_z)$  (2)

♦ La mesure de  $S_x$  donnant la valeur  $\frac{\hbar}{2}$  montre que l'état de la particule est  $|+\rangle_x$ . L'état de spin de l'électron immédiatement après la mesure est le ket normé :

$$|\phi\rangle = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad (3)$$

où  $P_n$  est le projecteur défini dans le sous-espace associé à la valeur propre  $+\frac{\hbar}{2}$  engendré par  $|+\rangle_x$ . Soit alors :

$$P_n = |+\rangle_x \langle +| \quad (4)$$

Exprimons l'état  $|\psi\rangle$  en fonction de  $|+\rangle_x$  et  $|-\rangle_x$  :

Les relations (1) nous donnent :  $|+\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x + |-\rangle_x)$

$$|-\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x - |-\rangle_x)$$

donc :  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\alpha + \beta) |+\rangle_x + (\alpha - \beta) |-\rangle_x)$  (5)

On déduit d'après (4) et (5) :

$$\begin{cases} P_n |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha + \beta) |+\rangle_x \\ \langle \psi | P_n | \psi \rangle = \frac{1}{2} (\alpha^* + \beta^*) (\alpha + \beta) \langle + | + \rangle_x \\ = \frac{1}{2} |\alpha + \beta|^2 \end{cases}$$

L'état de spin de l'électron immédiatement après la mesure est d'après (3) :

$$|\phi\rangle = \frac{(\alpha + \beta)}{|\alpha + \beta|} |+\rangle_x$$

$$|\phi\rangle = |+\rangle_x$$

à un facteur de phase près

♦ La probabilité qu'une mesure de la variable  $S_y$  donne, dans l'état  $|\psi\rangle$ , un résultat égal à  $\pm \frac{\hbar}{2}$  est égale à la probabilité qu'à l'état  $|\psi\rangle$  d'être identique à  $|\pm\rangle_y$ . Soit :

$$\mathcal{P}(S_y = \frac{\hbar}{2}) = |\langle + | \psi \rangle|^2 \quad \mathcal{P}(S_y = -\frac{\hbar}{2}) = |\langle - | \psi \rangle|^2$$

Compte tenu de (2) et, on tire :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(S_y = \frac{\hbar}{2}) &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + | + \rangle + \langle + | - \rangle) (\alpha |+\rangle_z + \beta |-\rangle_z) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\alpha - i\beta|^2 = \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(S_y = -\frac{\hbar}{2}) &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle - | + \rangle + \langle - | - \rangle) (\alpha |+\rangle_z + \beta |-\rangle_z) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\alpha + i\beta|^2 = \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Remarquons que la probabilité de la mesure de  $S_y$  donne indifféremment  $\frac{\hbar}{2}$  ou  $-\frac{\hbar}{2}$  est bien égale à 1 :

$$\mathcal{P}(S_y = \frac{\hbar}{2}) + \mathcal{P}(S_y = -\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2} [2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2] = 1$$

### 30 - Illustration des postulats sur le cas d'un spin 1/2 - Préparation de l'état le plus général - Evolution du spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme.

1 - On considère une particule de spin  $s = \frac{1}{2}$  ; et soit la direction de vecteur unitaire  $\vec{u}$  d'angles polaires  $\theta$  et  $\varphi$ .

1°) Rappeler les matrices représentant  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base des états propres de  $S_z$  qu'on notera  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ .

2°) Trouver la composante  $S_u$  du spin de la particule, le long de la direction  $\vec{u}$ , et donner la matrice qui représente  $S_u$  dans la base des états

propres de  $S_z$ .

3° Donner les 2 états propres de  $S_u$  qu'on notera  $|+\rangle_u$  et  $|-\rangle_u$ .

II - Soit la même particule de spin  $s = \frac{1}{2}$ ; on considère dans  $\mathcal{E}_s$ , l'espace des états de spin de cette particule, la base formée par les états propres de  $S_z$ .

1° Quel est sur cette base l'état de spin (normé)  $|\psi\rangle$  le plus général de la particule dans l'espace  $\mathcal{E}_s$ ?

