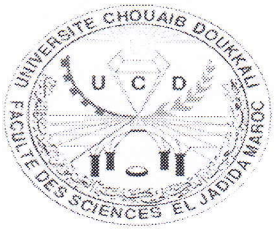


UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Module
Mécanique Quantique

AHMED JELLAL[1]

TRAVAUX DIRIGÉS AVEC SOLUTIONS

[1]jellal.ucd@gmail.com

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTMENT DE PHYSIQUE
EL JADIDA

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2015/2016
FILIÈRE : SMP
PHYSIQUE : M31
MODULE : MECANIQUE QUANTIQUE

SERIE 1

Exercice 1 : Les opérateurs $\hat{A}_i$, avec $(i = 1, \cdots, 6)$, sont définis comme suit

$$\hat{A}_1\psi(x) = [\psi(x)]^2, \qquad \hat{A}_4\psi(x) = x^2\psi(x) \tag{1}$$

$$\hat{A}_2\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}, \qquad \hat{A}_5\psi(x) = \sin(\psi(x)) \tag{2}$$

$$\hat{A}_3\psi(x) = \int_a^x \psi(x')dx', \qquad \hat{A}_6\psi(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \tag{3}$$

1- Lesquels sont linéaires?
2- Lesquels sont hermitiques (auto-adjoints)?

Exercice 2 : $\hat{A}, \hat{A}_1, \hat{A}_2$ étant des opérateurs linéaires, démontrer les relations suivantes :

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, \qquad (\hat{A}_1\hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_2^\dagger\hat{A}_1^\dagger, \qquad (\hat{A}_1 + \hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_1^\dagger + \hat{A}_2^\dagger \tag{4}$$

$$(\hat{A}^n)^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^n, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{5}$$

Exercice 3 : A l'instant $t = 0$, on considère un paquet d'onde $\psi(x, 0)$ à une dimension, de position moyenne x_0 et d'impulsion moyenne p_0, défini par

$$\psi(x, 0) = e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}} f(x - x_0), \qquad f(x) = Ce^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{6}$$

La transformée de Fourier de f a pour expression :

$$\tilde{f} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} f(x)dx = C\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}} e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2}} \tag{7}$$

1- Donner l'expression de $\tilde{\psi}(p, 0)$ et tracer l'allure de $|\psi(x, 0)|^2$ et $\left|\tilde{\psi}(p, 0)\right|^2$.
2- Le paquet d'onde évolue librement donc il est décrit par le Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{8}$$

Déterminer l'expression de $\tilde{\psi}(p, t)$.
3- Faire l'approximation à l'ordre 1 en p de H

$$H(p) \simeq H(p_0) + (p - p_0)\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{p=p_0} \tag{9}$$

pour en déduire l'expression de $\psi(x,t)$ et tracer la courbe de $|\psi(x,t)|^2$.
4- Même question que précédemment en poussant le développement jusqu'à l'ordre 2 en p.
5- Application à un électron ($m \simeq 10^{-30}kg$) et à un grain de poussière ($m \simeq 10^{-15}kg$). On prendra $\sigma = 10^{-6}m$.

Exercice 4 : Pour décrire une particule confinée sur un cercle S_1 (par exemple, un électron dans un petit fil conducteur circulaire appelé fil quantique), l'espace de Hilbert est l'espace des fonctions de carré sommable périodiques $L^2(S_1)$. Si le fil est de londueur L, c'est l'espace des fonctions vérifiant:

$$\psi(x+L) = \psi(x) \tag{10}$$

Montrer que les fonctions V_k définies par

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right), \qquad k \in \mathbb{Z} \tag{11}$$

forment une base orthonormée de cet espace.

Exercice 5 : Montrer que la distribution de Dirac δ peut être représentée comme la limite d'une lorentzienne :

$$y(x,\varepsilon) = \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}, \qquad \varepsilon > 0 \tag{12}$$

Il existe d'autres représentations possibles :

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\varepsilon}e^{\frac{-|x|}{\varepsilon}}, \qquad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}e^{\frac{-x^2}{\varepsilon^2}} \tag{13}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(\frac{x}{\varepsilon})}{x}, \qquad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{\pi}\frac{\sin^2(\frac{x}{\varepsilon})}{x^2} \tag{14}$$

Exercice 6 : Soit $\hat{A}$ un opérateur hermitique dont la valeur moyenne est définie par

$$\langle\hat{A}\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) A\psi(x) dx \tag{15}$$

Puisque l'opérateur et la fonction d'onde peuvent dépendre du temps, la valeur moyenne $\langle A\rangle$ sera généralement dépendante du temps.
1- Montrer que

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle \tag{16}$$

où $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ est le Hamiltonien du système.
2- Application aux observables $\hat{x}$ et $\hat{p}$ dans le cas d'une particule sans spin plonger dans un potentiel scalaire et stationnaire. Comparer le résultat obtenu aux équations classique de Hamilton-Jacobi

$$\frac{dx_{\mathsf{cl}}}{dt} = \frac{1}{m}p_{\mathsf{cl}}, \qquad \frac{dp_{\mathsf{cl}}}{dt} = -\frac{dV(x_{\mathsf{cl}})}{dx_{\mathsf{cl}}} \tag{17}$$

Indication : utiliser la relation suivante

$$[\hat{p}, V(\hat{x})] = (-i\hbar)\frac{dV(x)}{dx} \tag{18}$$

que l'on démontrera lorsque V est un polynôme.

Exercice 7 : Le but de l'exercice est de démontrer le lemme suivante. Si le commutateur de deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commute avec chacun d'eux

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \tag{19}$$

on trouve l'identité de Glauber

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \tag{20}$$

Pour cela, nous allons procéder par les étapes suivants :

1- Montrer que

$$[\hat{B}, \hat{A}^n] = n\hat{A^{n-1}}[\hat{B}, \hat{A}]. \tag{21}$$

En déduire

$$[\hat{B}, e^{-\hat{A}x}] = -xe^{-\hat{A}x}[\hat{B}, \hat{A}] \tag{22}$$

où x est un paramétre.

