ECPM 1ère année

Examen de Mécanique Quantique

janvier 2015

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]** Expliquer comment l'équation de Schrödinger indépendante du temps est obtenue à partir de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

b) **[2 pts]** Soient A une observable, $\hat{A}$ l'opérateur hermitien associé et $|\Psi\rangle$ un état quantique quelconque. Montrer que $\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ est un nombre réel. Quel est son sens physique ?

c) **[2 pts]** Soit $\varphi(x)$ la fonction d'onde décrivant une particule se déplaçant sur l'axe des x. Que vaut la fonction $(\hat{p}_x\varphi)(x)$, $\hat{p}_x$ étant l'opérateur impulsion ? On rappelle que $\langle\varphi|\hat{p_x}|\varphi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x\,\varphi(x)^*\dfrac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}$. Déduire de la question 1. b) qu'une particule décrite par une fonction d'onde réelle a, en moyenne, une impulsion nulle.

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

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

2. Problème noté sur 11 points : théorème d'Ehrenfest appliqué à l'étude des 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 aux mouvements de spin de l'électron autour de l'axe des z dans le sens direct et indirect, respectivement. Les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace des états quantiques de spin de l'électron. On admet que si le champ magnétique est dirigé suivant l'axe des x, l'hamiltonien de l'électron est représenté comme suit dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

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

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).

a) **[1 pt]** On suppose **dans tout le problème** qu'à l'instant $t = 0$ l'électron est dans l'état $|+\rangle$. Est-il *a priori* possible pour l'électron de passer dans l'état $|-\rangle$? Justifiez votre réponse.

b) **[1 pt]** Soit $|\Psi(t)\rangle = C_+(t)|+\rangle + C_-(t)|-\rangle$ l'état de l'électron au cours du temps. Que valent $C_+(0)$ et $C_-(0)$ d'après la question 2. a) ?

c) **[2 pts]** Montrer que $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = |C_+(t)|^2 + |C_-(t)|^2$. En utilisant la question 2. b) ainsi que le théorème d'Ehrenfest (voir question 1. d) appliqué à l'opérateur identité ($\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}$), montrer que $|C_-(t)|^2 = 1 - |C_+(t)|^2$.

d) **[2 pts]** Soit $\mathcal{P}_+(t) = |\langle+|\Psi(t)\rangle|^2$. Montrer que $\mathcal{P}_+(t) = |C_+(t)|^2$. À quoi correspond physiquement cette quantité ? Montrer l'égalité suivante en appliquant le théorème d'Ehrenfest à l'opérateur $\hat{A} = |+\rangle\langle+|$:

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_+(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}\omega_0}{2}\Bigg(C_+(t)C_-^*(t) - C_+^*(t)C_-(t)\Bigg).$$

e) **[2 pts]** Montrer, en appliquant le théorème d'Ehrenfest à l'opérateur $\hat{A} = |+\rangle\langle-|$ et en utilisant les questions 2. c) et 2. d), que $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Bigg(C_+^*(t)C_-(t)\Bigg) = -\dfrac{\mathrm{i}\omega_0}{2}\Bigg(2\mathcal{P}_+(t) - 1\Bigg)$. En déduire que $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Bigg(C_+(t)C_-^*(t)\Bigg) = -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Bigg(C_+^*(t)C_-(t)\Bigg)$.

f) **[1 pt]** Déduire des questions 2. d) et 2. e) que

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathcal{P}_+(t)}{\mathrm{d}t^2} = -\omega_0^2\Bigg(\mathcal{P}_+(t) - \frac{1}{2}\Bigg).$$

g) **[2 pts]** D'après la question 2. f), $\mathcal{P}_+(t)$ peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{P}_+(t) = \frac{1}{2} + a\cos(\omega_0 t) + b\sin(\omega_0 t),$$

où a et b sont des nombres réels à déterminer. Expliquer pourquoi, d'après les questions 2. b) et 2. d), $\mathcal{P}_+(0) = 1$ et $\left.\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{P}_+(t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} = 0$. En déduire l'expression finale de $\mathcal{P}_+(t)$ et commenter.

Exam ECPM. 2014_2015

Ehrenfest theorem applied to the study of the electron spin states in the presence of a magnetic field

a) $\hat{H}|+\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle$, therefore $|+\rangle$ is NOT an eigenvector of $\hat{H}$. Consequently $|+\rangle$ is not a stationary state $\rightarrow$ the electron may be in the state $|-\rangle$ for $t>0$.

b) $|\psi(0)\rangle = |+\rangle \rightarrow C_+(0) = 1$ and $C_-(0) = 0$

c) • $|\psi(t)\rangle = C_+(t)|+\rangle + C_-(t)|-\rangle$ thus leading to

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = C_+(t)\langle\psi(t)|+\rangle + C_-(t)\langle\psi(t)|-\rangle$$

where $\left.\begin{aligned}\langle +|\psi(t)\rangle &= C_+(t)\\ \langle -|\psi(t)\rangle &= C_-(t)\end{aligned}\right\}$ since $\langle+|-\rangle = 0$, $\langle+|+\rangle = \langle-|-\rangle = 1$

