Université Paris-Saclay 2023-2024
LDD3 / Magistère de Physique Fondamentale Première session

Examen de Mécanique Quantique I : corrigé

Lundi 8 janvier 2024

1 Quelques questions de cours

On considère la matrice suivante, exprimée dans la base canonique $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & \mathrm{i} & 1 \\ -\mathrm{i} & 2 & \mathrm{i} \\ 1 & -\mathrm{i} & 2 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

1/ $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, hermitique.

2/ $\{\hat{A}\}$ n'est pas un E.C.O.C. car $\hat{A}$ est certes hermitique, mais ses valeurs propres sont 0 et 3, et 3 est double (dégénérée).

3/ On obtient par exemple

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + \mathrm{i}|2\rangle - |3\rangle) \quad \text{assoc. à } 0 \tag{2}$$

$$|b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |3\rangle) \quad \text{assoc. à } 3 \tag{3}$$

$$|c\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle - 2\mathrm{i}|2\rangle - |3\rangle) \quad \text{aussi assoc. à } 3, \tag{4}$$

orthonormés, et $\hat{A}$ est diagonale dans la base $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$.

4/ En supposant que le système étudié se trouve dans l'état $|2\rangle$, on effectue une mesure de $\mathcal{A}$.

- Résultats possibles : une des valeurs propres de $\hat{A}$, c-à-d 0 ou 3.
- Probas associées :
  - à la valeur propre 0 : $P_{|2\rangle}(0) = |\langle a|2\rangle|^2 = \frac{1}{3}$
  - à la valeur propre 3 : $P_{|2\rangle}(3) = |\langle b|2\rangle|^2 + |\langle c|2\rangle|^2 = 1 - P_{|2\rangle}(0) = \frac{2}{3}$
- État du système après la mesure :
  - si on a obtenu 0 : $|\text{après}\rangle = |a\rangle$
  - si on a obtenu 3 : $|\text{après}\rangle = \frac{|b\rangle\langle b| + |c\rangle\langle c|}{\sqrt{P_{|2\rangle}(3)}}|2\rangle = \mathrm{i}|c\rangle \sim |c\rangle$

2 Problème : Mécanique quantique en deux dimensions spatiales

Partie I : Particule quantique dans un potentiel radial en 2D

1/ L'éq. de Schrödiger stationnaire s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\rho,\varphi) + V(\rho)\Psi(\rho,\varphi) = E\Psi(\rho,\varphi) \tag{5}$$

et en utilisant la forme explicite du laplacien en coordonnées polaires :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi(\rho,\varphi) + V(\rho)\Psi(\rho,\varphi) = E\Psi(\rho,\varphi) \tag{6}$$

2/ $\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}|\Psi|^2\rho d\rho d\varphi = 1$. On obtient

$$\int_0^{\infty}|R(\rho)|^2\rho d\rho = 1 \qquad \text{et} \qquad \int_0^{2\pi}|\Phi|^2 d\varphi = 1\,. \tag{7}$$

3/ Normalisation : $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$

4/ Seules les valeurs $m \in \mathbb{Z}$ sont autorisées car $\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$.

5/ $\int_0^{+\infty}|u(\rho)|^2 d\rho = 1$.

6/ $u(0) = 0$.

7/ En insérant Ψ (éqs 4 et 5 de l'énoncé) dans l'équation de Schrödinger, on obtient

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(\rho) + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m^2 - \frac{1}{4}\right)u(\rho) + V(\rho)u(\rho) = Eu(\rho)\,. \tag{8}$$

8/ L'éq. (6) est de type éq. de Schrödinger pour une particule à une dimension sur la demi-droite $\rho \geqslant 0$ avec la condition $u(0) = 0$ et le potentiel effectif

$$V_m(\rho) = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m^2 - \frac{1}{4}\right) + V(\rho)\,. \tag{9}$$

Le premier terme est répulsif (centrifuge) pour tout $m \neq 0$.