2° Montrer que cet état peut s'écrire à une constante de normé 1 près :

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle$$

3° Montrer (en utilisant les résultats de I) que  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}_s$ , il existe un vecteur unitaire  $\vec{u}$  tel que  $|\psi\rangle$  soit colinéaire avec un état propre de  $S_u$ .

III - La particule considérée dans I et II de spin  $\frac{1}{2}$  est plongée dans un champ magnétique uniforme  $\vec{B}_0$  et l'on choisit l'axe Oz suivant  $\vec{B}_0$ . L'énergie potentielle du moment magnétique  $\vec{M} = \gamma \vec{S}$  de cette particule est  $\omega = -\vec{M} \cdot \vec{B}_0 = -\gamma B_0 S_z$  ( $\gamma$  rapport gyromagnétique,  $B_0$  module du champ magnétique) et l'observable hamiltonien correspondante est  $H = \omega_0 S_z$  où  $\omega_0 = -\gamma B_0$ .

1° Trouver les vecteurs propres de  $H$  et les niveaux d'énergie.

2° On suppose qu'à l'instant  $t = 0$  l'état de spin de la particule est donné par l'expression trouvée en II 2° :

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle$$

donner l'état de spin  $|\psi(t)\rangle$  à un instant  $t > 0$ .

3° En comparant l'expression de  $|\psi(t)\rangle$  à l'un des états propres de  $S_u$  calculé dans I.3°, montrer que l'angle entre  $\vec{u}(t)$  et Oz (direction de  $\vec{B}_0$ ) reste constant et que le vecteur unitaire  $\vec{u}(t)$  tourne autour de Oz à la vitesse angulaire  $\omega_0$  (précession de Larmor).

4° Calculer les probabilités d'obtenir  $\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$  dans une mesure de  $S_z$ , dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ .

5° Calculer les valeurs moyennes:  $\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle$ ,  $\langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle$  et  $\langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle$  et que pouvez-vous conclure ?

Rabat, Juin 1980.

I- 1°) Considérons une particule de spin  $s = \frac{1}{2}$ . Rappelons les matrices représentant  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base des états propres de  $S_z$   $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ :

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

2°) La composante  $S_u$  du spin le long du vecteur unitaire  $\vec{u}$ , caractérisé par les angles polaires  $\theta$  et  $\varphi$  s'écrit :

$$S_u = \vec{S} \cdot \vec{u} = S_x u_x + S_y u_y + S_z u_z \\ = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta$$

En utilisant les définitions de  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$ , on trouve la matrice qui représente l'observable correspondante  $S_u$  dans la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ :

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (1)$$

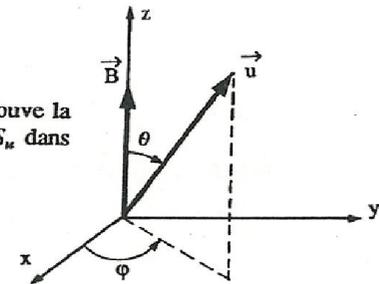


figure 1

3°) ♦ Valeurs propres de  $S_u$

L'équation caractéristique de la matrice (1) :

$$\text{Det} [(S_u) - \lambda I] = - \left( \frac{\hbar^2}{4} \cos^2 \theta - \lambda^2 \right) - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta = 0$$

donne immédiatement les valeurs propres  $E_+$  et  $E_-$  de  $(S_u)$  :  $E_+ = \frac{\hbar}{2}$  et  $E_- = -\frac{\hbar}{2}$ . On remarque qu'elles sont bien réelles (propriété d'une matrice hermitique).

Remarque : On voit que  $S_u$  a les mêmes valeurs propres  $+\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$  que  $S_x$ ,  $S_x$  et  $S_y$ . Ce résultat est très important physiquement ; on peut en fait tourner en bloc l'appareil de Stern et Gerlach de façon que l'axe défini par le champ magnétique soit parallèle à  $O_x$ ,  $O_y$  ou  $\vec{u}$ . Les phénomènes observés sur la plaque de l'appareil doivent être inchangés par de telles rotations. La mesure de  $S_x$ ,  $S_y$  ou  $S_u$  ne peut donc donner que l'un des deux résultats  $+\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$ .