2- Considérons l'opérateur dépendant du paramétre x

$$\hat{f}(x) = e^{\hat{A}x} e^{\hat{B}x} \tag{23}$$

Déterminer l'expression de $\frac{d\hat{f}(x)}{dx}$ en fonction de $\hat{A}, \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]$ et $\hat{f}(x)$. On integre l'équation différentielle ainsi obtenue, en déduire l'identité (20).

Exercice 8 : Soit deux quantités physiques décrites par les opérateurs hermitiques $\hat{A}$ et $\hat{B}$.

1- En écrivant le commutateur de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sous la forme

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \tag{24}$$

montrer que $\hat{C}$ est un opérateur hermitique.

2- Démontrer la relation d'incertitude de Heisenberg sur ces deux observables

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| \tag{25}$$

SERIE 1
MQ

29/10/2015

Ex-1 :

1°/ Opérateur linéaire :

$\forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$; $\psi_1(x), \psi_2(x) \in \mathcal{H}$; on a

$$\hat{A}\left[\lambda_1\psi_1(x) + \lambda_2\psi_2(x)\right] = \lambda_1\hat{A}\psi_1(x) + \lambda_2\hat{A}\psi_2(x)$$

Applications :

(*) $\hat{A}_1\psi(x) = \left[\psi(x)\right]^2$

- $\hat{A}_1\left[\lambda_1\psi_1(x) + \lambda_2\psi_2(x)\right] = \left[\lambda_1\psi_1(x) + \lambda_2\psi_2(x)\right]^2$

$\neq$ $= |\lambda_1|^2\psi_1^2(x) - - -$

- $\lambda_1\hat{A}\psi_1(x) + \lambda_2\hat{A}\psi_2(x) = \lambda_1\left(\psi_1(x)\right)^2 + \lambda_2\left[\psi_2(x)\right]^2$

$\Rightarrow$ $\hat{A}_1$ est non-linéaire.

(**) $\hat{A}_2\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$

$$\hat{A}_2\left(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\right) = \frac{d}{dx}\left(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\right)$$

$$= \lambda_1\frac{d\psi_1}{dx} + \lambda_2\frac{d\psi_2}{dx}$$

$$= \lambda_1\hat{A}_2\psi_1 + \lambda_2\hat{A}_2\psi_2$$

$\Rightarrow$ $\hat{A}_2$ est linéaire

** de même pour A_3, A_4, A_6.

(**) $\hat{A}_5$ non-linéaire.

2°| Opérateur hermitique :

$$\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \Leftrightarrow \boxed{\langle\hat{A}\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle}$$

$$* \quad \langle\psi|\hat{A}_1|\varphi\rangle = \int \bar{\psi}(x)\,[\varphi(x)]^2\,dx$$

$$\left.\begin{aligned}\langle\hat{A}_1\varphi|\psi\rangle &= \int [\bar{\varphi}(x)]^2\,\psi(x)\,dx \\ \langle\varphi|\hat{A}_1|\psi\rangle &= \int \bar{\varphi}(x)\,[\varphi(x)]^2\,dx\end{aligned}\right\} \neq \quad \hat{A}_1 \text{ est non hermitique}$$

de m̂ pour A_3, A_5

(*) $\hat{A}_4\psi(x) = x^2\psi(x)$

$$\left.\begin{aligned}\langle\hat{A}_4\varphi|\psi\rangle &= \int x^2\,\bar{\varphi}(x)\,\psi(x)\,dx \\ \langle\varphi|\hat{A}_4|\psi\rangle &= \int \bar{\varphi}(x)\,x^2\psi(x)\,dx\end{aligned}\right\} = \Rightarrow \hat{A}_4 \text{ est hermitique}$$

de m̂ pour $\hat{A}_6$

Ex2 : on $\boxed{\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \langle\hat{A}\varphi|\psi\rangle}$

ou bien $\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$

Application $\boxed{(A^+)^+ = A}$

Posons $|x\rangle = A^+|\varphi\rangle \Rightarrow \langle x| = \langle\varphi|A^+$.

Or $\langle\varphi|x\rangle = \langle\varphi|A^+|\psi\rangle$

$= \langle x|\psi\rangle^*$.

$\langle x|\varphi\rangle = \langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|(A^+)^+|\psi\rangle^*$

$= \langle\varphi|x\rangle^*$

$= \langle\varphi|A|x\rangle^*$

$\Rightarrow \boxed{(A^+)^+ = A}$.

(x) $\underline{(\hat{A}_1\hat{A}_2)^+ = \hat{A}_2^+\hat{A}_1^+}$

Posons $|x\rangle = \hat{A}_1\hat{A}_2|\psi\rangle \Longrightarrow \langle x| = \langle\psi|\hat{A}_2^+\hat{A}_1^+$

$\langle\varphi|x\rangle = \langle\varphi|\hat{A}_1\hat{A}_2|\psi\rangle$

$= \langle\varphi|(\hat{A}_1\hat{A}_2)^+|\psi\rangle^*$.

$= \langle x|\psi\rangle^*$

$= \langle\psi|\hat{A}_2^+\hat{A}_1^+|\varphi\rangle^*$

$\Rightarrow \boxed{(\hat{A}_1\hat{A}_2)^+ = \hat{A}_2^+\hat{A}_1^+}$.

de même pour les autres.