9/ Les solutions de l'équation de Schrödiger radiale 2D dépendent de m car le potentiel $V_m(\rho)$ dépend de m. Pour chaque valeur de m, il peut y avoir plusieurs solutions, indicées par n. Ainsi, $u_{n,m}(\rho)$. Les énergies (valeurs propres) dépendent donc a priori aussi des deux nombres quantiques : $E_{n,m}$.

10/ Dégénérescences essentielles (ou systématiques) : l'équation dépend de m^2, donc pour m et $-m$, on aura les mêmes énergies propres et fonctions d'onde radiales propres. C'est une dégénérescence essentielle qui résulte simplement du fait que $V(\rho)$ est un potentiel central non orienté, c'est-à-dire que les rotations dans les sens direct et les rotations dans le sens indirect autour de l'axe (Oz) sont équivalentes (symétriques). Seuls les états avec $m = 0$ ne présentent pas de dégénérescence essentielle. On s'attend donc à ce que les niveaux d'énergie soient deux fois dégénérés (sauf pour $m = 0$). (Remarque : selon la forme explicite du potentiel $V(\rho)$, le degré de dégénérescence peut être plus élevé, comme on le verra dans la 2^e^ partie, en raison d'une symétrie cachée éventuelle...).

11/ On constate facilement que $\hat{L}_z\Phi_m(\varphi) = \hbar m\Phi_m(\varphi)$. Ainsi, le nombre quantique m est associé au moment cinétique de la particule dans le plan.

12/ Oui, L_z et H commutent. En effet, le hamiltonien peut être réécrit comme suit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\hbar^2}L_z^2\right) + V(\rho) \tag{10}$$

L'opérateur L_z commute d'évidence avec L_z^2 et aussi avec tout opérateur qui n'agit que sur la variable ρ. La commutation de H avec L_z découle de l'invariance du potentiel $V(\rho)$ sous les rotations d'axe (Oz). On sait que L_z est le générateur des rotations autour de l'axe (Oz), et l'invariance du hamiltonien sous les rotations autour d'(Oz) implique $[H, L_z] = 0$.

13/ Un ensemble complet d'observables compatibles est un ensemble d'observables qui commutent (compatibles) et qui détermine d'une façon unique une base orthonormée de vecteurs propres communs. Dans le cas présent : $\{H, L_z\}$. Le fait qu'on ait deux observables est lié au fait qu'on a deux nombres quantiques.

Partie II : Potentiel coulombien bidimensionnel

14/ États liés : énergies négatives.

15/ Potentiel effectif :

$$V_m(\rho) = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m^2 - \frac{1}{4}\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\rho}. \tag{11}$$

Pour $m \neq 0$, le potentiel diverge vers $+\infty$ quand $\rho \to 0^+$. Pour $m = 0$, le potentiel diverge vers $-\infty$ quand $\rho \to 0^+$. Quand $\rho \to +\infty$, le potentiel tend vers 0.

16/ $l(l+1) \to \left(m - \frac{1}{2}\right)\left(m + \frac{1}{2}\right) = \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)$. Il ne s'agit que d'une correspondance formelle car ℓ est entier positif tandis que $m - \frac{1}{2}$ est demi-entier, et peut être positif ou négatif.

17/ On rappelle que les énergies des états liés de l'atome d'hydrogène à 3D sont

$$E_n = -\frac{\mathrm{Ry}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3 \dots \tag{12}$$

avec $n = n' + \ell$ où, à n fixé, $n' = 1, 2, 3 \dots, n$ et $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

18/ Par la substitution $\ell \to m - \frac{1}{2}$, on obtient

$$E_{m,n'} = -\mathrm{Ry}\frac{1}{\left(m - \frac{1}{2} + n'\right)^2} \tag{13}$$

