Université Paul Sabatier – Toulouse
Licence Physique, Chimie et Applications
L3 - Physique Fondamentale

Travaux Dirigés

MECANIQUE QUANTIQUE

Année 2009-2010

TD1 : Formalisme et principes

1 – *Valeurs propres, fonctions propres*

On considère l'opérateur $H = A(-\frac{d}{dx^2} + x^2)$ où A, réel positif représente une énergie.

a) Montrer que $\varphi_0(x) = B.e^{-\alpha.x^2}$, $\varphi_1(x) = C.x.e^{-\alpha.x^2}$ avec B et C complexes sont fonctions propres de H à condition que α ait une valeur que l'on déterminera.
b) Donner les valeurs propres correspondantes.
c) Montrer que ces fonctions sont orthogonales.

2 – *Développement d'un opérateur de projection dans une base*

On considère à *t=0*, l'état de la fonction d'onde $|\psi(x,0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|u_0(x)\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1(x)\rangle + c|u_2(x)\rangle$ où c est un réel et u_0, u_1, u_2 sont les fonctions propres normées de l'Hamiltonien pour les énergies E_0, $E_1 = 5E_0$ et $E_2 = 7E_0$.

a) Calculer c pour que la fonction d'onde soit normée.
b) Donner l'expression de la fonction d'onde à l'instant t quelconque.
c) Calculer, à l'instant t, la moyenne E de l'énergie.

3 – *Règles de commutation*

Soients les opérateurs $A = \frac{\partial}{\partial x}$ et $B = x$.

a) Calculer $(A+B)^2 f(x)$ et $(A+B)(A-B)\ f(x)$
b) Calculer l'expression du commutateur $[p_x, x]$.
c) Exprimer le commutateur $[A,BC]$ en fonction des commutateurs $[A,B]$ et $[A,C]$.
d) En déduire les expression des commutateurs $[p_x, x^2]$ et $[x, p_x^2]$.
e) On considère deux opérateurs linéaires A et B. dans le cas particulier où B commute avec le commutateur $[A,B]$, établir par récurrence la relation : $[A,B^n] = nB^{n-1}.[A,B]$.

4 – *Théorème du viriel*

On considère une particule placée dans un potentiel à une dimension *U(x).* Soit $H = T + U$ son Hamiltonien où $T = \frac{P^2}{2m}$ et $P = -i\hbar\frac{d}{dx}$. Soient $|n\rangle$ et E_n les états stationnaires et les énergies associées à cette particule.

a) Montrer que pour opérateur quelconque F, on a pour tout $|n\rangle$: $\langle n|[H,F]|n\rangle = 0$.
b) On considère l'opérateur $F = xP$. Calculer les commutateurs $[P,U]$, $[T,F]$ $[U,F]$ et $[H,F]$.
c) En déduire que si U(x) est un potentiel homogène de degré l : $\langle n|T|n\rangle = \frac{l}{2}\langle n|U|n\rangle$ (théorème du Viriel). Donner la valeur de l'énergie cinétique moyenne et de l'énergie potentielle moyenne.
d) Application à l'oscillateur harmonique.

5 – *Relation d'incertitude généralisée*

On considère deux opérateurs hermitiens F et G associés à deux grandeurs physiques f et g définies sur un système quantique donné.

a) Montrer que leur commutateur $C = [F, G]$ est antihermitien et donc que iC est hermitien.

b) On considère un état du système quantique décrit par le ket $|\psi\rangle$. λ étant un réel, on forme le ket $|\phi_\lambda\rangle = (F + i\lambda G)|\psi\rangle$. Calculer sa norme sous forme d'un trinôme du second degré en λ et montrer que les coefficients en sont réels.

c) En examinant le signe de ce trinôme montrer que $\langle\psi|F^2|\psi\rangle\langle\psi|G^2|\psi\rangle \geq \frac{1}{4}\langle\psi|iC|\psi\rangle^2$.

d) Appliquer le relation précédente aux opérateurs centrés $\delta_\psi F = F - \langle\psi|F|\psi\rangle$ et $\delta_\psi G$. En déduire le relation d'incertitude pour les écarts types des distributions des grandeurs f et g : $\Delta_\psi F.\Delta_\psi G \geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[F, G]|\psi\rangle|$.