Ex 3 :

$$\psi(x,0) = e^{\frac{i p_0 x}{\hbar}} f(x-x_0)$$

$$f(x) = C e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} f(x)\,dx = \frac{C\sigma}{\sqrt{\hbar}} e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2}}$$

1°/ (*) Expression de $\tilde{\psi}(p,0)$:

IF $\tilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x,0)\,dx$

Changement $x = x' + x_0$ $\Rightarrow dx = dx'$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p-p_0)\frac{x}{\hbar}} f(x-x_0)\,dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p-p_0)(x'+x_0)/\hbar} f(x')\,dx'$$

$$= \frac{e^{-i(p-p_0)x_0/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p-p_0)x/\hbar} f(x')\,dx'$$

$$\boxed{\tilde{\psi}(p,0) = e^{-i(p-p_0)x_0/\hbar}\, \tilde{f}(p-p_0)}$$

$$\Rightarrow \tilde{\psi}(p,0) = e^{-i(p-p_0)x_0/\hbar} \frac{C\sigma}{\sqrt{\hbar}} e^{-(p-p_0)^2\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}}$$

(**) Allure de $|\psi(x,0)|^2$, $|\tilde{\psi}(p,0)|^2$

$$|\psi(x,0)|^2 = f^2(x-x_0) = C^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} = C^2 e^{-\frac{(x-x_0)^4}{D x^4}}$$

$$|\tilde{\psi}(p,0)|^2 = \tilde{f}^2(p-p_0) = \frac{C^2\sigma^2}{\hbar} e^{-(p-p_0)^4\frac{\sigma^4}{4\hbar^4}} = \frac{C^2\sigma^2}{\hbar} e^{-\frac{(p-p_0)^4}{Dp^4}}$$

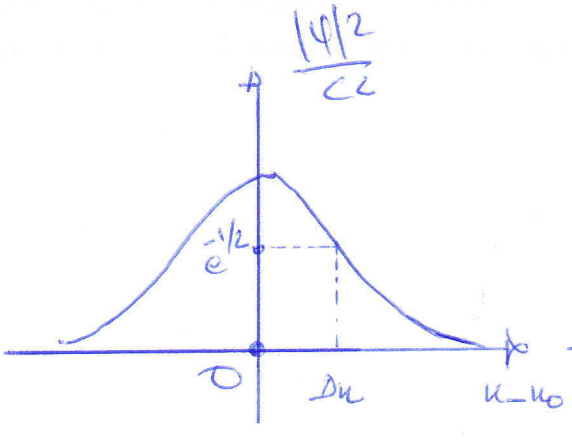
L'écart quadratique moyen

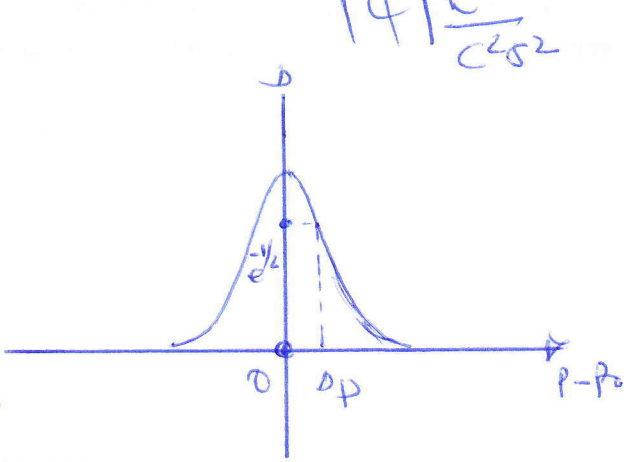
(Variance)

$$(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$\left.\begin{array}{l} \Delta x\big)_{\psi(x_0)} = \dfrac{\sigma}{\sqrt{2}} \\ \Delta p\big)_{\tilde{\psi}(p_0)} = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma} \end{array}\right\} \quad \text{Check home}$$

- Valeur moyenne de $\hat{x}$ est x_0
- $\hat{p}$ est p_0





2/ Hamiltonien particule libre

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

$$\tilde{\psi}(p,t) = ?$$

on a $$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle$$

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\tilde{\psi}\rangle$$

$$\hat{H}|\tilde{\psi}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle.$$

$$\Rightarrow \langle p|\hat{H}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \langle p| i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle$$

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)$$

$$= \text{---------}$$

Car $\hat{H}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$

$\longrightarrow$ Intégration $\tilde{\psi}(p,t) = e^{\frac{-iH(p)t}{\hbar}} \underbrace{\tilde{\psi}(p,0)}$

Voir question 1

3/ on a $$H(p) = H(p_0) + (p-p_0)\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{p=p_0}$$

$$= \frac{p_0^2}{2m} + (p-p_0)\frac{p_0}{m} = -\frac{p_0^2}{2m} + \frac{p\,p_0}{m}$$

Rappel $\begin{cases} p_0 = mv \\ E = \frac{1}{2}mv^2 \end{cases} \Rightarrow$ $\boxed{H(p) = -E + vp}$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\, \tilde{\psi}(x,t)\, dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\, e^{-iH(p)t/\hbar}\, \tilde{\psi}(p,0)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\, e^{-\frac{it}{\hbar}(-E+pv)}\, \tilde{\psi}(p,0)\, dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}}\, e^{-\frac{it}{\hbar}(-E+vp)}\, e^{-i(p-p_0)x_0/\hbar}\, c\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}}\, e^{-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}}\, dp$$

$$= e^{\frac{iEt}{\hbar}} \underbrace{\frac{\sigma\sigma}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\left[px - tvp - (p-p_0)x_0\right]}\, e^{-(p-p_0)^2\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}}\, dp}_{\psi(x-vt,0)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x,t) = e^{\frac{iEt}{\hbar}}\, \psi(x-vt,0)}$$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x-vt,0)|^2}$$ m̂ Courbe que $|\psi(x,0)|^2$

4° | Developpement à l'ordre 2.

$$H(p) = H(p_0) + (p-p_0)\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{p=p_0} + \frac{(p-p_0)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\right|_{p=p_0}$$

$$\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}$$

$$\left.\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\right|_{p=0} = \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{p}{2m}\right)_{p=p_0} = \frac{1}{2m}$$

$$\Rightarrow \quad H(p) = H(p_0) + (p-p_0)\frac{p_0}{2m} + \frac{(p-p_0)^2}{2m}$$

$$\Downarrow$$

in Calcul

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{\sigma^2}{\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}\right)^{1/2} \exp\left[\cancel{(x-x_0)^2} - \sigma^2 \frac{(x-x_0-vt)^2}{\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}} \right]$$

$$\Rightarrow \text{Variance} \quad \Delta(x(t)) = \left[\frac{\sigma^2}{2} + \frac{\hbar^2 t^2}{2m^2\sigma^2}\right]^{1/2}$$

$$= \left[\left(\Delta x(t=0)\right)^2 + \left(\frac{\Delta p(t=0)}{m} t\right)^2\right]^{1/2}$$