$\rightarrow$ $\langle\psi(t)|+\rangle = C_+^*(t)$

$\langle\psi(t)|-\rangle = C_-^*(t)$

therefore $\boxed{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = |C_+(t)|^2 + |C_-(t)|^2}$

• Ehrenfest theorem for $\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}$:

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

$\rightarrow$ $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = \langle+|+\rangle = 1$

$\rightarrow$ $\boxed{|C_-(t)|^2 = 1 - |C_+(t)|^2}$

d). $P_+(t) = |\underbrace{\langle+|\psi(t)\rangle}_{C_+(t)}|^2 \leftarrow$ probability of being in state $|+\rangle$ at time t

1/5

$$\boxed{P_+(t) = |C_+(t)|^2}$$

• Ehrenfest theorem for $\hat{A} = |+\rangle\langle+|$

$$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|+\rangle\langle+|\psi(t)\rangle = |C_+(t)|^2 = P_+(t)$$

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

$$\langle\psi(t)|+\rangle\langle+|\hat{H}|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\hat{H}|+\rangle\langle+|\psi(t)\rangle$$

$\langle\psi(t)|\hat{H}|+\rangle^*$ since $\hat{H}$ is hermitian

$$\rightarrow \frac{d}{dt}P_+(t) = \frac{1}{i\hbar}\left(C_+^*(t)\frac{\hbar\omega_0}{2}\underbrace{\langle\psi(t)|-\rangle^*}_{C_-(t)} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\underbrace{\langle\psi(t)|-\rangle}_{C_-^*(t)}C_+(t)\right)$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{dP_+(t)}{dt} = \frac{i\omega_0}{2}\left(C_+(t)C_-^*(t) - C_+^*(t)C_-(t)\right)} \quad \text{Eq.0}$$

e) Ehrenfest theorem applied to $\hat{A} = |+\rangle\langle -|$

$$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|+\rangle\langle -|\psi(t)\rangle = C_+^*(t)\,C_-(t)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right) = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\left[|+\rangle\langle -|, \hat{H}\right]|\psi(t)\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(\langle\psi(t)|+\rangle\underbrace{\langle -|\hat{H}|\psi(t)\rangle}_{\langle\psi(t)|\hat{H}|-\rangle^*} - \langle\psi(t)|\hat{H}|+\rangle\langle -|\psi(t)\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(C_+^*(t)\,\frac{\hbar\omega_0}{2}\,\langle\psi(t)|+\rangle^* - \frac{\hbar\omega_0}{2}\,\langle\psi(t)|-\rangle\,C_-(t)\right)$$

since $\hat{H}|-\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle$

therefore

$$\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right) = \frac{1}{i\hbar}\,\frac{\hbar\omega_0}{2}\left(C_+^*(t)\,C_+(t) - C_-^*(t)\,C_-(t)\right)$$

$$= -i\frac{\omega_0}{2}\left(|C_+(t)|^2 - |C_-(t)|^2\right)$$

according to questions 2c) and 2d)

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right) = -\frac{i\omega_0}{2}\left(2P_+(t) - 1\right)} \quad \text{Eq1}$$

• From Eq1 it comes

$$\left[\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right)\right]^* = +\frac{i\omega_0}{2}\left(2\underbrace{P_+^*(t)}_{P_+(t)} - 1\right) = -\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right)$$

Conclusion:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\left(C_+(t)\,C_-^*(t)\right) = -\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right)} \quad \text{Eq.2}$$

2-f) According to Eq.0,

$$\frac{d^2P_+(t)}{dt^2} = \frac{i\omega_0}{2}\left[\frac{d}{dt}\left(C_+(t)\,C_-^*(t)\right) - \frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right)\right]$$

$$\underset{\text{according to Eq.2}}{=} \frac{i\omega_0}{2}\times(-2)\,\frac{d}{dt}\left(C_+^*(t)\,C_-(t)\right)$$

which gives, according to Eq. 1,

$$\frac{d^2P_+(t)}{dt^2} = -i\omega_0\left(-\frac{i\omega_0}{2}\right)\left(2P_+(t) - 1\right)$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{d^2P_+(t)}{dt^2} = -\omega_0^2\left(P_+(t) - \frac{1}{2}\right)}$$

g) $P_+(t) = \frac{1}{2} + a\cos\omega_0 t + b\sin\omega_0 t$

$P_+(0) = |C_+(0)|^2 = 1 = \frac{1}{2} + a \rightarrow a = \frac{1}{2}$

$$\left.\frac{dP_+(t)}{dt}\right|_{t=0} = \frac{i\omega_0}{2}\left(C_+(0)\underbrace{C_-^*(0)}_{0} - C_+^*(0)\underbrace{C_-(0)}_{0}\right) = 0$$

$$= b\omega_0 \rightarrow b = 0$$

$$\boxed{P_+(t) = \frac{1}{2}\left(1 + \cos\omega_0 t\right)} \rightarrow \text{oscillation with frequency } \omega_0.$$