Examen partiel - MQ1 : corrigé

2023-2024

1 Evolution temporelle des probabilités de mesure

(L. Mazza)

1. $\forall\, i, j \in \{1 \dots d\}\,, \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$
2. Relation de fermeture : $\sum_{j=1}^{d} |j\rangle\langle j| = I$
3. Équation de Schrödinger : $i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$
4. $|\Psi(t)\rangle = \sum_j \mathrm{e}^{-i\frac{E_j t}{\hbar}} \times \langle j|\Psi(0)\rangle \times |j\rangle$
5. $p_j(t) = |\langle j|\Psi(t)\rangle|^2 = \left|\langle j|\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle\right|^2 = |\langle j|\Psi(0)\rangle\rangle|^2$: pas de dépendence temporelle.
6. Réponse possible: $|1\rangle$. Mais une réponse plus complète est $\frac{\langle 1|\Psi(0)\rangle}{|\langle 1|\Psi(0)\rangle|}|1\rangle$. Les deux sont acceptables.
7. Interprétation fréquentiste de la mécanique quantique. L'expérimentateur prépare $N \gg 1$ copies du même système quantique dans le même état décrit par le même vecteur d'état $|\Psi(0)\rangle$. La même observable est mesurée au temps t sur chaque copie, et l'on peut reconstruire les probabilités d'obtenir les E_j au temps t à partir de l'ensemble des résultats obtenus.
8. $\hat{A} = a\,(|1\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|)$
9. Les valeurs propres et vecteurs propres associés sont :

$$a_1 = a \qquad |a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|1\rangle + |3\rangle) \tag{1}$$

$$a_2 = 0 \qquad |a_2\rangle = |2\rangle \tag{2}$$

$$a_3 = -a \qquad |a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|1\rangle - |3\rangle) \tag{3}$$

10. $a_1 = a$, $a_2 = 0$, $a_3 = -a$.
11. Partons de l'expression

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = \mathrm{e}^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-i\omega_1 t}}{2}\,|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|2\rangle - \frac{\mathrm{e}^{+i\omega_1 t}}{2}\,|3\rangle, \tag{4}$$

où l'on a posé $\omega_1 = E_1/\hbar$. Alors

$$p_{a_i}(t) = |\langle a_i|\Psi(t)\rangle|^2$$

donne

$$p_{a_1}(t) = \frac{1}{8}\left|\mathrm{e}^{-i\omega_1 t} - \mathrm{e}^{+i\omega_1 t}\right|^2 = \frac{1}{2}\sin^2(\omega_1 t) \tag{5}$$

$$p_{a_2}(t) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2} \tag{6}$$

$$p_{a_3}(t) = \frac{1}{8}\left|\mathrm{e}^{-i\omega_1 t} + \mathrm{e}^{+i\omega_1 t}\right|^2 = \frac{1}{2}\cos^2(\omega_1 t) \tag{7}$$

(M. Langer 2023)

2] Potentiel Delta

Partie 1 : $V(x) = -\alpha\,\delta(x)$, $\alpha > 0$

1] $[V] = ML^2T^{-2}$, $[\delta(x)] = [x]^{-1} = L^{-1}$

d'où $[\alpha] = ML^3T^{-2}$

2] Discontinuité infinie de V => seule la f.o. est continue.

Eq. de Schrödinger stationnaire :

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\phi = 0 \quad \text{où } V(x) = -\alpha\,\delta(x)$$

$$\downarrow$$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \left(\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\phi(x) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\delta(x)\,\phi(x) \right) = 0$$

$$\downarrow$$

$$\phi'(\varepsilon) - \phi'(-\varepsilon) + \frac{2m}{\hbar^2}E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx\,\phi(x) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0) = 0$$

$$\varepsilon \to 0 \downarrow$$

$$\phi'(0^+) - \phi'(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0) \quad ✓$$

3] Résolution sur $\mathbb{R}^-$:

↳ $V(x) = 0$ pour $x < 0$

on a $\phi_-'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi_- = 0$, on pose $\rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$

=> $\phi_-'' - \rho^2\phi_- = 0$. Solutions $\phi_-(x) = A e^{\rho x} + B e^{-\rho x}$

$A, B \in \mathbb{C}$

Résolution sur $\mathbb{R}^+$:

