UNIVERSITÉ PAUL SABATIER	LICENCE STS

Année universitaire 2009–2010

L3 Physique fondamentale : MÉCANIQUE QUANTIQUE

CONTRÔLE TERMINAL SESSION 1
durée 2 heures

Dans ce texte, les vecteurs sont notés en **gras**. Il n'y a pas de notation spéciale pour les opérateurs, mais toutes les observables sont supposées quantiques.

A. Question de cours : oscillateur harmonique

Soit un oscillateur harmonique à une dimension, donné par le hamiltonien $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$, avec la relation de commutation usuelle $[x,p] = i\hbar$.

A.1. On fait le changement de variables $p = \sqrt{\hbar m\omega}P$ et $x = \sqrt{\hbar/m\omega}X$. Donner le hamiltonien avec ces nouvelles variables, et la relation de commutation entre P et X.
Correction :
$H = \hbar\omega(P^2 + X^2)/2$ 1
$[X,P] = i$ 1

A.2. Définir les opérateurs a et $a^\dagger$. Démontrer la relation de commutation entre ces deux opérateurs. Calculer le nouvel hamiltonien en fonction de ces opérateurs.
Correction :
$a = (X + iP)/\sqrt{2}$; $a^\dagger = (X - iP)/\sqrt{2}$ 1+1
$[a, a^\dagger] = (1/2)(-i[X,P] + i[P,X]) = 1$ 1
$a^\dagger a = (1/2)(X^2 + P^2 + i[X,P]) = (X^2 + P^2 - 1)/2$, d'où
$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ 2

A.3. On cherche les états propres de l'opérateur $N = a^\dagger a$, que l'on note $|\lambda\rangle$ pour la valeur propre λ. On admet que le spectre n'est pas dégénéré. On suppose que les kets $|\lambda\rangle$ sont normés. Montrer que $a^\dagger|\lambda\rangle$ est état propre de N et donner sa valeur propre et sa norme.
Correction :
$(a^\dagger a)a^\dagger|\lambda\rangle = a^\dagger(a^\dagger a + 1)|\lambda\rangle = (\lambda + 1)a^\dagger|\lambda\rangle$ 1,5
$\|a^\dagger|\lambda\rangle\|^2 = \langle\lambda|aa^\dagger|\lambda\rangle = \langle\lambda|(a^\dagger a + 1)|\lambda\rangle = \lambda + 1$
d'où $\|a^\dagger|\lambda\rangle\| = \sqrt{\lambda + 1}$ 1,5

A.4. Montrer que $a|\lambda\rangle$ est état propre de N et donner sa valeur propre et sa norme. En déduire que λ est un entier positif ou nul, que l'on notera n à partir de maintenant.
Correction :
$(a^\dagger a)a|\lambda\rangle = (aa^\dagger - 1)a|\lambda\rangle = (\lambda - 1)a|\lambda\rangle$ 1,5
$\|a|\lambda\rangle\|^2 = \langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle = \lambda$. On en déduit que λ ne peut pas être négatif. Mais comme l'application répétée de a fait diminuer λ de 1 à chaque fois, on finira toujurs par une valeur négative, sauf si la chaîne s'arrête parce qu'on trouve un vecteur de norme nulle. On en déduit que λ doit être entier, et

que $a|0\rangle = 0$.
Calcul + raisonnement 1,5+2

A.5. En déduire le spectre de l'oscillateur harmonique et la fonction d'onde de l'état $|0\rangle$.
Correction :
$H = \hbar\omega(N + 1/2)$, donc $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ 1
Si on note $\psi_0(X)$ la fonction d'onde, on a $\psi_0'(X) + X\psi_0(X) = 0$, soit
$\psi_0(X) = \alpha \exp(-X^2/2)$ 1
la normalisation est donnée par $|\alpha^2|\sqrt{\pi} = 1$. On choisit :
$\psi_0(X) = (1/\pi^{1/4}) \exp(-X^2/2)$ 1

B. Exercice : Moment cinétique de spin et moment orbital

Soit une particule de spin 1/2. Son état est donné par $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$.

B.1. Quelle est la condition de normalisation sur α et β ?
Correction :
$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 1

B.2. On réalise une mesure de S_z.

a. Quels sont les résultats possibles de cette mesure ?
Correction :
Ce sont les valeurs propres de S_z soit $\pm\hbar/2$ 1+1

b. Avec quelle probabilité trouve-t-on ces résultats ?
Correction :
probabilité $|\alpha|^2$ pour $\hbar/2$ et $|\beta|^2$ pour $-\hbar/2$ 1+1

c. Quelle est la valeur moyenne de S_z ?
Correction :
valeur moyenne $(\hbar/2)(|\alpha|^2 - |\beta|^2)$ 1

B.3. On réalise maintenant une mesure de S_x.

