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.

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.

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.

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.

A.5. En déduire le spectre de l'oscillateur harmonique et la fonction d'onde de l'état $|0\rangle$.

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 ?

B.2. On réalise une mesure de S_z.

a. Quels sont les résultats possibles de cette mesure ?

b. Avec quelle probabilité trouve-t-on ces résultats ?

c. Quelle est la valeur moyenne de S_z ?

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.

b. Quels sont les résultats possibles de cette mesure (on rappelle que cela « peut aider » de diagonaliser la matrice de l'opérateur concerné) ?

c. Avec quelle probabilité trouve-t-on ces résultats ?

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.

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 $\langle n\ell m|[H, A]|n\ell m\rangle = 0$.

b. On choisit $A = \mathbf{r}\cdot\mathbf{p}$. Calculer les commutateurs $[E_k, A]$ et $[E_p, A]$.

c. En déduire une relation entre $\langle n\ell m|E_k|n\ell m\rangle$ et $\langle n\ell m|E_p|n\ell m\rangle$.

d. Conclure que $\langle n\ell m|1/r|n\ell m\rangle = 1/n^2$.

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 :

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

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

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).

b. Calculer l'adjoint de l'opérateur $p_r r^a$, où a est un entier positif ou nul.

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

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

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

e. Calculer l'adjoint de l'opérateur $p_r r^2 p_r^2$ et en déduire que $\langle p_r r^2 p_r^2\rangle = (1/2)\langle p_r[r^2, p_r]p_r\rangle$.

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.

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

a. Calculer $\langle rH_r \rangle$. 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.

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

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

c. En déduire la valeur moyenne de r.