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

# Examen de Mécanique Quantique I

Lundi 8 janvier 2024

*Durée de l'épreuve : 3 heures*
*L'utilisation de documents, téléphones portables...est interdite.*
*Les différentes parties du sujet sont indépendantes.*

## 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**/ Expliquez pourquoi $\hat{A}$ peut représenter une observable physique $\mathcal{A}$.

**2**/ L'ensemble $\{\hat{A}\}$ est-il un E.C.O.C. ? Expliquez votre réponse.

**3**/ Obtenez un ensemble de kets orthonormés $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$ dans lequel $\hat{A}$ est diagonale.

**4**/ En supposant que le système étudié se trouve dans l'état $|2\rangle$, on effectue une mesure de $\mathcal{A}$. Quels sont les résultats possibles et les probabilités associées ? Quel est l'état du système après la mesure ?

## 2 Problème : Mécanique quantique en deux dimensions spatiales

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

Nous considérons une particule quantique de masse $\mu$ dans un plan bidimensionnel soumise à un potentiel central $V(\rho)$, où $\rho$ est la distance à l'origine. Le plan peut être paramétré avec les coordonnés cartésiennes $\{x, y\}$ ou, alternativement, avec les coordonnées polaires $\{\rho, \varphi\}$. La relation entre les deux paramétrisations est la suivante :

$$\begin{cases} x = \rho\cos\varphi\,, \\ y = \rho\sin\varphi\,. \end{cases} \tag{2}$$

Il sera utile de savoir que l'opérateur laplacien peut être écrit en coordonnées cartésiennes ou polaires comme suit :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{3}$$

**1**/ Écrivez l'équation de Schrödinger stationnaire en coordonnées polaires.

**2**/ Nous proposons la factorisation suivante de la fonction d'onde :

$$\Psi(\rho, \varphi) = R(\rho) \times \Phi(\varphi). \tag{4}$$

Donnez la condition de normalisation de $\Psi(\rho, \varphi)$ et déduisez celles de $R(\rho)$ et $\Phi(\varphi)$.

**3**/ Nous prenons $\Phi_m(\varphi) \propto e^{im\varphi}$. Normalisez $\Phi_m(\varphi)$.

**4**/ Expliquez quelles valeurs de $m$ sont autorisées. Montrez que cette condition donne un ensemble infini de fonctions orthonormées.

**5**/ Nous introduisons maintenant la fonction d'onde radiale réduite $u(\rho)$, qui est définie dans un problème bidimensionnel comme suit :

$$R(\rho) = \frac{u(\rho)}{\sqrt{\rho}}. \tag{5}$$

Quelle est la condition de normalisation pour $u(\rho)$ ?

**6**/ Les théorèmes généraux stipulent que $R(\rho)$ doit toujours être fini. Quelle est la valeur de $u(\rho)$ pour $\rho = 0$ ?

**7**/ Montrez que la fonction $u(\rho)$ satisfait l'équation aux valeurs propres suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(\rho) + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m^2 - \frac{1}{4}\right)u(\rho) + V(\rho)u(\rho) = Eu(\rho) \tag{6}$$

**8**/ Interprétez l'équation obtenue à la question précédente comme une équation de Schrödinger pour une particule unidimensionnelle, en précisant le domaine de définition de $\rho$ et l'expression du potentiel effectif $V_m(\rho)$ qui dépend de $m$. Nous appellerons cette équation l'*équation de Schrödinger radiale 2D*.

**9**/ Les solutions de l'équation de Schrödinger radiale 2D sont caractérisées par deux nombres quantiques, $n$ et $m$, de sorte que les fonctions propres et les énergies propres seront notées

$$u_{n,m}(\rho) \quad \text{et} \quad E_{n,m}. \tag{7}$$

Quelle est l'origine des deux nombres quantiques ?

**10**/ Dans l'étude du potentiel central tridimensionnel, nous avons introduit le concept de *dégénérescence essentielle*. Voyez-vous une dégénérescence essentielle dans cette version bidimensionnelle du problème ?

**11**/ Donnez une interprétation physique au nombre quantique $m$. Il peut être utile de rappeler que la composante $z$ de l'opérateur du moment angulaire $\hat{L}_z$ a la forme suivante en coordonnées cartésiennes ou polaires :

$$\hat{L}_z = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial y} + i\hbar y\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{8}$$

**12**/ Est-ce que $\hat{L}_z$ commute avec le hamiltonien du problème ? Pouvez-vous donner une interprétation géométrique du résultat ?

