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

Examen partiel de Mécanique Quantique I

Lundi 30 octobre 2023

Durée de l'épreuve : 3 heures
L'utilisation de documents, téléphone portable. . .est interdite.
Les différentes parties du sujet sont indépendantes.
On pourra trouver des rappels utiles en annexe.

1 Evolution temporelle des probabilités de mesure

Considérons un système quantique décrit par un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimension d. Le hamiltonien $\hat{H}$ ne dépend pas du temps et on considère une base orthonormée de vecteurs propres $\mathcal{B} = \{|\, j\,\rangle\}_{j=1}^{d}$ associés aux valeurs propres E_j de $\hat{H}$, qui sont non dégénérées.

1/ Utiliser la notation de Dirac pour exprimer le fait que $\mathcal{B}$ est orthonormée.

2/ Utiliser la notation de Dirac pour exprimer la relation de fermeture, c'est-à-dire le fait que $\mathcal{B}$ est complète.

3/ Rappeler l'équation qui décrit l'évolution temporelle d'un état quantique $|\,\Psi(0)\,\rangle$ en supposant qu'aucune mesure n'est effectuée.

4/ Considérons un état initial générique $|\,\Psi(0)\,\rangle$ à l'instant $t = 0$: choisir une base opportune et donnez l'état à tout instant t sous l'hypothèse qu'aucune mesure n'est effectuée pendant l'évolution temporelle.

5/ A l'instant t une mesure d'énergie est effectuée : donner la probabilité $p_j(t)$ d'obtenir la valeur E_j à l'instant t. Quelle est la dépendance temporelle de cette probabilité ?

6/ Quel est l'état du système après la mesure si on mesure E_1 ?

7/ Si la mécanique quantique donne uniquement la probabilité de mesurer une énergie E_j, comment valider expérimentalement ses prédictions ?

Nous spécifions maintenant notre discussion à un système quantique avec $d = 3$ et avec des énergies $E_1 > 0$, $E_2 = 0$ et $E_3 = -E_1 < 0$. Un physicien effectue une mesure d'une observable $\hat{A}$ qui, dans la base $\mathcal{B}$, a la forme suivante :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad a \in \mathbb{R}^+. \tag{1}$$

8/ Donner l'expression de $\hat{A}$ dans la notation de Dirac.

9/ Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\hat{A}$.

10/ Quels sont les résultats possibles d'une mesure de $\hat{A}$? Nous les appelons a_1, a_2 et a_3, en les classant par ordre décroissant.

Considérons l'état initial

$$|\,\Psi(0)\,\rangle = \frac{1}{2}|\,1\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\,2\,\rangle - \frac{1}{2}|\,3\,\rangle \tag{2}$$

11/ Calculer la probabilité $p_{a_i}(t)$ de mesurer la valeur a_i pour $i = 1, 2, 3$ au temps t pour l'état initial donné par l'équation 2.

---

2 Potentiel Delta

Les deux parties peuvent être traitées indépendamment.

Partie 1 : Potentiel d'impureté

À une dimension, nous étudions l'équation de Schrödinger stationnaire décrivant une impureté localisée à l'origine. Celle-ci est modélisée par un potentiel Delta de Dirac attractif : $V(x) = -\alpha\,\delta(x)$ où α est une constante réelle positive. On cherche ici le ou les états liés, donc d'énergie $E < 0$, d'une particule sans spin de masse m. On décrira l'état quantique de la particule par la fonction d'onde $\phi(x)$.

1/ Quelle est la dimension physique de la constante α ?

2/ Le potentiel étudié possède une discontinuité infinie en $x = 0$. Quelles sont les conditions que cela implique sur la fonction d'onde et sa dérivée ? En intégrant l'équation de Schrödinger stationnaire sur l'intervalle $[-\epsilon, +\epsilon]$ ($\epsilon \ll 1$), montrer que les dérivées de $\phi(x)$ de part et d'autre de la singularité sont reliées à la valeur de la fonction d'onde en $x = 0$ par

$$\frac{d\phi}{dx}(0^+) - \frac{d\phi}{dx}(0^-) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\phi(0). \tag{3}$$

3/ Résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire satisfaite par $\phi(x)$ sur $\mathbb{R}^-$ puis sur $\mathbb{R}^+$. On posera $\rho = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Quelle conséquence impose le fait que $\phi(x)$ est nécessairement bornée ?

4/ Écrire la relation qui découle des conditions de raccordement de $\phi(x)$ en $x = 0$. En déduire que la fonction d'onde s'écrit

$$\phi(x) = A\mathrm{e}^{-\rho|x|}.$$

Déterminer A à partir de la normalisation de $\phi(x)$, et représenter graphiquement $\phi(x)$.