a. Écrire la matrice de l'opérateur S_x et en déduire que la valeur moyenne de S_x est donnée par Cste $\times$ $\mathrm{Re}(\alpha\beta^*)$, où l'on demande la valeur de Cste.
Correction :

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad 1$$

moyenne $\langle\psi|S_x|\psi\rangle = \hbar\mathrm{Re}(\alpha\beta^*)$ 1+1

b. Quels sont les résultats possibles de cette mesure (on rappelle que cela « peut aider » de diagonaliser la matrice de l'opérateur concerné) ?
Correction :
Il faut diagonaliser la matrice. Les valeurs propres sont triviales :
les résultats possibles sont comme pour S_z : $\pm\hbar/2$ 1

c. Avec quelle probabilité trouve-t-on ces résultats ?
Correction :
Les vecteurs propres sont :
$|+\rangle_x = 1/\sqrt{2}|+\rangle + 1/\sqrt{2}|-\rangle$ 0,5

$|-\rangle_x = 1/\sqrt{2}|+\rangle - 1/\sqrt{2}|-\rangle$ 0,5

Il faut calculer la projection de ψ sur les deux vecteurs propres puis prendre le module au carré, soit :

probabilité de trouver $\hbar/2$: $1/2 + \mathrm{Re}(\alpha\beta^*)$ 0,5

probabilité de trouver $-\hbar/2$: $1/2 - \mathrm{Re}(\alpha\beta^*)$ 0,5

C. Problème : Valeur moyenne de r pour le problème coulombien

Dans tout ce problème, on travaille en unités atomique, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \hbar &= 1 \\ m &= 1 \qquad \text{masse réduite de l'électron} \\ e &= 1 \qquad \text{charge élémentaire} \\ 4\pi\varepsilon_0 &= 1 \end{aligned}$$

C.1. Écrire le hamiltonien du problème et l'équation de Schrödinger indépendante du temps. On notera $\Psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$ la fonction d'onde cherchée.

Correction :

$H = \mathbf{p}^2/2 - 1/r$ 1

$-\Delta\Psi_{n\ell m}/2 - \Psi_{n\ell m}/r = E\Psi_{n\ell m}$ 1

C.2. Théorème du Viriel : On considère un état propre $|n\ell m\rangle$ du hamiltonien. On note $H = E_k + E_p$ avec $E_k = \mathbf{p}^2/2$ et $E_p = -1/r$.

a. Soit une observable A. Montrer que l'on a $\langle n\ell m|[H, A]|n\ell m\rangle = 0$.
Correction :
$\langle n\ell m|[H, A]|n\ell m\rangle = (E_n - E_n)\langle n\ell m|A|n\ell m\rangle = 0$ 2

b. On choisit $A = \mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$. Calculer les commutateurs $[E_k, A]$ et $[E_p, A]$.
Correction :
$[E_k, A] = [p^2/2, \mathbf{r}]\cdot\mathbf{p} = -2iE_k$ 1,5
$[E_p, A] = \mathbf{r}\cdot[-1/r, \mathbf{p}] = -iE_p$ 1,5

c. En déduire une relation entre $\langle n\ell m|E_k|n\ell m\rangle$ et $\langle n\ell m|E_p|n\ell m\rangle$.
Correction :
Comme $\langle n\ell m|[H, A]|n\ell m\rangle = 0$, on en déduit que la somme des 2 commutateurs calculés ci-dessus est nulle, soit :
$-2\langle n\ell m|E_k|n\ell m\rangle - \langle n\ell m|E_p|n\ell m\rangle$=0 1

d. Conclure que $\langle n\ell m|1/r|n\ell m\rangle = 1/n^2$.
Correction :
On a aussi $\langle n\ell m|E_k|n\ell m\rangle + \langle n\ell m|E_p|n\ell m\rangle = -1/2n^2$ 1
On en déduit $\langle n\ell m|E_p|n\ell m\rangle = -1/n^2$, d'où le résultat. 1

C.3. Par séparation des variables, il est possible de montrer que l'on doit résoudre l'équation radiale suivante :

$$-\frac{1}{2}f''_{n\ell}(r) + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{1}{r}\right]f_{n\ell}(r) = -\frac{1}{2n^2}f_{n\ell}(r) \qquad (1)$$

avec les conditions :

$$\int_0^\infty f_{n\ell}^2(r)\,\mathrm{d}r = 1 \qquad (2)$$

$$\lim_{r\to 0} f_{n\ell}(r) = 0 \qquad (3)$$

À partir de maintenant, on ne s'intéresse plus qu'au problème à une dimension défini par l'équation radiale (1) et la condition (3). On définit l'opérateur $p_r = -i\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}$ qui agit sur les fonctions radiales $f_{n\ell}(r)$, et le hamiltonien radial $H_r = p_r^2/2 + \ell(\ell+1)/(2r^2) - 1/r$. De plus, pour simplifier les notations, on note $\langle A\rangle$ la valeur moyenne de l'observable A dans un état $f_{n\ell}(r)$, où A n'agit que sur la variable r.