   Retrouver la relation d'Heisenberg pour les grandeurs x et P.

e) La relation ci dessus est valable pour tout état $|\psi\rangle$. On se propose de déterminer les états $|\psi\rangle$ tels que l'inégalité devienne une égalité. Quelle est l'équation qui les détermine ?

f) Résoudre cette équation dans le cas du couple x et P_x en se plaçant dans la représentation x. Retrouver alors le paquet d'onde gaussien qui s'avère être le paquet d'onde minimum.

6 – *Evolution temporelle*

On considère un système physique dont l'espace des états à trois dimensions est rapporté à la base orthonormée formée par les trois kets $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$, $|u_3\rangle$.

Dans cette base, l'opérateur Hamiltonien H d'un système et une observable A s'écrivent :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad A = a \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

où ω_0 et a sont des constantes réelles positives. Le système physique est à l'instant $t=0$ dans l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$.

a) On mesure à l'instant $t=0$ l'énergie du système. Quelles valeurs peut on trouver et avec quelles probabilités ? Calculer pour le système dans l'état $|\psi_0\rangle$ la valeur moyenne et l'écart quadratique moyen de l'énergie.

b) Montrer que H et A commutent. Compte tenu des valeurs propres et vecteurs propres de H calculés précédemment, déterminer le système commun de vecteurs propres :

$$|v_1\rangle = |u_1\rangle$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle + |u_3\rangle)$$

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle - |u_3\rangle)$$

c) H et A forment-ils un ensemble complet d'observables qui commutent ? Exprimer l'état $|\psi(0)\rangle$ dans la base $\{|v_i\rangle\}$.
d) Au lieu de mesurer H à $t=0$, on mesure A. Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?
e) Calculer le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système à l'instant t.
f) Calculer la valeur moyenne de A à l'instant t. Quelle remarque peut-on faire ?

TD2 : Etats quasi-classiques de l’Oscillateur Harmonique

L’hamiltonien d’un oscillateur harmonique à une dimension $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ peut s’écrire, en introduisant les observables $X^{'} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X$ et $P^{'} = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}}$ ainsi que les opérateurs d’annihilation a et de création a^+ tels que $a = \frac{X^{'} + iP^{'}}{\sqrt{2}}$ et $a^+ = \frac{X^{'} - iP^{'}}{\sqrt{2}}$, sous la forme $H = \hbar\omega(a^+a + 1/2)$ (avec $[a, a^+] = 1$).

On se propose ici d’étudier les états propres $|\alpha\rangle$ de l’opérateur a : $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ qui sont appelés états quasi-classiques comme on pourra le comprendre à la fin du problème.

a) On décompose $|\alpha\rangle$ sur la base habituelle $\{|n\rangle\}$ des états propres de H : $|\alpha\rangle = \sum_n C_n|n\rangle$. En utilisant la relation de récurrence $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, montrer que pour toute valeur de α complexe, il existe une autre relation de récurrence simple entre les coefficients C_n correspondant ce qui permet de les calculer tous à partir un premier C_0. En déduire qu’il existe un état propre $|\alpha\rangle$ de a quel que soit α.

b) Calculer les coefficients C_n en normalisant $|\alpha\rangle$.

c) Quelle est la probabilité de trouver $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ lors d’une mesure de l’énergie sur l’état $|\alpha\rangle$.

d) Calculer la valeur moyenne de l’énergie $\langle E\rangle$ et l’écart quadratique ΔE quand l’oscillateur est dans l’état $|\alpha\rangle$. Montrer que l’énergie est d’autant mieux définie que $|\alpha|$ est grand.

e) Calculer $\langle x\rangle$, Δx, $\langle P\rangle$ et ΔP dans l’état $|\alpha\rangle$. Que vaut dans cet état $\Delta x.\Delta P$?

f) On suppose qu’à l’instant *t = 0*, l’oscillateur est dans un état $|\alpha\rangle$. Montrer qu’à chaque instant *t* ultérieur, il est dans un autre état propre $|\alpha(t)\rangle$ de l’opérateur a.

g) Que valent, à l’instant t, $\langle x\rangle$, $\langle P\rangle$? Pourquoi appelle-t-on les états $|\alpha\rangle$ pour $\alpha >> 1$, états « quasi-classiques » ?

