UNIVERSITE CADI AYYAD
FACULTE DES SCIENCES SEMLALIA
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
MARRAKECH

Année universitaire 2013/2014
(02 Juillet 2014)
Durée: 1h30
Section SMP/S4

MÉCANIQUE QUANTIQUE

Contrôle de rattrapage

Questions de cours (7 points)

1) a) Rappeler les hypothèses de Bohr utilisées pour expliquer le spectre de l'atome d'hydrogène.

b) Dans le modèle de Bohr, l'énergie obtenue pour un hydrogénoïde de numéro atomique Z a pour expression : $E = \frac{Z^2 . E_I}{n^2}$ avec $E_I = -13{,}6$ eV et $n=1,2,3,\ldots$

Faire application pour l'électron de l'ion sodium Na^{+10} dans son état fondamental et son 1[er] état excité.

2) On considère le paquet d'ondes (à une dimension) suivant :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{i\left[k.x - \omega(k).t\right]} dk$$

où g(k) est une fonction qui n'est appréciable que dans un intervalle étroit centré autour d'une valeur k_0 de k.

a) Définir la vitesse de phase v_φ et la vitesse de groupe v_g.

b) Le paquet d'onde étant associé à une particule libre de masse m. Donner la relation de dispersion. Déterminer v_φ et v_g puis comparer ces vitesses à la vitesse v de la particule. Conclure.

Exercice 1 : Particule dans un potentiel constant (6 points)

Une particule de masse m dans un espace à une dimension est soumise au potentiel U(x) indépendant du temps. On désigne par $|\Psi_t>$ le ket décrivant l'état quantique de la particule à l'instant t.

1) Ecrire l'équation de Schrödinger en représentation [x] ; équation que l'on notera Eq. (1).

2) L'équation (1) possède des solutions de la forme $\Phi(x).e^{-i\omega t}$ avec ω une constante réelle. Ecrire l'équation différentielle à laquelle obéit Φ(x).
On posera $E = \hbar\omega$ et notera cette équation : Eq. (2).

3) On considère le cas particulier où U(x) est constant = U_0.

a) On envisage d'abord le cas $E > U_0$, montrer que la solution générale de l'Eq. (2) s'écrit : $\Phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$; A et B sont des constantes
Préciser l'expression de k.

b) Cas où $E < U_0$. Montrer que la solution générale de l'Eq. (2) s'écrit :

$$\Phi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x} \quad ; \quad \text{C et D sont des constantes}$$

Donner l'expression de ρ.

c) Les solutions obtenues dans les deux cas précédents sont-elles physiquement acceptables ? Justifier votre réponse.

Rappel : $\langle x|P_x|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Psi(x)$ et $\langle x|U(X)|\Psi\rangle = U(x)\,\Psi(x)$

Exercice 2 : Système dans un état stationnaire (7 points)

L'espace des états d'un système physique est à trois dimensions et soit $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ une base orthonormée de cet espace. On définit un ket $|\varphi\rangle$ par :

$$|\varphi\rangle = \sqrt{2}\ |u_1\rangle + i\ |u_2\rangle + |u_3\rangle$$

1) a) Montrer que $|\varphi\rangle$ n'est pas normé à l'unité.

b) Définir, à partir de $|\varphi\rangle$, un ket $|\Phi\rangle$ normé à l'unité.

2) Calculer, dans la base $\{|u_i\rangle\}$ (i=1,2,3), la matrice représentant l'opérateur projecteur P sur le ket $|\Phi\rangle$. P est-il hermitique? Justifier.

3) On considère que les $|u_i\rangle$ (i=1,2,3) sont des vecteur propres de l'hamiltonien H du système associés tous à la même valeur propre E.

a) Déterminer l'état du système $|\Psi_t\rangle$ à un instant t sachant qu'à t=0, l'état du système est décrit par le ket $|\Phi\rangle$. $\Psi_t\rangle$ et $|\Phi\rangle$ sont-ils physiquement indiscernables? Justifier votre réponse.

b) Que peut-on conclure ?

4) Soit $\mathcal{A}$ une grandeur quelconque (indépendante du temps) associée au système.

a) Montrer que sa valeur moyenne n'évolue pas dans le temps.

b) En utilisant un résultat du cours que l'on précisera, justifier que l'observable A représentant $\mathcal{A}$ commute avec H.

Barème indicatif :

Cours (7 points) : 1) 2,5pts ; 2) 4,5pts.

Exercice 1 (6 points) : 1) 2pts ; 2) 1pts ; 3) 3pts.

Exercice 2 (7 points) : 1) 1,5pts ; 2) 2pts ; 3) 2pts ; 4) 1,5pts.