a. Montrer que l'opérateur p_r est auto-adjoint (*aide* : la condition (3) est cruciale).
Correction :
Il faut calculer :

$$\begin{aligned}\langle f|p_r|g\rangle &= -i\int_0^\infty \mathrm{d}r\, f^*(r)g'(r)\\ &= i\int_0^\infty \mathrm{d}r\,(f^*)'(r)g(r)\end{aligned}$$

en intégrant par parties et en utilisant (3)

$$\begin{aligned}&= i\left(\int_0^\infty \mathrm{d}r\, g(r)^* f'(r)\right)^*\\ &= \langle g|p_r|f\rangle^*\end{aligned}$$

L'ensemble (en faisant apparaître la condition) 2

b. Calculer l'adjoint de l'opérateur $p_r r^a$, où a est un entier positif ou nul.
Correction :
$(p_r r^a)^\dagger = (r^a)^\dagger p_r^\dagger = r^a p_r$ 1

c. En écrivant explicitement l'intégrale donnant la moyenne, montrer que $\langle p_r r^a\rangle$ est imaginaire pur.
Correction :

$$\langle p_r r^a\rangle = -i\int_0^\infty \mathrm{d}r\, f_{n\ell}(r)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^a f_{n\ell}(r)] \qquad 1$$

Comme $f_{n\ell}$ est réelle, on a bien le résultat 1

d. En déduire que $\langle p_r r^a\rangle = (1/2)\langle[p_r, r^a]\rangle$ et montrer que l'on a :

$$\begin{aligned}\langle p_r r^2\rangle &= -i\langle r\rangle\\ \langle p_r r\rangle &= -\frac{i}{2}\\ \langle p_r\rangle &= 0\end{aligned}$$

Correction :
$\langle p_r r^a\rangle = \langle (r^a p_r)^\dagger\rangle = \langle r^a p_r\rangle^* = -\langle r^a p_r\rangle$
d'où $\langle[p_r, r^a]\rangle = 2\langle p_r r^a\rangle$ 1
Or $[p_r, r^a] = -iar^{a-1}$
Les 3 équations s'en déduisent immédiatement 0,5 par équation

e. Calculer l'adjoint de l'opérateur $p_r r^2 p_r^2$ et en déduire que $\langle p_r r^2 p_r^2\rangle = (1/2)\langle p_r[r^2, p_r]p_r\rangle$.
Correction :
Le raisonnement est le même
$(p_r r^2 p_r^2)^\dagger = p_r^2 r^2 p_r$ 1
De nouveau, la valeur moyenne est imaginaire pure, soit $\langle p_r r^2 p_r^2\rangle = -\langle p_r^2 r^2 p_r\rangle$
d'où $\langle p_r[r^2, p_r]p_r\rangle = 2\langle p_r r^2 p_r^2\rangle$ 1

f. En déduire que $\langle p_r r^2 p_r^2 \rangle = i\langle r p_r^2 \rangle$. On ne cherchera pas à calculer cette dernière moyenne.
Correction :
$[r^2, p_r] = 2ir$ 1
On a donc à calculer $\langle p_r r p_r \rangle = \langle r p_r^2 \rangle - i\langle p_r \rangle$. En mettant tout ensemble :
$\langle p_r r^2 p_r^2 \rangle = i\langle p_r r p_r \rangle = i\langle r p_r^2 \rangle$ 1

C.4. Calcul de la valeur moyenne de r :

a. Calculer $\langle r H_r \rangle$. En déduire que l'on a :

$$\frac{\langle r \rangle}{n^2} = -\langle r p_r^2 \rangle - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} + 2 \tag{4}$$

Il faudra utiliser le théorème du viriel.
Correction :
$\langle r H_r \rangle = (-1/2n^2)\langle r \rangle = \langle r p_r^2 \rangle/2 + \ell(\ell+1)/2\langle 1/r \rangle - 1$ 1+1
Le théorème du viriel donne $\langle 1/r \rangle = 1/n^2$, d'où le résultat en multipliant par -2 1

b. Calculer $\langle p_r r^2 H_r \rangle$. En déduire que l'on a :

$$\frac{\langle r \rangle}{n^2} = \langle r p_r^2 \rangle + 1 \tag{5}$$

Correction :
$\langle p_r r^2 H_r \rangle = (-1/2n^2)\langle p_r r^2 \rangle = \langle p_r r^2 p_r^2 \rangle/2 + \ell(\ell+1)/2\langle p_r \rangle - \langle p_r r \rangle$ 1+1
On utilise les résultats précédents pour calculer les différentes moyennes
et on obtient le résultat en multipliant par $-2i$ 1

c. En déduire la valeur moyenne de r.
Correction :
On additionne les 2 équations 1
ce qui donne $\langle r \rangle = [3n^2 - \ell(\ell+1)]/2$ 1,5