TD3 : Moments cinétiques

1 - *Rotation d'une molécule diatomique*

Une molécule diatomique polaire est assimilée à un rotateur rigide dans le référentiel du centre de masse. On note m la masse réduite et r_0 la longueur de la liaison. Son orientation est repérée par les angles θ et φ.

a) Rappeler l'expression du hamiltonien et des niveaux d'énergie de rotation d'une telle molécule.

b) On note $|l, m_l\rangle$ les états propres communs aux opérateurs L^2 et L_z associés au moment cinétique. Préciser le degré de dégénérescence des divers niveaux.

c) Cette molécule possède un moment dipolaire permanent lié à un transfert de charge noté - δq sur l'atome le plus électronégatif. Sous l'action d'un rayonnement électromagnétique, elle peut effectuer des transitions entre ses différents niveaux. Le rayonnement est polarisé rectilignement selon Oz. On montre que l'amplitude de transition est proportionnelle à l'élément de matrice $\langle \mathbf{i}| - \vec{D}.\vec{E_m} |j\rangle$ où i et j repèrent les états initial et final, $\vec{D}$ est le vecteur moment dipolaire et $\vec{E_m}$ l'amplitude maximale du vecteur champ électrique. Calculer cet élément de matrice. En déduire une règle de sélection relative à l'absorption. On donne :

$$\cos\theta |l, m_l\rangle = \sqrt{\frac{l^2 - m_l^2}{4l^2 - 1}} |l-1, m_l\rangle + \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m_l^2}{4(l+1)^2 - 1}} |l+1, m_l\rangle .$$

d) Calculer les énergies qui peuvent être absorbées et en déduire l'allure du spectre d'absorption.

e) La figure 1 reproduit le spectre d'absorption de HCl. Commenter ce résultat expérimental. Déduire la longueur r_0 de la liaison. Pourquoi les raies sont-elles dédoublées ?

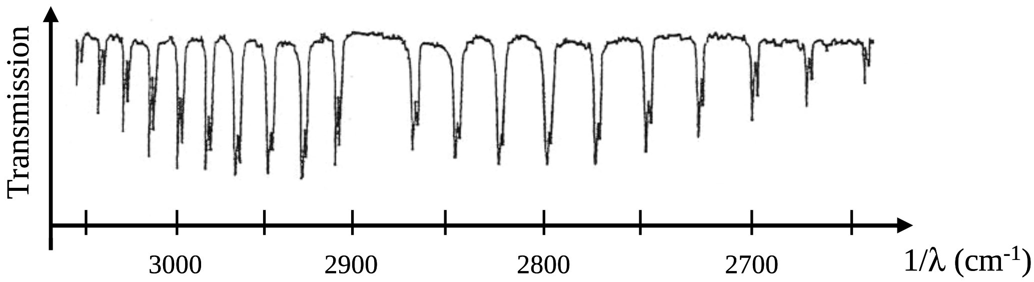


Figure 1

2 - *Mesures du moment cinétique orbital*

On donne l'expression de quelques harmoniques sphériques $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m_l \rangle$:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \ Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \ \text{ et } \ Y_1^{\mp 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta . e^{\mp i\varphi}$$

et on considère les états

$|a\rangle = |0{,}0\rangle - 2|1{,}0\rangle$, $|b\rangle = |1{,}0\rangle - |1{,}1\rangle$ et $|c\rangle = |1{,}-1\rangle - |1{,}1\rangle$.

a) On mesure le carré L^2 du moment cinétique et sa composante L_z dans ces divers états. Préciser les résultats de mesure (résultats possibles, valeurs moyennes et écarts quadratiques).

b) Préciser les résultats de mesures pour les deux autres composantes L_x et L_y. On pourra mener les calculs en introduisant les opérateurs $L_\pm = L_x \pm iL_y$ et la relation :