Questions de Cours

1°) a) Hypothèses de Bohr :

0,5 • Les seules orbites permises pour l'électron sont celles pour lesquelles le moment cinétique $\vec{\sigma}$ satisfait à : $\|\vec{\sigma}\| = n\hbar$ avec $n = 1, 2, 3, \dots$

0,5 • Emission d'un rayonnement seulement si l'électron passe d'une orbite permise d'énergie E_n supérieure à une orbite permise d'énergie $E_p < E_n$

La fréquence d'émission $\nu_{n\to p}$ est telle que : $h\nu_{n\to p} = E_n - E_p$

b) Hydrogénoïde : $E = \frac{Z^2}{n^2} E_I = E_n(Z)$

0,5 $Na^{+10} \rightarrow Z = 11$ et $E_I = -13{,}6\,eV$

0,5
• pour Etat fondamental : $n=1 \Rightarrow E_f = -\frac{(11)^2 \cdot 13{,}6}{1^2} = -1645{,}6\,eV$
• pour 1er état excité : $n=2 \Rightarrow E_{ex.} = -\frac{(11)^2 \cdot 13{,}6}{2^2} = -411{,}4\,eV$

2°) Paquet d'ondes : $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k)\, e^{i\varphi(k,t)}\, dk$

avec $\varphi(k,t) = k.x - \omega(k).t$

a) • vitesse de phase v_φ est telle : $\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \Rightarrow k\frac{dx}{dt} - \omega = 0$ 0,5

$\Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} \Rightarrow v_\varphi = \frac{\omega}{k}$ (= vitesse de la phase) 0,5

• vitesse de groupe v_g est telle que : $\frac{\partial \varphi}{\partial k} = 0 \Rightarrow x - \frac{d\omega}{dk} t = 0$ 0,5

$\Rightarrow x = \frac{d\omega}{dk} t$ soit $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ (= vitesse de l'enveloppe) 0,5

b) Particule libre $\Rightarrow E = E_{cin} = \frac{p^2}{2m}$ avec $p = \hbar k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

or $E = \hbar\omega \Rightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ 0,5

$\Rightarrow v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m}$ et $v_g = \frac{\hbar k}{m}$ 0,5

vitesse v de la particule : $p = mv$

$\Rightarrow v = \frac{\hbar k}{m}$ 0,5

0,5 C/C : la vitesse v de la particule s'identifie à la vitesse v_g de groupe.

Exercice 1 :

0,5

1°) Éq. de Schrödinger : $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi_t\rangle = H|\Psi_t\rangle$ avec $H = \frac{P^2}{2m} + U(X)$

En représentation $\{|x\rangle\}$, on a : $\langle x|\frac{P^2}{2m}|\Psi_t\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$

0,5 $\quad \langle x|U(X)|\Psi_t\rangle = U(x)\,\Psi(x,t)$ et $\langle x|\frac{d}{dt}|\Psi_t\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + U(x)\,\Psi(x,t) \qquad \text{éq.(1)}$$ 1

2°) $\Psi(x,t) = \phi(x)\,e^{-i\omega t}$, éq.(1) $\Rightarrow i\hbar(-i\omega)e^{-i\omega t}\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)e^{-i\omega t} + U(x)\phi(x)e^{-i\omega t}$

En simplifiant par $e^{-i\omega t}$ et en posant $\hbar\omega = E$, on aura :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + U(x)\,\phi(x) = E\,\phi(x) \qquad \text{éq.(2)}$$ 1

3°) $V = V_0 \Rightarrow$ l'éq.(2) s'écrit : $\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\phi(x) = 0$

Posons $\alpha = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \Longrightarrow \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \alpha\,\phi(x) = 0 \qquad$ éq. (3)

0,5

a) $E > V_0 \Rightarrow \alpha > 0$, la solution générale de l'éq.(3) est donc :

$$\phi(x) = A\,e^{i\sqrt{\alpha}\,x} + B\,e^{-i\sqrt{\alpha}\,x}$$ (A et B peuvent être complexes)

0,5

et on aura alors $k = \sqrt{\alpha} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$ 0,5

b) $E < V_0 \Rightarrow \alpha < 0$ soit $\alpha = -\beta$ avec $\beta > 0$, l'éq.(3) s'écrit donc :

0,5 $\quad \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) - \beta\,\phi(x) = 0 \Rightarrow$ solution générale : $\phi(x) = C\,e^{\sqrt{\beta}\,x} + D\,e^{-\sqrt{\beta}\,x}$

et on aura alors : $\rho = \sqrt{\beta} = \sqrt{-\alpha} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$. (C et D complexes)