**13**/ Rappelez la définition d'un ensemble complet d'observables compatibles, et donnez-en un pour ce problème.

---

**Partie II : Potentiel coulombien bidimensionnel**

Nous considérons maintenant le cas spécifique d'un potentiel coulombien attractif :

$$V(\rho) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\rho}, \tag{9}$$

où $e > 0$ est la charge du proton et $\epsilon_0$ est la constante diélectrique du vide. L'objectif est de caractériser les états liés de ce potentiel central bidimensionnel.

**14/** Les états liés de ce potentiel ont-ils des énergies négatives ou positives ?

**15/** Écrivez le potentiel effectif $V_m(\rho)$ associé à ce problème spécifique. Faites un tracé qualitatif pour $m = 0$ et pour $m \neq 0$. Dites pourquoi dans la suite nous pouvons n'étudier que $m \geqslant 0$.

L'équation (6) de Schrödinger radiale 2D associée à ce problème a des analogies formelles avec l'équation de Schrödinger radiale 3D pour l'atome d'hydrogène que l'on rappelle ici :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(\rho) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu\rho^2}u(\rho) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\rho}u(\rho) = Eu(\rho) \tag{10}$$

**16/** Montrez que la correspondance formelle entre les deux équations est donnée par le remplacement $\ell \to m - \frac{1}{2}$. Expliquez pourquoi la correspondance n'est que formelle.

**17/** On écrit parfois que les énergies des états liés de l'atome d'hydrogène à 3D pour une valeur donnée de $\ell$ sont données par

$$E_{n',\ell} = -\mathrm{Ry}\,\frac{1}{(\ell+n')^2}, \qquad \text{avec} \quad \mathrm{Ry} = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}. \tag{11}$$

Quelles valeurs de $n'$ sont possibles ?

**18/** La correspondance formelle obtenue ci-dessus, $\ell \to m - \frac{1}{2}$, peut être utilisée pour obtenir les énergies correctes des états liés de notre équation de Schrödinger radiale 2D pour $m \geqslant 0$. Déduisez des questions précédentes les énergies des états liés du problème bidimensionnel que nous étudions.

**19/** Comment pouvez-vous déterminer les énergies des états liés pour $m < 0$ ?

**20/** Présentez dans un diagramme clair les niveaux d'énergie que nous venons de déterminer. Mettez en évidence les dégénérescences essentielles et les dégénérescences accidentelles.

Nous passons maintenant à la caractérisation des fonctions d'onde associées aux états liés que nous venons de déterminer.

**21/** Notre premier objectif est de déterminer le comportement de $u(\rho)$ pour $\rho \to 0^+$. Posons que ce comportement est $\sim \rho^\alpha$ avec $\alpha \geqslant 1/2$ afin d'éviter des singularités à l'origine de la fonction d'onde radiale $R(\rho)$. Nous nous attendons à ce que $\alpha$ dépende de $m$.

Le coefficient $\alpha$ peut être obtenu en étudiant l'équation de Schrödinger pour $u(\rho)$ près de l'origine. Vous pouvez la simplifier en conservant (i) le terme cinétique et (ii) le terme le plus divergent pour $\rho \to 0^+$ du potentiel effectif $V_m(\rho)$. Vous devriez aussi écarter le terme proportionnel à la valeur propre : pourquoi ? Déterminez une équation du second degré pour $\alpha$ et résolvez-la. Laquelle des deux solutions devez-vous retenir ? Discutez explicitement les cas $m > 0$, $m = 0$ et $m < 0$.

**22/** Notre deuxième objectif est de déterminer le comportement de $u(\rho)$ pour $\rho \to \infty$. Montrez que la fonction d'onde doit décroître comme $u(\rho) \sim e^{-\kappa\rho}$ en négligeant tout terme de $V_m(\rho)$ qui décroît vers zéro pour $\rho \to \infty$. Donnez l'expression de $\kappa$.

**23/** Désormais, dans les trois dernières questions, considérez juste le cas $m \geqslant 0$. Montrez que

$$u(\rho) \propto \rho^\alpha e^{-\kappa\rho} \tag{12}$$

est une solution de l'équation de Schrödinger radiale 2D. Identifiez la valeur propre associée et vérifiez qu'il s'agit d'une des valeurs propres obtenues précédemment.

**24/** Normalisez la fonction d'onde radiale réduite. L'expression de la fonction gamma d'Euler peut être utilisée :

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1}e^{-t}dt, \quad \Gamma(n) = (n-1)! \tag{13}$$

**25/** Quelle est la probabilité $P(\rho)d\rho$ qu'une particule se trouve à une distance comprise dans la plage infinitésimale $[\rho, \rho + d\rho]$ ? Vérifiez la normalisation de $P(\rho)$ et tracez cette fonction.