5° | Application numérique

Pour $\Delta x(t) = 10\, \Delta x(t=0)$

$$\Rightarrow \quad t = \frac{2m}{\hbar}\sqrt{99}\,(\Delta x(0))^2$$

$$\Delta x(0) = \sigma/\sqrt{2}.$$

- Electron $\quad t \simeq 2.10^{-7}$ s
- Poussière $\quad t = 2 \times 10^{+8}$ s $\simeq 6$ ans

Exercice 4 : Fonctions

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i k \frac{2\pi}{L} x} \quad , k \in \mathbb{Z}$$

(*) Orthogonalité :

$$\langle \varphi_k | \varphi_\ell \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L e^{i(\ell-k)\frac{2\pi x}{L}} dx$$

• Pour $\ell = k$ on a

$$\langle \varphi_k | \varphi_\ell \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L dx = \frac{1}{L} [x]_0^L$$

$$= 1 \Rightarrow \text{normé}$$

• Pour $\ell \neq k$.

on pose $\ell - k = m$, m entier

donc $$\langle \varphi_k | \varphi_\ell \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L e^{i m \frac{2\pi x}{L}} dx.$$

$$= \frac{1}{L} \frac{1}{i m \frac{2\pi}{L}} \left[e^{i m \frac{2\pi x}{L}} \right]_0^L$$

$$= \frac{1}{i m 2\pi} \left[e^{i m 2\pi} - 1 \right] = 0$$

Famille libre

- Donc $\langle \varphi_k | \varphi_\ell \rangle = \delta_{k\ell}$ avec

$$\delta_{k\ell} = \begin{cases} 1 \text{ si } k = \ell \\ 0 \text{ si } k \neq \ell \end{cases}$$

(*) Décomposition :

$\psi(x)$ est une fct périodique :

$$\psi(x+L) = \psi(x)$$

Donc d'après le théorème des séries de Fourier

on peut écrire

$$\psi(x) = \sum_k \frac{\phi_k}{\sqrt{L}} e^{i k \frac{2\pi x}{L}}$$

$$= \sum_k \phi_k \gamma_k(x)$$

$\Rightarrow \{|\gamma_k\rangle\}$ est une famille génératrice

c/c : $\{|\gamma_k\rangle\}$ est une base orthonormée.

Exo : Fonction delta de Dirac est définie par

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & , x \neq 0 \\ \infty & , x = 0 \end{cases}$$

Montrer que $\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} y(x,\varepsilon)$

avec $y(x,\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$, $\varepsilon > 0$

ona $\int_{-\infty}^{+\infty} y(x,\varepsilon)\, dx = \frac{1}{\pi} \left[\text{Arctg} \frac{x}{\varepsilon} \right]_{-\infty}^{+\infty} = 1$

Considérons l'intégrale :

$$F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, g(x|\varepsilon)\, dx$$

avec $f(x)$ est une fonction continue et bornée.

Posons $x = \varepsilon z$

$$\Rightarrow F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\varepsilon z)\, g(z) \quad (*)$$

avec $g(z) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{z^2+1}$

et bien sur $\int_{-\infty}^{+\infty} g(z)\, dz = 1$

$(*)$ est ~~uniform~~ uniformément convergente

car il existe $M \in \mathbb{R}$ (indépendant de ε) tq

$|f(\varepsilon z) g(z)| \leq M g(\varepsilon)$. Donc $F(\varepsilon)$ est

continue

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\varepsilon z) g(z)\, dz = F(0)$$

$$= f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} g(z)\, dz = f(z)$$

$\Downarrow$

Pté de Detail

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \delta(x)\, dx = f(0)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta(x-y)\, dx = f(y).$$

Ex 6 :

Un opérateur $\hat{A}$ tq sa moyenne est hermitique

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) A \psi(x) \, dx$$

Théorème d'Ehrenfest

1°/ Montrer que

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

on a $i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = H\psi(x) \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$

$$\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi| H$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle\right)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{A}|\psi\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H}|\psi\rangle$$

$$= \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

2°/ Application

- $\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \right\rangle^{0} + \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right] \right\rangle$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] \right\rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle \quad (1)$$

- $\cancel{\langle d\vec{p}\rangle}$ $\dfrac{d\langle\vec{p}\rangle}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}\langle[\vec{p},\hat{H}]\rangle = \dfrac{1}{i\hbar}\langle[\vec{p},V(\vec{r})]\rangle$

$$= -\left\langle \frac{d\hat{V}(\vec{r})}{dt}\right\rangle \qquad (2)$$

Soit F : la fce.

$$F = -\frac{dV(\vec{r})}{dt}$$

Les equat. d'Ehrenfest :

Equat. quantique $\left\{ \langle F\rangle = m\dfrac{d^2\langle\vec{r}\rangle}{dt^2} \right.$: analogue à l'equat. de Newton

En effet

$$\left.\begin{aligned} \frac{dx_{cl}}{dt} &= \dot{x}_{cl} = \frac{1}{m}p_{cl} \\ \dot{p}_{cl} &= \frac{dV(x_{cl})}{dt} = -F \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \cancel{F=} \quad \ddot{x}_{cl} = \frac{1}{m}\dot{p}_{cl} = -\frac{F}{m}.$$

$$\Rightarrow \boxed{F = -m\,\ddot{x}_{cl}}$$

Ex 7 :

1°/ $[\hat{B}, \hat{A}^n] = n \hat{A}^{n-1} [\hat{B}, \hat{A}]$

Pour $n=2$

$$[\hat{B}, \hat{A}^2] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{A}] + [\hat{B}, \hat{A}]\hat{A} = (\hat{A}\hat{A})$$