$L_\pm \left| l, m_l \right\rangle = \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)}\ \hbar\ \left| l, m_l \pm 1 \right\rangle$

3 - *Matrices de Pauli*

On note $\left|+\right\rangle_z$ et $\left|-\right\rangle_z$ les états propres de la composante s_z sur l'axe *Oz* de l'opérateur de spin associé à une particule de spin ½.

a) Rappeler les résultats de mesure de cette composante et du carré du spin dans ces deux états. Donner la représentation matricielle de ces deux opérateurs dans la base $\left\{ \left|+\right\rangle_z, \left|-\right\rangle_z \right\}$.

b) On définit les deux opérateurs s_+ et s_- à partir des opérateurs associés aux deux autres composantes du spin selon :

$s_+ = s_x + is_y$ et $s_- = s_x - is_y = s_+^+$

Calculer les commutateurs $[\mathrm{s}_+, \mathrm{s}_-]$, $[\mathrm{s}_+, \mathrm{s}_z]$ et $[\mathrm{s}_-, \mathrm{s}_z]$. Déduire de la valeur de ces derniers la représentation matricielle des opérateurs s_+, s_-, s_x et s_y dans la base $\left\{ \left|+\right\rangle_z, \left|-\right\rangle_z \right\}$. Quels sont les résultats de mesure de s_x et s_y dans un état propre de s_z ?

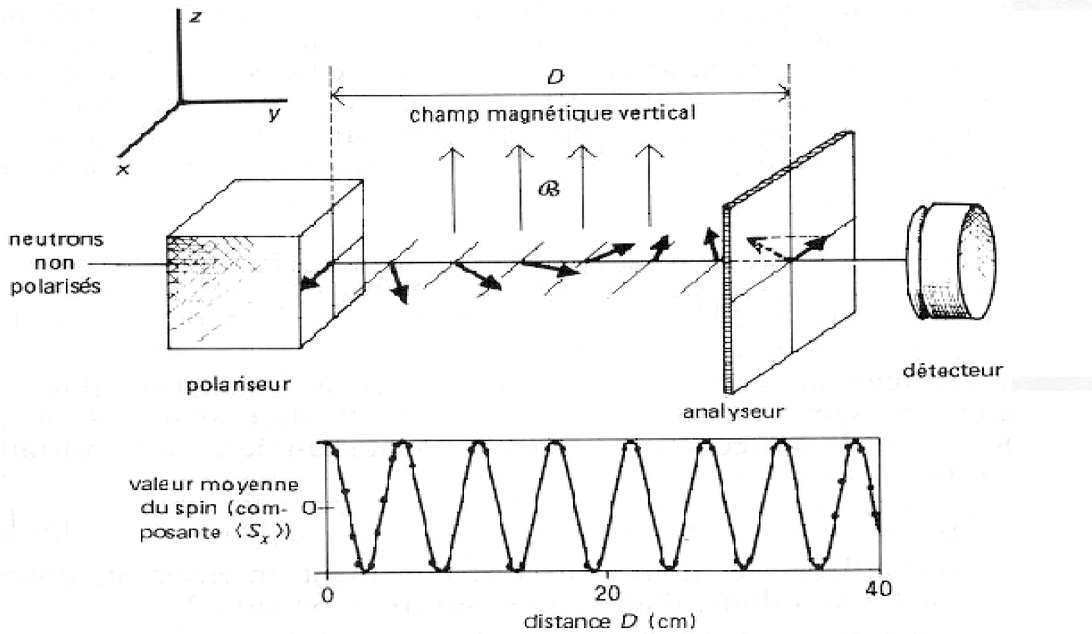
c) Montrer que la matrice représentative de tout opérateur hermitique agissant dans un espace à deux dimensions peut s'exprimer en fonction de la matrice unité et des trois matrices dites de Pauli (σ_u), associées aux trois matrices de spin (s_u) et définies selon $(s_u) = \frac{\hbar}{2}(\sigma_u)$ avec *u*=*x*, *y* ou *z*.