5/ À l'aide de la relation (3), montrer qu'il n'existe qu'un seul état lié, dont on précisera l'énergie E_D en fonction de α, m et $\hbar$. Par la suite, on notera aussi $\rho_D = \sqrt{-2mE_D/\hbar^2}$. Exprimer ρ_D en fonction de α, m et $\hbar$.

6/ Déterminer la largeur Δx de l'état $\phi(x)$.

7/ En vous référant à l'annexe si besoin, montrer qu'en représentation impulsion l'état lié s'écrit

$$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi p_0}}\,\frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2},$$

où $p_0 = \hbar\rho_D$.

8/ En déduire la largeur Δp de l'état $\tilde{\phi}(p)$ en représentation impulsion (on pourra consulter l'annexe).

9/ Donner l'expression du produit $\Delta x \Delta p$ et commenter le résultat.

Partie 2 : États liés dans un double puits Delta

On considère ici le potentiel donné par

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[g_1\delta(x+a) + g_2\delta(x-a)\right] , \tag{4}$$

et on s'intéresse aux **états liés** de ce potentiel. Ce type de potentiel permet par exemple de construire un modèle simple à une dimension pour décrire les états de plus basse énergie de la molécule H_2^+, le cation dihydrogène[1].

1/ Montrer que si $V(x)$ est une fonction paire, alors les solutions $\phi(x)$ de l'équation de Schrödinger stationnaire sont de parité bien définie. **Dans toute la suite, on prendra** $g_1 = g_2 = -g < 0$**.**

2/ Montrer qu'une solution paire possible est

$$\phi_+(x) = \begin{cases} \alpha\, e^{\kappa x}, & x < -a, \\ \beta\, \cosh \kappa x, \quad \text{pour} & |x| < a, \\ \alpha\, e^{-\kappa x}, & x > a \end{cases} \tag{5}$$

où α et β sont des constantes inconnues, et κ un paramètre que l'on précisera.

3/ Montrer que la continuité de ϕ conduit à

$$\beta \cosh \kappa a = \alpha\, e^{-\kappa a}. \tag{6}$$

4/ En intégrant l'équation de Schrödinger stationnaire par exemple[2] sur $[a-\epsilon, a+\epsilon]$ ($\epsilon \ll 1$) et en utilisant l'équation (6), montrer que

$$e^{-2\kappa a} = \frac{2\kappa}{g} - 1. \tag{7}$$

5/ Résoudre l'équation précédente graphiquement et montrer qu'il existe toujours une solution paire.

6/ Montrer qu'une solution impaire possible est

$$\phi_-(x) = \begin{cases} -\alpha\, e^{\kappa x}, & x < -a, \\ \beta\, \sinh \kappa x, \quad \text{pour} & |x| < a, \\ \alpha\, e^{-\kappa x}, & x > a \end{cases} \tag{8}$$

7/ De la même manière qu'à la question 4, montrer qu'ici

$$e^{-2\kappa a} = 1 - \frac{2\kappa}{g}, \tag{9}$$

et résoudre cette équation graphiquement.

8/ À quelle distance l'une de l'autre doivent se trouver les deux fonctions δ pour qu'une solution impaire existe ?

---

[1] Voir par exemple ≪ Delta-Function Model. I. Electronic Energies of Hydrogen-Like Atoms and Diatomic Molecules ≫, A. Frost, *J. Chem. Phys.*, 25, 1150–1154 (1965), et ≪ The calculation of exchange forces : General results and specific models ≫, T. C. Scott et al., *J. Chem. Phys.*, 99, 2841–2854 (1993).

[2] La parité de la fonction d'onde garantit qu'une seule condition suffit.

Annexe – rappels

- Tranformée de Fourier :

$$\hat{f}(k) = \mathrm{TF}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{-ikx}\, dx.$$

- Relation entre $\phi(x)$ et $\tilde{\phi}(p)$:

$$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \hat{\phi}\,(p/\hbar) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{-i\frac{px}{\hbar}}\, dx.$$

- Largeurs en x et p :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad \text{et} \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}.$$

- Valeurs moyennes :

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\phi(x)|^2\, dx \quad \text{et} \quad \langle g(p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g(p) |\tilde{\phi}(p)|^2\, dp.$$

- On donne la primitive suivante :

$$\int \frac{u^2}{(1+u^2)^2}\, du = -\frac{u}{2(1+u^2)} + \frac{\arctan u}{2}$$