0,5

c) Les solutions obtenues en a) et b) ne sont pas acceptables physiquement, car elles ne sont pas de carré sommables. 0,5

Exercice 2

$\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ base orthonormée

1) $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{3} c_i |u_i\rangle$ avec $c_1 = \sqrt{2}$, $c_2 = +i$ et $c_3 = 1$

0,5 a) Norme de $|\psi\rangle = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ avec $\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{3} |c_i|^2 = 2+1+1 = 4$

$\Rightarrow$ Norme de $|\psi\rangle = 2 \Rightarrow |\psi\rangle$ n'est pas normé à l'unité.

b) soit $|\phi\rangle$ un ket telle que $\langle\phi|\phi\rangle = 1 \Rightarrow \langle\phi|\phi\rangle = \dfrac{\langle\psi|\psi\rangle}{4}$

0,5 $\Rightarrow |\phi\rangle = \dfrac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} = \dfrac{|\psi\rangle}{2}$ (à un facteur de phase global près)

0,5 $|\phi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \dfrac{i}{2}|u_2\rangle + \dfrac{1}{2}|u_3\rangle = \sum_{i=1}^{3} a_i |u_i\rangle$

2) $P = |\phi\rangle\langle\phi| \Rightarrow P_{ij} = \langle u_i|P|u_j\rangle = \langle u_i|\phi\rangle\langle\phi|u_j\rangle = a_i \cdot a_j^*$

$i=j \Rightarrow P_{ii} = |a_i|^2 \Rightarrow P_{11} = 1/2$, $P_{22} = 1/4$ et $P_{33} = 1/4$

$i \neq j \Rightarrow P_{12} = -\dfrac{i}{2\sqrt{2}}$; $P_{13} = \dfrac{1}{2\sqrt{2}}$, $P_{23} = i/4$

$P_{21} = \dfrac{i}{2\sqrt{2}}$, $P_{31} = \dfrac{1}{2\sqrt{2}}$, $P_{32} = -i/4$

1,5

$$\Rightarrow (P) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & 1/2 & i/2 \\ 1/\sqrt{2} & -\frac{i}{2} & 1/2 \end{pmatrix}$$

que l'on peut aussi trouver par calcul matriciel du ket $|\phi\rangle$ par le bra $\langle\phi|$ ....

0,5 P^+ adjoint de $P \Rightarrow \langle u_i|P^+|u_j\rangle = \langle u_j|P|u_i\rangle^* \Rightarrow P^+_{ij} = P^*_{ji}$

Comme les éléments de la diagonale sont réels et les non-diagonaux sont conjugués les uns des autres $\Rightarrow P^+_{ij} = P_{ij}$ donc P est hermitique

0,25

3°) $H|u_i\rangle = E_i|u_i\rangle$ avec $E_1 = E_2 = E_3 = E$, $|\psi_{t=0}\rangle = |\phi\rangle$

a) $|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_{t=0}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\phi\rangle$ 0,25

or $H|\phi\rangle = \sum_i a_i H|u_i\rangle = \sum_i a_i E|u_i\rangle = E\sum_i a_i|u_i\rangle = E|\phi\rangle$.

$\Rightarrow |\phi\rangle$ est $\vec{v_p}$ de $H \Rightarrow F(H)|\phi\rangle = F(E)|\phi\rangle$

$\Rightarrow |\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\phi\rangle \Rightarrow$ $|\psi_t\rangle$ et $|\phi\rangle$ ne diffèrent que par un facteur de phase global $\Rightarrow$ ils sont indiscernables

0,5 0,5

4) $A \to A$ (indépendante du temps)

a) $\langle A \rangle_t = \langle \psi_t | A | \psi_t \rangle = \langle \phi | e^{\frac{i}{\hbar}Et} A e^{-\frac{i}{\hbar}Et} | \phi \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle$

0,5 $\rightarrow$ $= \langle \psi_{t=0} | A | \psi_{t=0} \rangle = \langle A \rangle_{t=0}$

$\Rightarrow \langle A \rangle$ n'évolue pas dans le temps $\Rightarrow \dfrac{d \langle A \rangle_t}{dt} = 0$.

b) Cours : $\dfrac{d\langle A \rangle_t}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \dfrac{\partial A}{\partial t} \rangle$ $\leftarrow$ 0,5

A ne dépend pas du temps $\Rightarrow \langle \dfrac{dA}{dt} \rangle = 0$

et d'après a) : $\dfrac{d\langle A \rangle_t}{dt} = 0$ donc $[A, H] = 0$ $\leftarrow$ 0,5

3) b) le système se trouve alors dans un état stationnaire

0,5 $\rightarrow$ En conséquence, toute grandeur (indépendante du temps) attachée au système n'évolue pas.