ECPM 1ère année

Examen de Mécanique Quantique

14 novembre 2013

Durée de l'épreuve : 2h

Tous les documents ainsi que les calculatrices sont interdits.

Le barème proposé est uniquement indicatif.

---

1. Questions de cours notées sur 9 points

a) **[3 pts]** Soit $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 \; e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{p}.\mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)}$ la fonction d'onde décrivant une particule libre de masse m et de quantité de mouvement $\mathbf{p}$, Ψ_0 étant une constante. Montrer qu'elle vérifie l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

b) **[1.5 pts]** Soit $\varphi(x)$ la fonction d'onde décrivant une particule se déplaçant sur l'axe des x. Quel sens physique donne-t-on à l'intégrale $\displaystyle\int_{\mathbb{R}} x|\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x$? Justifiez votre réponse.

c) **[1.5 pts]** Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles. Pourquoi la propriété d'hermiticité d'un opérateur est fondamentale en mécanique quantique ?

d) **[2 pts]** Soit $|\Psi(t)\rangle$ l'état, à l'instant t, d'un système quantique dont on suppose que l'hamiltonien $\hat{H}$ ne dépend pas du temps. Soit $\hat{A}$ un opérateur quelconque indépendant du temps. Démontrer le théorème d'Ehrenfest :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi(t)|[\hat{A}, \hat{H}]|\Psi(t)\rangle.$$

e) **[1 pt]** D'après l'équation de Schrödinger, la valeur moyenne de l'énergie cinétique de l'électron $1s$ dans un atome hydrogénoïde de numéro atomique Z s'écrit $\dfrac{1}{2}(Z\alpha)^2 m_e c^2$ où m_e est la masse de l'électron, c la vitesse de la lumière dans le vide et $\alpha \approx 1/137$ la constante de structure fine. Que peut-on conclure quand à la validité de l'équation de Schrödinger pour les molécules contenant des éléments lourds (Z élevé) ? Détaillez votre réponse.

2. Problème noté sur 11 points : états de spin de l'électron en présence d'un champ magnétique

La rotation de l'électron sur lui même ("spin" en anglais) peut être mise en évidence en plongeant, par exemple, un atome d'hydrogène dans un champ magnétique uniforme de norme B_0. On s'intéresse ici aux états quantiques $|+\rangle$ et $|-\rangle$ correspondant au mouvement de spin de l'électron autour de l'axe des z dans le sens direct et indirect, respectivement, comme illustré dans la Fig. 1. Les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace des états quantiques de spin de l'électron.

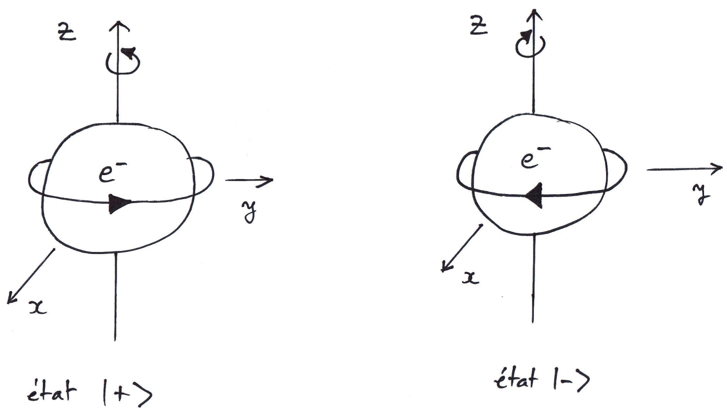

Figure 1: Représentation schématique des états de spin $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

a) **[1 pt]** On admet que si le champ magnétique est dirigé suivant l'axe des z, l'hamiltonien de l'électron est représenté comme suit dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\left[\hat{H}\right] = \begin{bmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar\omega_0}{2} \end{bmatrix},$$

où $\omega_0 = \dfrac{eB_0}{m_e}$ est la pulsation dite de Larmor (e est la charge élémentaire de l'électron (en valeur absolue) et m_e sa masse). On suppose qu'à l'instant $t = 0$ l'électron est dans l'état de spin $|+\rangle$. Quelle est la probabilité que l'électron soit dans l'état $|-\rangle$ lorsque $t > 0$. Justifiez votre réponse.

b) **[3 pts]** On suppose dans la suite du problème que le champ magnétique est désormais dirigé suivant l'axe des x. Dans ce cas, l'hamiltonien de l'électron est représenté comme suit dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\left[\hat{H}\right] = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \end{bmatrix}.$$

Vérifier que les états propres de $\hat{H}$ s'écrivent $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle - |-\rangle\Big)$ et $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle + |-\rangle\Big)$, qu'ils sont associés respectivement aux énergies $-\frac{\hbar\omega_0}{2}$ et $\frac{\hbar\omega_0}{2}$, et qu'ils forment une base orthonormée.

c) **[2 pts]** Soit $|\Psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle$ l'état quantique de l'électron à l'instant t écrit dans la base des états propres de l'hamiltonien. Démontrer que $C_1(t) = C_1(0)\, e^{\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t}$ et $C_2(t) = C_2(0)\, e^{-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t}$.

d) **[1 pt]** On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'électron est dans l'état $|+\rangle$. En déduire $C_1(0)$ et $C_2(0)$.

e) **[2 pts]** Montrer, en calculant $\mathcal{P}_+(t) = |\langle +|\Psi(t)\rangle|^2$, que l'état de spin de l'électron oscille entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ avec une pulsation égale à celle de Larmor.

f) **[2 pts]** Expliquer, à l'aide du théorème d'Ehrenfest, pourquoi la valeur moyenne de l'énergie de l'électron liée à son spin $\langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle$ ne varie pas au cours du temps. Quelle est sa valeur ?