↳ $V(x) = 0$ pour $x > 0$

=> on a de même $\phi_+(x) = C e^{\rho x} + D e^{-\rho x}$

$C, D \in \mathbb{C}$

ϕ bornée => $B = 0 = C$

d'où $\phi(x) = \begin{cases} A\,e^{\rho x} \\ D\,e^{-\rho x} \end{cases}$ sur $\begin{cases} \mathbb{R}^- \\ \mathbb{R}^+ \end{cases}$

4] Raccordement en $x = 0$: $\phi(x)$ est continue

=> $\phi(0^-) = \phi(0^+) \iff A = D$

d'où $\phi(x) = A\,e^{-\rho|x|}$

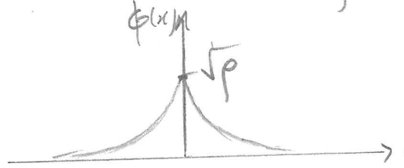
Normalisation de ϕ => $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2\,dx = 1$

i.e. $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-2\rho|x|}\, dx = 1$

$$\Leftrightarrow |A|^2\left[\int_{-\infty}^{0} e^{2\rho x}\, dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-2\rho x}\, dx\right] = 1$$

$$\Leftrightarrow |A|^2\left(\left[\frac{e^{2\rho x}}{2\rho}\right]_{-\infty}^{0} - \left[\frac{e^{-2\rho x}}{2\rho}\right]_{0}^{+\infty}\right) = 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{|A|^2}{\rho} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\rho}$$ ($\times$ terme de phase globale sans importance)



5) On a $\phi(x) = \sqrt{\rho}\begin{cases} e^{\rho x} \\ e^{-\rho x}\end{cases}$ sur $\begin{cases}\mathbb{R}^- \\ \mathbb{R}^+\end{cases} \Rightarrow \phi'(x) = \begin{cases}\rho^{3/2} e^{\rho x} \\ -\rho^{3/2} e^{-\rho x}\end{cases}$ sur $\begin{cases}\mathbb{R}^- \\ \mathbb{R}^+\end{cases}$

donc $\phi'(0^+) - \phi'(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0) \Rightarrow -2\rho^{3/2} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\rho^{1/2}$

d'où $\rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \overset{\text{déf de } \rho}{=} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow E = E_D = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ est l'unique solution.

On pose aussi $\rho_D = \sqrt{-\frac{2mE_D}{\hbar^2}} = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$.

6) <u>Largeur Δx de l'état $\phi(x)$:</u> (cf. annexe de l'énoncé)

$\Delta x^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$ où $\langle x^n\rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^n |\phi(x)|^2$

Ici $\langle x\rangle = 0$ par parité (x impaire, $|\phi(x)|^2$ paire)

et $$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \rho_D x^2 e^{-2\rho_D|x|} = \rho_D\left(\int_{-\infty}^{0} x^2 e^{2\rho_D x} dx + \int_{0}^{+\infty} x^2 e^{-2\rho_D x} dx\right)$$

$$= \rho_D \times \frac{d^2}{d\beta^2}\left(\int_{-\infty}^{0} e^{\beta x} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-\beta x} dx\right)\Big|_{\beta = 2\rho_D} = \rho_D \frac{d^2}{d\beta^2}\left(\frac{2}{\beta}\right)\Big|_{\beta = 2\rho_D}$$

$$= \frac{1}{2\rho_D^2}$$

d'où $\Delta x = \dfrac{1}{\sqrt{2}\,\rho_D}$

7) $\tilde{\Phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{\phi}\left(\frac{p}{\hbar}\right)$ où $\hat{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx$

$$\hat{\phi}(k) = \frac{\sqrt{\rho_D}}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\infty}^{0} e^{(\rho_D - ik)x} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-(\rho_D + ik)x} dx \right)$$

$$= \sqrt{\frac{\rho_D}{2\pi}} \left(\frac{1}{\rho_D - ik} + \frac{1}{\rho_D + ik} \right)$$

$$= \sqrt{\frac{\rho_D}{2\pi}} \frac{2\rho_D}{\rho_D^2 + k^2}$$

d'où $\tilde{\Phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi p_0}} \times \frac{2p_0^2}{p^2 + p_0^2}$ avec $p_0 = \hbar \rho_D$

8) <u>Largeur Δp de l'état $\tilde{\Phi}(p)$</u>

$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ où $\langle p^n \rangle = \int_{-\infty} p^n |\tilde{\Phi}(p)|^2 dp$