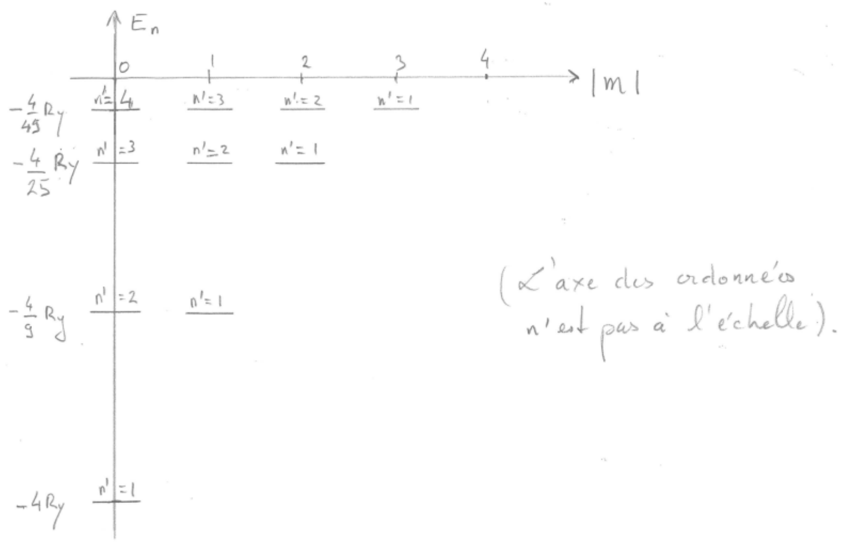
ou encore

$$E_n = -\frac{\mathrm{Ry}}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2} = -\frac{4}{(2n+1)^2}\,\mathrm{Ry} \tag{14}$$

où $n = m + n' - 1$, et à n fixé, on a $n' = 1, 2, 3 \dots, n+1$ et $m = 0, 1, 2, \dots, n$.

19/ Il suffit d'utiliser le fait que $E_{-m,n'} = E_{m,n'}$ (et on a donc en fait $E_{m,n'} = -\mathrm{Ry}\frac{1}{\left(|m| - \frac{1}{2} + n'\right)^2}$).

20/ Pour toute valeur de $|m| \neq 0$, on a deux états (cette dégénérescence-là correspond à celle qu'on avait trouvée dans la partie I).



Remarque : la dégénérescence supplémentaire, “accidentelle”, est en fait due à une symétrie cachée, liée au vecteur de Laplace-Runge-Lenz (voir par exemple D. G. W. Parfitt & M. E. Portnoi, The two-dimensional hydrogen atom revisited, *Journal of Mathematical Physics*, **43**, 4681 (2002), ou encore X. L. Yang, M. Lieber & F. T. Chan, The Runge–Lenz vector for the two-dimensional hydrogen atom, *American Journal of Physics*, 59, 231 (1991)).

21/ Le terme proportionnel à la valeur propre est $\sim E\rho^{\alpha}$, et avec $\alpha \geqslant 1/2$, ce terme tend vers zéro quand $\rho \to 0^+$. On peut donc l'écarter. L'équation de Schrödinger simplifiée s'écrit alors

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(\rho) + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m^2 - \frac{1}{4}\right)u(\rho) = 0. \tag{15}$$

En prenant $u(\rho) = \rho^{\alpha}$ on obtient

$$\alpha(\alpha - 1) = m^2 - \frac{1}{4}. \tag{16}$$

Cette équation a deux solutions : $\alpha = \frac{1}{2} \pm m$. Pour $m \geqslant 0$, on prend $\alpha = \frac{1}{2} + m$. Pour $m < 0$, on prend $\alpha = \frac{1}{2} - m$. De cette façon, on a toujours $\alpha \geqslant 1/2$ comme souhaité.

22/ Dans la limite $\rho \to \infty$, l'éq. de Schrödinger se réduit à

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(\rho) = Eu(\rho) \tag{17}$$

avec $E < 0$. On la résout par $u(\rho) \sim e^{-\kappa\rho}$, avec $\kappa = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$. On écarte la solution $\sim e^{+\kappa\rho}$ car u doit être normalisable.