Problème : états de spin de l'électron en présence d'un champ magnétique

a) $\hat{H}|+\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle \Rightarrow |+\rangle$ est un état propre de l'hamiltonien.

$\boxed{\text{C'est donc un état stationnaire}}$ $\Rightarrow$ si $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ alors $|\psi(t)\rangle$ reste colinéaire à $|+\rangle$ (puisque l'hamiltonien ne dépend pas du temps) et donc orthogonal à $|-\rangle$. La probabilité d'être dans l'état $|-\rangle$, qui vaut $|\langle -|\psi(t)\rangle|^2$, est donc nulle.

b) • Pour $\vec{B} = B_0\vec{e}_x$, $\hat{H}|+\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle$ et $\hat{H}|-\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle$

donc $\hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{H}|+\rangle - \hat{H}|-\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle - \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle\right)$

soit $\hat{H}|1\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\underbrace{\left(|+\rangle - |-\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}}}_{|1\rangle}$

$\rightarrow \boxed{\hat{H}|1\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|1\rangle}$

De même $\hat{H}|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{H}|+\rangle + \hat{H}|-\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle + \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle\right)$

soit $\boxed{\hat{H}|2\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|2\rangle}$

• Comme $\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1$ et $\langle +|-\rangle = 0$

il vient $\langle 1|2\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle +|+\rangle + \cancel{\langle +|-\rangle} - \cancel{\langle -|+\rangle} - \langle -|-\rangle\right)$

$\boxed{\langle 1|2\rangle = 0}$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle 1|1\rangle &= \tfrac{1}{2}(1+1) = 1\\ \langle 2|2\rangle &= \tfrac{1}{2}(1+1) = 1\end{aligned}}$$

c) $|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$

$\downarrow$

vérifie l'équation de Schrödinger dépendante du temps $\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$

soit $c_1(t)\underbrace{\hat{H}|1\rangle}_{-\frac{\hbar\omega_0}{2}|1\rangle} + c_2(t)\underbrace{\hat{H}|2\rangle}_{+\frac{\hbar\omega_0}{2}|2\rangle} = i\hbar\dot{c}_1|1\rangle + i\hbar\dot{c}_2|2\rangle$

d'où $\begin{cases} i\hbar\dot{c}_1 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}c_1 \\ i\hbar\dot{c}_2 = \frac{\hbar\omega_0}{2}c_2\end{cases}$

soit $\dot{c}_1 = \frac{i\omega_0}{2}c_1$ et $\dot{c}_2 = -i\frac{\omega_0}{2}c_2$

$\downarrow$ $\boxed{c_1(t) = c_1(0)e^{\frac{i\omega_0 t}{2}}}$ $\downarrow$ $\boxed{c_2(t) = c_2(0)e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}}}$

d) $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ or $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$

et $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$

donc $|1\rangle + |2\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}|+\rangle$ soit

$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \Rightarrow \boxed{c_1(0) = c_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}}$

e) $\mathcal{P}_+(t) = |\langle + | \psi(t)\rangle|^2$

avec $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |2\rangle$

Comme $\langle + | 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = \langle + | 2\rangle$

il vient $\langle + | \psi(t)\rangle = \frac{1}{2} e^{i\omega_0 t/2} + \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t/2}$

soit $\langle + | \psi(t)\rangle = \cos(\omega_0 t/2)$

$$\rightarrow \mathcal{P}_+(t) = \cos^2(\omega_0 t/2) = \frac{1}{4}\left(e^{i\omega_0 t/2} + e^{-i\omega_0 t/2}\right)\left(e^{-i\omega_0 t/2} + e^{+i\omega_0 t/2}\right)$$
$$= \frac{1}{4}\Big[2 + \underbrace{e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}}_{2\cos\omega_0 t}\Big]$$

$$\boxed{\mathcal{P}_+(t) = \frac{1}{2}(1 + \cos\omega_0 t)}$$

L'électron oscille entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ avec une pulsation égale à celle de Larmor.

f) D'après le théorème d'Ehrenfest

$$\frac{d}{dt}\langle \psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi(t)|\underbrace{[\hat{H},\hat{H}]}_{0}|\psi(t)\rangle$$

donc $\boxed{\langle \psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|\hat{H}|\psi(0)\rangle} = \langle + |\hat{H}| + \rangle$

$$= \frac{\hbar\omega_0}{2}\langle + | - \rangle$$

soit $\boxed{\langle \psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = 0}$

Commentaire : on peut le vérifier facilement ici.

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t/2}\underbrace{(\hat{H}|1\rangle)}_{-\frac{\hbar\omega_0}{2}|1\rangle} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t/2}\underbrace{(\hat{H}|2\rangle)}_{\frac{\hbar\omega_0}{2}|2\rangle}$$

d'où

$$\langle \psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t/2}\langle \psi(t)|1\rangle + \frac{\hbar\omega_0}{2\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t/2}\langle \psi(t)|2\rangle$$

avec $\langle 1|\psi(t)\rangle = \dfrac{e^{i\omega_0 t/2}}{\sqrt{2}}$

et $\langle 2|\psi(t)\rangle = \dfrac{e^{-i\omega_0 t/2}}{\sqrt{2}}$

Ainsi

$$\langle \psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{4} + \frac{\hbar\omega_0}{4} = 0$$