Puisque $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{A}]] = 0$ donc

$$= [\hat{B}, \hat{A}^2] = 2\hat{A}[\hat{B}, \hat{A}]$$

Supposons que cette relation est vraie à l'ordre $n-1$

$$[\hat{B}, \hat{A}^{n-1}] = (n-1)\hat{A}^{n-2}[\hat{B}, \hat{A}]$$

Montrons qu'elle est vraie à l'ordre n :

On a $[\hat{B}, \hat{A}^n] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{A}^{n-1}] + [\hat{B}, \hat{A}]\hat{A}^{n-1}$

$$= \hat{A}(n-1)\hat{A}^{n-2}[\hat{B}, \hat{A}] + \hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}]$$

$$= (n+1-1)\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}]$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{B}, \hat{A}^n] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}]}$$

Deduction :

$$\left[\hat{B}, e^{-\hat{A}u}\right] = -u\, e^{-\hat{A}u}\left[\hat{B}, \hat{A}\right].$$

Développements :

$$e^{-\hat{A}u} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \hat{A}^n u^n$$

Donc

$$\left[\hat{B}, e^{-\hat{A}u}\right] = \left[\hat{B}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \hat{A}^n u^n\right]$$

$$= \sum_{n=0} \frac{(-1)^n}{n!} \left[\hat{B}, \hat{A}^n\right] u^n$$

$$\left[\hat{B}, \hat{A}^n\right] = n\, \hat{A}^{n-1}\left[\hat{B}, \hat{A}\right]$$

$$= \sum_{n!} \frac{(-1)^n}{n!}\, n\, \hat{A}^{n-1} u^n \left[\hat{B}, \hat{A}\right]$$

$$= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(n-1)!}\, u\, u^{n-1} \hat{A}^{n-1}\left[\hat{B}, \hat{A}\right]$$

$p = n-1$

$$= -u \left(\sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(-1)^p}{p!} (u)^p \hat{A}^p\right)\left[\hat{B}, \hat{A}\right]$$

$$\boxed{\left[\hat{B}, e^{-\hat{A}u}\right] = -u\, e^{-\hat{A}u}\left[\hat{B}, \hat{A}\right]}$$

2/ Opérateur dépendant de u.

$$\hat{f}(u) = e^{\hat{A}u}\, e^{\hat{B}u}$$

Expression de $\frac{d\hat{f}(u)}{du}$:

avec $\begin{cases} \frac{d e^{\hat{A}u}}{du} = \hat{A}\, e^{\hat{A}u} \\ \frac{d e^{\hat{B}u}}{du} = \hat{B}\, e^{\hat{B}u} \end{cases}$

$$\frac{d\hat{f}}{du} = \left(\frac{d e^{\hat{A}u}}{du}\right) e^{\hat{B}u} + e^{\hat{A}u}\left(\frac{d e^{\hat{B}u}}{du}\right)$$

$$= \hat{A}\, e^{\hat{A}u}\, e^{\hat{B}u} + e^{\hat{A}u}\, \hat{B}\, e^{\hat{B}u}$$

$$= \left(\hat{A} + e^{\hat{A}u}\, \hat{B}\, e^{-\hat{A}u}\right) \hat{f}(u)$$

D'après 1° avec $\left[\hat{B}, e^{-\hat{A}u}\right] = \hat{B} e^{-\hat{A}u} - e^{-\hat{A}u}\hat{B}$

$$\Rightarrow \hat{B} e^{-\hat{A}u} = \left[\hat{B}, e^{-\hat{A}u}\right] + e^{-\hat{A}u}\hat{B}$$

$$\Rightarrow \frac{d\hat{f}}{du} = \left[\hat{A} + e^{\hat{A}u}\left(-u e^{-\hat{A}u}\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right)\right] \hat{f}(u) = -u e^{-\hat{A}u}\left[\hat{B},\hat{A}\right]$$

$$= \left[\hat{A} + \hat{B} - u\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right] \hat{f}(u)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\hat{f}(u)}{du} = \left(\hat{A}+\hat{B}+u\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\hat{f}(u)$$

Equation différentielle

Intégrons :

avec $\left[A+B,\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0$

$$\int \frac{d\hat{f}(u)}{du} = \int \left(\hat{A}+\hat{B}+\left[\hat{A},\hat{B}\right]u\right)\hat{f}(u)$$

$$\Rightarrow \quad \hat{f}(u) = \hat{f}(0)\; e^{(\hat{A}+\hat{B})u+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]u^2}$$

avec $\hat{f}(0)=\mathbb{1}$.

Pour $u=1$, on a $\hat{f}(1) = e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}$

$$= e^{(\hat{A}+\hat{B})+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}\,e^{\hat{B}}\,e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}}$$

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Module
Mécanique Quantique

AHMED JELLAL[1]

TRAVAUX DIRIGÉS AVEC SOLUTIONS

[1]jellal.ucd@gmail.com

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTMENT DE PHYSIQUE
EL JADIDA

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2015/2016
FILIÈRE : SMP
PHYSIQUE : M31
MODULE : MECANIQUE QUANTIQUE

SERIE 2

Exercice 1 : On considère un oscillateur harmonique à deux dimensions dont le Hamiltonien est donné par la forme suivante :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2 + \frac{k}{2}\hat{y}^2 \tag{1}$$

qui peut se séparer en deux parties

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y \tag{2}$$

1- Montrer que $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$ sont deux opérateurs qui commutent.
2- Définir les opérateurs des annihilations et créations relativement à chaque Hamiltonien.
3- Calculer les relations de commutations entre les operateurs obtenus.
4- Déterminer le spectre d'energie pour chaque Hamiltonien.
5- En déduire le spectre d'énergie pour le Hamiltonien (1).
6- Etudier la dégénérescence du système.