♦ Vecteurs propres normés de  $S_u$

Soient  $\alpha$  et  $\beta$  les composantes de  $|+\rangle_u$  ou  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ . Elles doivent vérifier :

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta - 1 & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(\cos\theta - 1)\alpha + \sin\theta e^{-i\varphi}\beta = 0$$

$$(-2 \sin^2 \frac{\theta}{2})\alpha + 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}\beta = 0$$

$$(-\sin \frac{\theta}{2})\alpha + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}\beta = 0 \quad (2)$$

$$\alpha = \cotg \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}\beta$$

Le vecteur propre  $|+\rangle_u$  s'écrit donc :  $|+\rangle_u = \beta \left[ \cotg \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} |+\rangle + |-\rangle \right]$

$$= \frac{\beta}{\sin \frac{\theta}{2}} \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \right]$$

Le vecteur  $|+\rangle_u$  doit être normé, donc :  $\beta = \sin \frac{\theta}{2}$

Le vecteur propre normé  $|+\rangle_u$  peut donc s'écrire :

$$\boxed{|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle} \quad (3)$$

Le vecteur propre normé  $|-\rangle_u$  doit être orthogonale à  $|+\rangle_u$  :

$$|-\rangle_u = \alpha' |-\rangle + \beta' |+\rangle$$

$$\langle + | - \rangle_u = \alpha' \cos \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2} + \beta' \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} = 0$$

$$\alpha' = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \quad \text{et} \quad \beta' = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2}$$

$$|-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle$$

On vérifie bien que  $|-\rangle_u$  est normé.

Le ket normé le plus général de l'espace des états de spin de cette particule est de la

forme :  $|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$

2°) Cet état est normé :  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Compte tenu de cette relation, il existe forcément un angle  $\theta$  telle que :

$$|\alpha| = \cos \frac{\theta}{2} \quad \text{et} \quad |\beta| = \sin \frac{\theta}{2}$$

Si de plus, nous imposons :  $0 \leq \theta \leq \pi$

L'équation  $\left| \frac{\beta}{\alpha} \right| = \tg \frac{\theta}{2}$  détermine  $\theta$  de façon unique.

Nous savons d'autre part, que les phases de  $\alpha$  et  $\beta$  n'interviendront dans les probabilités que par leur différence. Soit alors :  $\varphi = \text{Arg} \beta - \text{Arg} \alpha$  ;  $\chi = \text{Arg} \beta + \text{Arg} \alpha$

On a alors :  $\text{Arg} \beta = \frac{\chi + \varphi}{2}$  et  $\text{Arg} \alpha = \frac{\chi - \varphi}{2}$

Le ket  $|\psi\rangle$  s'écrit alors :  $|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{i(\chi - \varphi)}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i(\chi + \varphi)}{2}}$

$$|\psi\rangle = e^{\frac{i\chi}{2}} \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} |-\rangle \right]$$

3°) Si on rapproche l'expression (3) trouvée en I.3°, on voit que  $|\psi\rangle$  (4) ne diffère

de  $|+\rangle_u$  correspondant au vecteur unitaire  $\vec{u}$  que par un terme de phase  $e^{i\chi/2}$  qui n'a

aucune signification physique : donc il existe un vecteur  $\vec{u}$  tel que  $|\psi\rangle$  soit colinéaire au ket

III 1°) L'hamiltonien  $H$  qui décrit l'évolution du spin de la particule dans le champ

$$H = -\gamma B_0 S_z = \omega_0 S_z$$

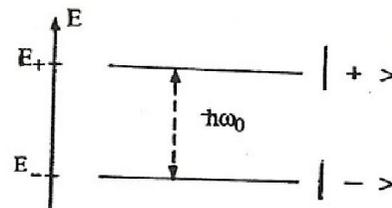
Comme  $S_z$  est un opérateur qui ne dépend pas du temps, la résolution de l'équation de Schrödinger se ramène à celle de l'équation aux valeurs propres de  $H$  qui sont ceux de

$$H |+\rangle = \frac{\hbar \omega_0}{2} |+\rangle ; H |-\rangle = -\frac{\hbar \omega_0}{2} |-\rangle$$