Comme précédemment,

$$\langle p \rangle = 0 \text{ par parité}$$

et $\langle p^2 \rangle = \frac{4p_0^4}{2\pi p_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \frac{p^2}{(p^2 + p_0^2)^2}$; posons $u = \frac{p}{p_0}$

$$= \frac{2p_0^2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du \frac{u^2}{(1+u^2)^2}$$

$$\underset{\text{annexe}}{=} \frac{p_0^2}{\pi} \left[\arctan u \right]_{-\infty}^{+\infty} = p_0^2$$

d'où $\Delta p = p_0 = \hbar \rho_D$

9) $\Delta x \Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}\rho_D} \times \hbar \rho_D = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}$ $\Rightarrow$ l'état satisfait la relation de Heisenberg (sans la saturer).

Partie 2 : états liés dans un puits double Delta

Ici, $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[g_1 \delta(x+a) + g_2 \delta(x-a)\right]$

1) Partons de l'éq. stationnaire : $H\phi = E\phi$ est ici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi + V\phi = E\phi \qquad (\text{avec } E<0)$$

Appliquons la transformation $x \longmapsto -x$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(-x)^2}\phi(-x) + V(-x)\phi(-x) = E\phi(-x)$$

$$\Leftrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(-x) + V(-x)\phi(-x) = E\phi(-x)$$

Donc, si $V(x)$ est paire, i.e. si $V(-x) = V(x)$, les deux fonctions $\phi(x)$ et $\phi(-x)$ satisfont la même equation.

D'où $\left.\begin{array}{ll} \phi_+(x) = \phi(x) + \phi(-x) & (\text{paire}) \\ \text{et } \phi_-(x) = \phi(x) - \phi(-x) & (\text{impaire}) \end{array}\right\}$ sont toutes deux solution.

Dans la suite, on prend $g_1 = g_2 = -g < 0$, donc V est paire.

$\Rightarrow$ on cherchera des solutions de parité bien définie.

2) Solution paire :

Dans chaque région $x<-a$, $|x|<a$, $x>a$, on a $V(x)=0$ et $H\phi_+ = E\phi_+$ se résume à $\phi_+'' - K^2\phi_+ = 0$ où $K = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$.

Formellement, les solutions sont

$$(S) \quad \phi_+(x) = \begin{cases} \alpha_+ e^{Kx} + \alpha_- e^{-Kx} \\ \beta_+ e^{Kx} + \beta_- e^{-Kx} \\ \gamma_+ e^{Kx} + \gamma_- e^{-Kx} \end{cases} \text{pour} \begin{cases} x<-a \\ x<|a| \\ x>a \end{cases}, \quad \text{avec} \left.\begin{array}{c} \alpha_+, \alpha_- \\ \beta_+, \beta_- \\ \gamma_+, \gamma_- \end{array}\right\} \in \mathbb{C}$$

La normalisabilité de $\phi_+(x)$ impose $\alpha_- = 0 = \gamma_+$

La parité de $\phi_+(x)$ impose $\alpha_+ = \gamma_- = \alpha$ et $\beta_+ = \beta_- = \frac{\beta}{2}$

de sorte que

$$\phi_+(x) = \begin{cases} \alpha e^{Kx} \\ \beta \cosh Kx \\ \alpha e^{-Kx} \end{cases} \text{pour} \begin{cases} x<-a \\ x<|a| \\ x>a \end{cases}$$

3/ Continuité de $\phi_+(x)$

- en $x=-a$: $\phi_+(-a) = \alpha e^{-Ka} = \beta \cosh Ka$
- en $x=+a$: $\phi_+(a) = \beta \cosh Ka = \alpha e^{-Ka}$ (redondant, car ϕ_+ paire)

4/ $$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \left(\phi_+'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\phi_+ \right) dx = 0$$

$$\Rightarrow \quad \phi_+'(a+\varepsilon) - \phi_+'(a-\varepsilon) + \frac{2mE}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\phi_+(x)\,dx + g\,\phi_+(a) = 0$$

$\varepsilon \to 0$

$$\phi_+'(a^+) - \phi_+'(a^-) = -g\,\phi_+(a)$$

cf. éq (5)