Exercice 2 : Refaire la même analyse que celle de l'exercice 1 mais cette fois ci pour un oscillateur harmonique à trois dimensions décrit par le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2 + \frac{k}{2}\hat{y}^2 + \frac{k}{2}\hat{z}^2 \tag{3}$$

Exercice 3 : Le modèle d'Einstein pour la capacité calorifique des solides est basé sur la notion de l'oscillateur harmonique à trois dimensions. Ce modèle traite donc un solide constitué de N ions comme un ensemble de $3N$ oscillateurs unidimensionnels, identiques (même masse m et constante k), indépendants. Un état stationnaire de ce système est un produit tensoriel (exercice 2) d'états stationnaires des oscillateurs élémentaires, identifié donc par leurs nombres d'excitation respectifs $n_1, n_2, \cdots n_{3N}$. Le résultat du modèle est presenté dans la Figure 1.

On veut retrouver le résultat présenté ci-dessus. Pour cela on utilise l'approche de l'oscillateur harmonique dont le Hamiltonien est donné par l'équation (3), qui a pour énergies propres

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right), \qquad n = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \cdots . \tag{4}$$

Tout système en équilibre à la température T fluctue. A la température nulle, l'atome est dans le niveau $|0\rangle$ d'énergie le plus bas. Mais à une température T plus élevée, il peut être dans le niveau $|n\rangle$, d'énergie E_n avec la probabilité est donnée par la loi de Boltzmann

$$P_n = \frac{1}{Z}e^{-\beta E_n} \tag{5}$$

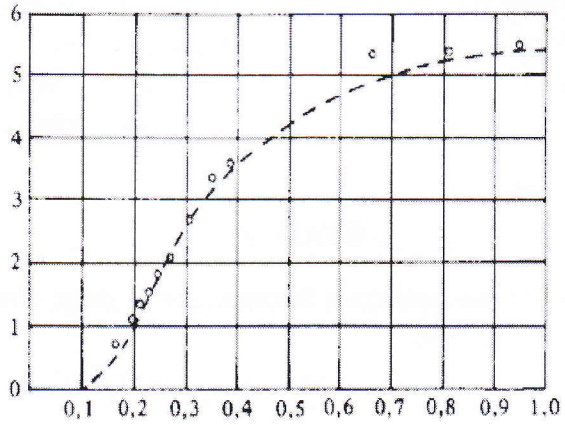


Figure 1: Les valeurs de la chaleur spécifique molaire, en calories par mole par degé K (1 calorie $\approx$ 4,18 Joule) sont représentées en fonction de $k_BT/\hbar\omega = 1/\beta\hbar\omega$. Les ronds représentent les valeurs expérimentales de la chaleur spécifique du diamant. En trait interrompu, les valeurs de l'expression théorique obtenue à travers le modèle d'Einstein.

où $\beta = \frac{1}{k_bT}$ avec k_B est la constante de Boltzmann. La constante de normalisation Z est la fonction de partition

$$Z = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta E_n} \tag{6}$$

1- Montrer que l'énergie moyenne du système est donnée par

$$\langle E \rangle = \sum_{n\geq 0} P_n E_n \tag{7}$$

$$= 3N\frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \tag{8}$$

2- Déduire la capacité calorifique molaire

$$C(T) = 3Nk_B\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)^2\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \tag{9}$$

3- Etudier les limites $T \ll \frac{\hbar\omega}{k_B}$ et $T \gg \frac{\hbar\omega}{k_B}$ de la capacité calorifique $C(T)$.
4- Tracer $C(T)$ en fonction de $\frac{1}{\beta\hbar\omega}$.

Exercice 4 : A faire chez vous

Comme deuxième application de l'oscillateur harmonique, on veut étudier le mouvement dans le plan (x, y) d'une particule chargée dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}$. Pour cela on suppose que ce champ est orienté selon l'axe z tel que $\vec{B} = B\vec{e}_z$. Le Hamiltonien d'une particule de charge e dans un champ magnétique est donné par le couplage minimal, en remplaçant l'impulsion $\vec{p}$ par le terme $\vec{p} - e\vec{A}$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2 \tag{10}$$

où $\vec{A}$ est le potentiel vecteur associé à $\vec{B}$. En choissant la jauge de Landau pour fixer $\vec{A}$ tel que

$$\vec{A} = (0, Bx, 0) \tag{11}$$

1- Montrer que (10) peut s'écrire comme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_y + eB\hat{x}\right)^2 \tag{12}$$

$$= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{e^2B^2}{2m}\left(\hat{x} + \frac{\hat{p}_y}{eB}\right)^2 \tag{13}$$

2- Montrer que la fonction d'onde de $\hat{H}$ est séparable :

$$\psi(x, y) = \phi(x)e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} \tag{14}$$

3- Introduisons la fréquence cyclotron et la longeur magnétique

$$\omega_c = \frac{eB}{m}, \qquad l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \tag{15}$$

ainsque effectuons le changement $\hat{x}' = \hat{x} - \frac{l_B^2}{\hbar}\hat{p}_y$, pour avoir le Hamiltonien (12) comme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\hat{x}'^2 \tag{16}$$

Définir les opérateurs d'annihilation et création pour écrire (16) sous la forme suivante :

$$\hat{H} = \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{17}$$

4- Déduire son spectre d'énergie.

5- Supposons que le système est fini suivant la direction y, soit disant de longeur L_y. En utilisant des conditions aux limites périodiques dans cette direction :

$$\psi(x, y + L_y) = \psi(x, y) \tag{18}$$

montrer que les valeurs de p_y sont quantifiées

$$p_y = \frac{2\pi\hbar n_y}{L_y}, \qquad n_y = 0, 1, 2, \cdots \tag{19}$$

6- Le flux correspondant à notre système de surface $S = L_x L_y$ est $\Phi = BS$. Montrer que la dégénérescence du système est donnée par

$$N = \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{20}$$

avec $\Phi_0 = \frac{1}{eh}$ est le flux unité.

Série 2

Ex 1 : L'oscillateur harmonique à 2D peut être considéré comme 2 oscillateurs harmoniques de même masse (m) et fréquence (k) mais découplés. Le Hamiltonien correspondant est :

$$H = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2\right) + \frac{k}{2}\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)$$

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y$$

1°/ avec $\left[\hat{H}_x, \hat{H}_y\right] = 0 \Rightarrow$ $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$ ont une base commune formée par ses états propres.