TD4 : Précession de Larmor du spin des neutrons

Une particule de spin ½ a un moment magnétique $\vec{m} = \gamma \vec{s}$ (γ rapport gyromagnétique de la particule). Elle est placée dans un champ magnétique statique uniforme $\vec{B} = B_0 .\vec{e_z}$ (B_0 > 0). On désigne par $a_+(t)$ et $a_-(t)$ les composantes de son état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant *t* sur la base des états propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de s^2 et s_z .

En l'absence de champs magnétique, l'hamiltonien H_0 de la particule ne dépend pas du spin. Les deux états de la base sont alors dégénérés d'énergie E_0. En présence de champ magnétique, l'hamiltonien est modifié par l'adjonction du terme représentant l'énergie d'interaction magnétique selon : $H = H_0 - \vec{m}.\vec{B}$ **.**

a) Ecrire alors la matrice représentative de *H* dans la base $\{ |+\rangle , |-\rangle \}$.
b) Etablir le système d'équations différentielles satisfaites par a_+ et a_-.
c) Résoudre le système sachant que la particule se trouve initialement dans l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$, état propre de s_x associé à la valeur propre $-\hbar/2$. En déduire l'expression de $|\psi(t)\rangle$. On introduira la pulsation $\omega_0 = -\gamma.B_0$.
d) Calculer les valeurs moyennes des composantes s_x , s_y et s_z du spin sur l'état $|\psi(t)\rangle$. Montrer que le spin moyen effectue un mouvement de rotation uniforme autour du champ magnétique à la vitesse angulaire ω_0 (précession de Larmor).
e) Application: mesure du moment magnétique d'un neutron.



[D'après F. Mesei, Z. Phys. *255*, 146 (1972)]

Données numériques :

m_N =1,66.10^{-27} kg
λ_N =1,55 Å
B_0 =15,5.10^{-4} T
h =6,62.10^{-34} J.s

TD5 : Atome d'hydrogène

1 – *Etude de l'orbitale 1s*

Dans l'état de plus basse énergie $E_1 = -13.6\,\text{eV}$, la fonction d'onde s'écrit :

$\psi(r,\theta,\varphi) = \sqrt{1/\pi a_0^3}.e^{-r/a_0}$ où $a_0 = 0.53$ Å

a) Donner l'expression de la densité de probabilité radiale et angulaire.
b) Quelle est la valeur de *r* pour laquelle la densité radiale de probabilité est maximale ?
c) Calculer la probabilité de trouver l'électron à une distance inférieure à *r* du proton. En déduire la probabilité pour que l'électron soit à une distance comprise entre 0.9 a_0 et 1.1 a_0. Tracer *P(r)* en fonction de *r*. On calculera *P(r)* pour *r*=0, a_0, $2\,a_0$, $3\,a_0$.
d) Calculer la valeur moyenne de l'énergie potentielle de l'électron dans cet état. L'exprimer en eV. En déduire la valeur de son énergie cinétique moyenne.
e) Calculer sa vitesse quadratique moyenne définie par $u = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$. Comparer celle-ci à la vitesse de la lumière.

2 - *Etude de l'orbitale 2p*

Un état de l'électron est représenté par : $\psi(r,t) = i(\phi_{211} + \phi_{21-1}).e^{-iE_2 t/\hbar}$. On rappelle que les états propres normés s'écrivent : $\phi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$.

a) La fonction $\psi(r,t)$ représente-elle un état stationnaire ? On mesure l'énergie, le carré et la projection sur *Oz* du moment cinétique orbital. Préciser les résultats de mesure. Normer cette fonction.
b) Préciser la variation en fonction de *r* de la densité radiale de probabilité de présence de l'électron autour du noyau.
c) Préciser en fonction de θ et de φ la variation de la densité de probabilité angulaire.
d) Donner une image du nuage électronique correspondant.

On donne : $R_{21}(r) = \dfrac{1}{2\sqrt{6}} a_0^{-3/2} \dfrac{r}{a_0} e^{-r/a_0}$ et $Y_1^{\pm 1} = \pm(\dfrac{3}{8\pi})^{1/2} \sin\theta.e^{\mp i\varphi}$.