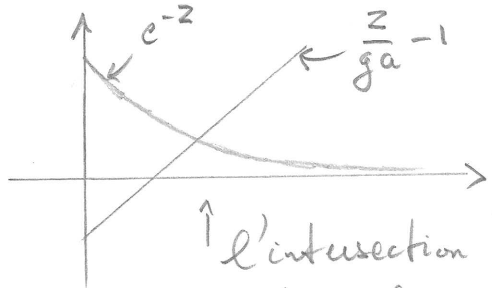
$$\Leftrightarrow \quad -\alpha K e^{-Ka} - \beta K \sinh Ka = -g\alpha e^{-Ka}$$

cf. éq(6)

$$K\beta \cosh Ka + K\beta \sinh Ka = g\beta \cosh Ka$$

$$K e^{Ka} = g\,\frac{e^{Ka} + e^{-Ka}}{2} \quad \Leftrightarrow \quad e^{-2Ka} = \frac{2K}{g} - 1 \quad \checkmark$$

5/ Posons $z = 2Ka$



l'intersection existe pour toute valeur finie de ga !

6/ Solution impaire :

Reprenons la solution (S) ci-dessus (question 2).

Normalisabilité de $\phi_-(x) \Rightarrow \alpha_- = 0 = \gamma_+$

$\phi_-(x)$ impaire $\Rightarrow \begin{cases} \alpha_+ = -\gamma_- = -\alpha \\ \beta_- = -\beta_+ = -\frac{\beta}{2} \end{cases}$

d'où $\phi_-(x) = \begin{cases} -\alpha e^{Kx} \\ \beta \sinh Kx \\ \alpha e^{-Kx} \end{cases}$ pour $\begin{cases} x < -a \\ |x| < a \\ x > a \end{cases}$

7/ Comme à la question 4 ci-dessus, on obtient

$$\phi_-'(a+\varepsilon) - \phi_-'(a-\varepsilon) + \frac{2mE}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\phi_-(x)\,dx + g\,\phi_-(a) = 0$$

$\varepsilon \to 0$

$$\phi_-'(a^+) - \phi_-'(a^-) = -g\,\phi_-(a)$$

i.e. $\quad -\alpha K e^{-Ka} - \beta K \cosh Ka = -g\alpha e^{-Ka}$ $\quad (*)$

et cette fois-ci, la continuité de $\phi_-(x)$ en $x = a$ conduit à

$$\beta \sinh Ka = \alpha e^{-Ka}$$

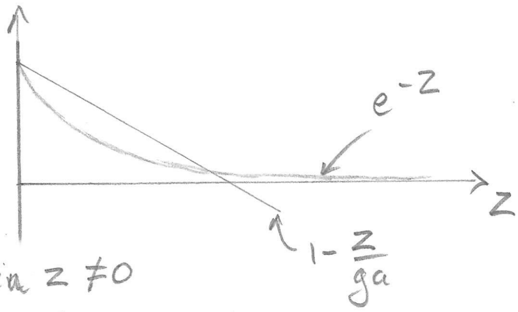
donc $(*) \Leftrightarrow \quad \beta K \sinh Ka + \beta K \cosh Ka = g\beta \sinh Ka$

$$\Leftrightarrow \quad K e^{Ka} = \frac{g}{2}\left(e^{Ka} - e^{-Ka}\right)$$

$$K = \frac{g}{2}\left(1 - e^{-2Ka}\right)$$

$$e^{-2Ka} = 1 - \frac{2K}{g} \qquad \checkmark$$

Posons $z = 2Ka$, on a $e^{-z} = 1 - \frac{z}{ga}$



87 Cette fois-ci, l'intersection non-triviale en $z \neq 0$ n'existe que si la pente de $1 - \frac{z}{ga}$ n'est pas trop négative,

i.e. $\quad |f'(z)| < \left| \frac{de^{-z}}{dz}\Big|_{z=0} \right|$ $\quad$ où $f(z) = 1 - \frac{z}{ga}$

i.e. $\quad \frac{1}{ga} < 1 \quad \Rightarrow \quad a > \frac{1}{g}$. Les deux fonctions δ ($\delta(x+a)$ et $\delta(x-a)$) doivent donc être distantes d'au-moins $2a > \frac{2}{g}$ pour que la solution impaire existe.

(Rem: l'intersection $z = 0$ n'est pas acceptable, car $z = 0 \Leftrightarrow 2Ka = 0$ i.e. $K = 0 \Leftrightarrow E = 0$, mais avec $K = 0$, on aurait une éq. de Schrödinger $\phi_-'' = 0$ qui donne des solutions non-normalisables)