2°/ (*) Diagonalisation de $\hat{H}_x$:

$\hat{H}_x = \frac{1}{2m}\hat{P}_x^2 + \frac{k}{2}\hat{x}^2$: OH à 1D (Voir cours)

$\Rightarrow$ Opérateur d'annihilation et création :

$$\begin{cases} a_x = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} + i\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}\right)^{1/2} \hat{P}_x \\ a_x^\dagger = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} - i\left(\frac{1}{2\hbar m\omega}\right)^{1/2} \hat{P}_x \end{cases}$$

3°/ Puisque $\left[\hat{x}, \hat{P}_x\right] = i\hbar\,\mathbb{1} \Rightarrow \left[a_x, a_x^\dagger\right] = \mathbb{1}$

4/ $\Rightarrow \quad \hat{H}_x = \hbar\omega \left(a_x^+ a_x + \frac{1}{2} \mathbb{I} \right)$

Equation aux valeurs propres :

$$\hat{H}_x |n_x\rangle = E_{n_x} |n_x\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} E_{n_x} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \\ |n_x\rangle = \dfrac{(a_x^+)^{n_x}}{\sqrt{n_x!}} |0_x\rangle \end{cases} \quad | \; n_x \in \mathbb{N}$$

(**) Diagonalisation de $\hat{H}_y$:

De la même façon on obtient

$$\hat{H}_y = \hbar\omega \left(a_y^+ a_y + \frac{1}{2} \mathbb{I} \right)$$

$$E_{n_y} = \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right)$$

$$|n_y\rangle = \frac{(a_y^+)^{n_y}}{\sqrt{n_y!}} |0_y\rangle \quad , \; n_y \in \mathbb{N}$$

5/ Pour le Hamiltonien total on a

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$$

Dans la base commune on a :

$$|n_x n_y\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle$$

Déjà $\hat{H}|n_x,n_y\rangle = (\hat{H}_x+\hat{H}_y)|n_x,n_y\rangle = E_{n_x n_y}|n_x,n_y\rangle$

$= \hat{H}_x|n_x,n_y\rangle + \hat{H}_y|n_x,n_y\rangle$

$= (E_{n_x}+E_{n_y})|n_x,n_y\rangle$

$\Rightarrow \quad E_{n_x n_y} = E_{n_x}+E_{n_y}$

$\Rightarrow \boxed{E_{n_x n_y} = \hbar\omega(n_x+n_y+1)}$

et $\boxed{|n_x,n_y\rangle = \dfrac{(a_x^+)^{n_x}(a_y^+)^{n_y}}{\sqrt{n_x!\,n_y!}}|0,0\rangle}$

avec $\boxed{|0_x,0_y\rangle = |0,0\rangle}$

6° | Dégénérescence

Rappel : Dans l'oscillateur harmonique à 1D il n'y a pas de dégénérescence

$\boxed{E_n = \hbar\omega(n+1/2)}$

$|n\rangle = \dfrac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$

$|0\rangle$: Vide

Car chaque valeur propre correspond à un état propre.

En effet,

Valeurs propres / Vecteurs propres

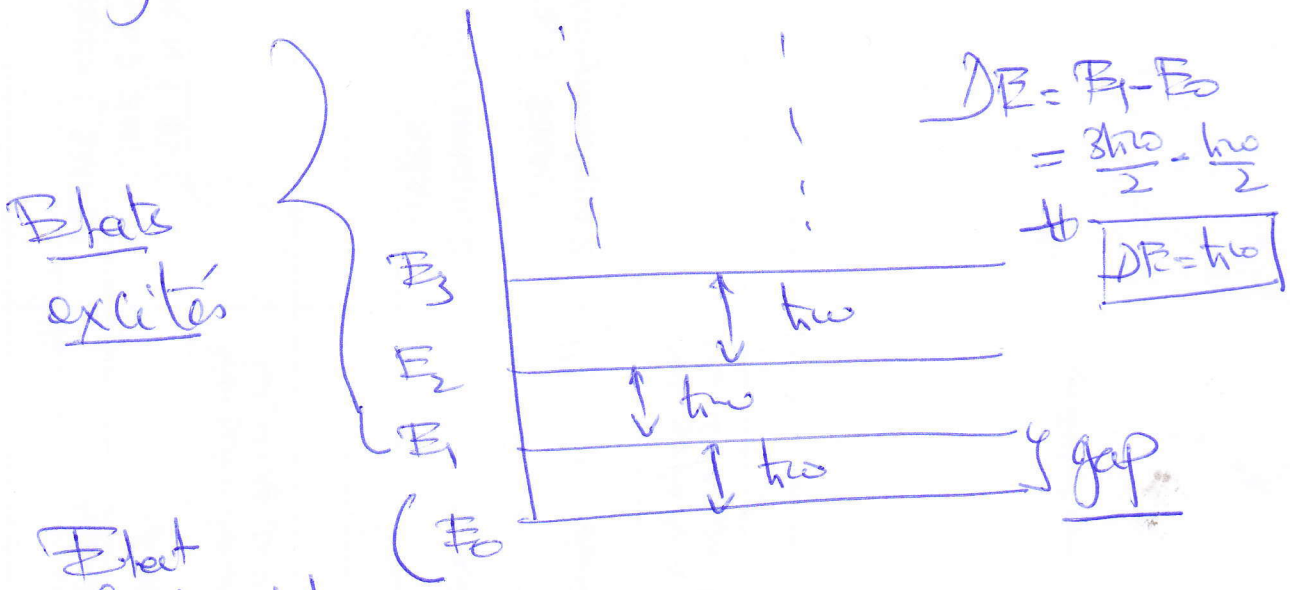
$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \longrightarrow |0\rangle$

$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2} \longrightarrow |1\rangle$

$E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2} \longrightarrow |2\rangle$

$E_4 = \frac{7\hbar\omega}{2} \longrightarrow |3\rangle$

Diagramme d'énergie :