Remarque : On a alors deux niveaux d'énergie. Leur séparation  $\hbar \omega_0$  est proportionnelle au champ magnétique

$\hbar \gamma B_0$  ; ils définissent une fréquence de Bohr unique :

$$\nu_{+-} = \frac{\omega_0}{2\pi} = \frac{E_+ - E_-}{2\pi\hbar} = \frac{E_+ - E_-}{h}$$



2°) A l'instant  $t = 0$ , le spin est décrit par l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} |-\rangle$$

L'état  $|\psi(t)\rangle$  à un instant  $t > 0$  est donc :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} e^{-iE_+ t/\hbar} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} e^{-iE_- t/\hbar} |-\rangle$$

En considérant les valeurs de  $E_+$  et  $E_-$ , nous obtenons :

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} |-\rangle$$

Remarque : La présence du champ magnétique  $\vec{B}_0$  introduit donc un déphasage proportionnel au temps entre les coefficients affectés aux kets  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ .

3°) En comparant l'expression de  $|\psi(t)\rangle$  à l'état propre de  $S_x$   $|+\rangle_x$  calculé dans I 3°). On

voit que (figure 1)  $\theta(t) = \theta$  angles entre  $\vec{u}$  et  $\vec{B}_0$  reste constant

$\varphi(t) = \varphi + \omega_0 t$  angles  $\vec{u}(t)$  tourne autour de  $Oz$  à la vitesse angulaire  $\omega_0$  (proportionnelle au champ  $\vec{B}_0$  qui porte le nom de "précession de Larmor")

4°) L'après l'expression de l'hamiltonien, l'observable  $S_z$  est une constante du mouvement.

Les probabilités d'obtenir  $+\frac{\hbar}{2}$  ou  $-\frac{\hbar}{2}$  dans une mesure de  $S_x$  sont indépendantes du temps :

le module de  $e^{\pm i(\varphi+\omega_0 t)} = 1$

$$\mathcal{P}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle + | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}$$

$$\mathcal{P}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle - | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

5°) ♦ La valeur moyenne de  $S_z$  est également indépendante du temps pour la même raison que 4°) :

$$\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = \langle S_z \rangle_0 \quad (S_z \text{ commute avec } H)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left( \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \cos\theta$$

♦ La valeur moyenne de  $S_x$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  nous donne :  $\langle S_x \rangle_t = \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle$

$$\langle S_x \rangle_t = \langle \psi(t) | S_x \cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} |+\rangle + \langle \psi(t) | S_x \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} |-\rangle$$

Or  $S_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |-\rangle$  et  $S_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle$

$$\text{Donc } \langle S_x \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} \langle \psi(t) | - \rangle + \frac{\hbar}{2} \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} \langle \psi(t) | + \rangle$$

$$\text{En tenant compte de : } \langle \psi(t) | = \cos\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} \langle + | + \sin\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} \langle - |$$

Il vient alors :  $\langle S_x \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} [e^{-i(\varphi+\omega_0 t)} + e^{i(\varphi+\omega_0 t)}]$

$$= \frac{\hbar}{2} \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

Soit :

$$\langle S_x \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

On trouve aisément par un raisonnement analogue :

$$\langle S_y \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

Conclusion :

i)  $S_x$  et  $S_y$  ne commutent pas avec  $H$ , donc  $S_x$  et  $S_y$  ne sont pas des constantes du mouvement. C'est pour cela que les expressions de  $\langle S_x \rangle_t$  et  $\langle S_y \rangle_t$  dépendent du temps.

ii) Dans les expressions de  $\langle S_x \rangle_t$  et  $\langle S_y \rangle_t$ , on retrouve la fréquence de Bohr unique  $\frac{\omega_0}{2\pi}$  du système.

iii) Les valeurs moyennes de  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  se comportent comme le feraient les composantes d'un moment cinétique classique de module  $\frac{\hbar}{2}$  qui serait animé du mouvement de précession de Larmor.