23/ Quelques lignes de calcul sont nécessaires. En substance, il suffit d'insérer l'expression $u(\rho) \sim \rho^{(m+\frac{1}{2})}e^{-\kappa\rho}$ dans l'équation de Schrödinger radiale 2D. On obtient (par exemple) :

$$u'(\rho) = \left(\frac{m + \frac{1}{2}}{\rho} - \kappa\right)u(\rho) \tag{18}$$

donc

$$u''(\rho) = \left(\left(\frac{m + \frac{1}{2}}{\rho} - \kappa\right)^2 - \frac{m + \frac{1}{2}}{\rho^2}\right)u(\rho) \tag{19}$$

d'où (insertion dans l'éq. de Schrödinger radiale 2D) :

$$\left(\frac{m + \frac{1}{2}}{\rho} - \kappa\right)^2 - \frac{m + \frac{1}{2}}{\rho^2} - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} + \frac{2\mu e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\rho} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} = 0. \tag{20}$$

L'identification des termes proportionnels à ρ^0, ρ^{-1} et ρ^{-2} donne respectivement

$$\kappa^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2} = 0 \tag{21}$$

$$-2\left(m + \frac{1}{2}\right)\kappa + \frac{2\mu e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} = 0 \tag{22}$$

$$\left(m + \frac{1}{2}\right)^2 - m - \frac{1}{2} - m^2 + \frac{1}{4} = 0. \tag{23}$$

L'équation (23) est automatiquement satisfaite. L'équation (21) redonne $\kappa = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$, avec quoi l'équation (22) donne

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \times \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2}\frac{\mu^2}{\hbar^4}\frac{1}{\left(m + \frac{1}{2}\right)^2} = -\frac{e^4\mu}{8\epsilon_0^2 h^2}\frac{1}{\left(m + \frac{1}{2}\right)^2} = -\mathrm{Ry}\frac{1}{\left(m + \frac{1}{2}\right)^2}. \tag{24}$$

Ce sont les niveaux d'énergie qu'on a trouvés plus haut correspondant à $n' = 1$. Ce sont les plus basses énergies à m donné.

24/ Normalisation : il faut calculer l'intégrale $\int_0^{+\infty} \rho^{2\alpha} e^{-2\kappa\rho} d\rho$. On la réécrit en posant $t = 2\kappa\rho$:

$$\int_0^{+\infty} \rho^{2\alpha} e^{-2\kappa\rho} d\rho = \frac{1}{2\kappa} \frac{1}{(2\kappa)^{2\alpha}} \int_0^{+\infty} t^{2\alpha} e^{-t} dt = \frac{(2\kappa)^{2\alpha+1}}{\Gamma(2\alpha+1)} \,. \tag{25}$$

La fonction normalisée s'écrit donc

$$u(\rho) = \sqrt{\frac{(2\kappa)^{2\alpha+1}}{\Gamma(2\alpha+1)}} \times \rho^{\alpha} e^{-\kappa\rho}. \tag{26}$$

Comme $\alpha = m + \frac{1}{2}$, $2\alpha = 2m + 1$ et donc $\Gamma(2\alpha + 1) = \Gamma(2m + 2) = (2m + 1)!$, on peut aussi écrire

$$u(\rho) = \frac{(2\kappa)^{m+1}}{\sqrt{(2m+1)!}} \times \rho^{m+\frac{1}{2}} \, e^{-\kappa\rho}. \tag{27}$$

25/ Pour la probabilité :

$$P(\rho) = \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi \times \frac{|u(\rho)|^2}{\rho} \times \rho = |u(\rho)|^2 = \frac{(2\kappa)^{2m+2}}{(2m+1)!} \, \rho^{2m+1} \, e^{-2\kappa\rho}. \tag{28}$$