$\Delta E = E_1 - E_0$

$= \frac{3\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}$

$\Delta E = \hbar\omega$

Pour OH à 2D :

On a : $E_{n_x n_y} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1\right)$

$|n_x, n_y\rangle$, $n_x, n_y \in \mathbb{N}$

On calcule les énergies et les états propres correspondants pour les premiers niveaux :

- $E_{00} = \hbar\omega \longrightarrow |0,0\rangle$: Etat fondamental
- $E_{10} = 2\hbar\omega \longrightarrow |1,0\rangle$ } $\Rightarrow E_{01} = E_{10} = 2\hbar\omega$
  $E_{01} = 2\hbar\omega \longrightarrow |0,1\rangle$ }

  $|1,0\rangle$ $|0,1\rangle$

  Cette énergie est 2 fois dégénérée
- $E_{02} = 3\hbar\omega \longrightarrow |0,2\rangle$ } $\Rightarrow E_{02} = E_{20} = E_{11} = 3\hbar\omega$
  $E_{20} = 3\hbar\omega \longrightarrow |2,0\rangle$ }
  $E_{11} = 3\hbar\omega \longrightarrow |1,1\rangle$ }

  $|0,2\rangle$ $|2,0\rangle$ $|1,1\rangle$

  3 fois dégénérée

⋮

Ainsi de suite. On conclut que OH à 2D est un système dégénéré.

Ex2 : Oscillateur harmonique à 3D est donc la somme de OH à 1D :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + \frac{k}{2}\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2\right)$$
$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

1e/ Spectre d'énergie

On montre $\left[\hat{H}_x, \hat{H}_y\right] = \left[\hat{H}_x, \hat{H}_z\right] = \left[\hat{H}_y, \hat{H}_z\right] = 0$

$\Rightarrow$ $\hat{H}_x$, $\hat{H}_y$ et $\hat{H}_z$ possèdent une base commune de ses vecteurs propres.

Opérateur d'annihilation et création :

$$\begin{cases} a_i = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \hat{x}_i + i\left(\frac{1}{2\hbar\omega m}\right)^{1/2} \hat{p}_i \\ a_i^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \hat{x}_i - i\left(\frac{1}{2\hbar\omega m}\right)^{1/2} \hat{p}_i \end{cases}$$

avec $i = x, y, z$ ou bien

$\hat{x}_1 = \hat{x}$, $\hat{x}_2 = \hat{y}$, $\hat{x}_3 = \hat{z}$

$\hat{p}_1 = \hat{p}_x$, $\hat{p}_2 = \hat{p}_y$, $\hat{p}_3 = \hat{p}_z$

$\Rightarrow$ $\left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij}$

$\Rightarrow$ $\hat{H} = \hbar\omega\left(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + a_z^\dagger a_z + 3/2\, \mathbb{1}\right)$

$= \hbar\omega \sum_{i=1}^{3} \left(a_i^\dagger a_i + 3/2\, \mathbb{1}\right)$

Les états propres de $\hat{H}$ sont donnés par

$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$

$= \frac{(a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} (a_z^\dagger)^{n_z}}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} |0,0,0\rangle$

Les valeurs propres :

$$\hat{H}|n_x n_y n_z\rangle = E_{n_x n_y n_z}|n_x n_y n_z\rangle$$

$n_x n_y n_z \in \mathbb{N}$

$$= \left(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z\right)|n_x n_y n_z\rangle$$

$$= \left(E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}\right)|n_x n_y n_z\rangle$$

$$\Rightarrow E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \tfrac{3}{2}\right)}$$

2° | Dégénérescence :

- $E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,0,0\rangle$: Etat fondamental
- $E_{100} = \frac{5}{2}\hbar\omega \longrightarrow |1,0,0\rangle$
  $E_{010} = \frac{5}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,1,0\rangle$
  $E_{001} = \frac{5}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,0,1\rangle$
  $\Rightarrow \frac{5}{2}\hbar\omega$ ← $|1,0,0\rangle$, $|0,1,0\rangle$, $|0,0,1\rangle$
  3 fois dégénérés
- $E_{002} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,0,2\rangle$
  $E_{020} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,2,0\rangle$
  $E_{200} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |2,0,0\rangle$
  $E_{110} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |1,1,0\rangle$
  $E_{101} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |1,0,1\rangle$
  $E_{011} = \frac{7}{2}\hbar\omega \longrightarrow |0,1,1\rangle$
  $\Rightarrow \frac{7}{2}\hbar\omega$ est 6 fois dégénéré

Ex3 : Considérons un solide de N atomes et chaque atome est assimilé à un oscillateur à 3D.

- A température nulle, un atome est trouvé dans l'état fondamental $|0\rangle = |0,0,0\rangle$ d'énergie $E_0 = E_{000}$,
- A une température $T \neq 0$, l'atome est dans l'état $|n\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle$ avec une probabilité :

$$P_n = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_n}$$

avec • $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B : cte de Boltzmann

• $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right)$, $\boxed{n = n_x + n_y + n_z}$

• $\mathcal{Z}$: fonction de partition (Constante de Normalisation de P_n).

$$\mathcal{Z} = \sum e^{-\beta E_n}$$

1°) Energie moyenne :

on a $\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} E_n P_n$

$$= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{E_n e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}}$$

Dans notre Cas $\mathcal{Z} = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta E_n}$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta E_n}} \Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}}$$

Calculons $\mathcal{Z}$:

$$\mathcal{Z} = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n_x=0}^{+\infty} \sum_{n_y=0}^{+\infty} \sum_{n_z=0}^{+\infty} e^{-\beta \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + 3/2\right)}$$

$$\Rightarrow \mathcal{Z} = e^{-3/2 \beta\hbar\omega} \left(\sum_{n_x=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_x} \right) \left(\sum_{n_y=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_y} \right) \left(\sum_{n_z=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_z} \right)$$

On a de tels géométriques et donc

$$\boxed{\sum_{n_x=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_x} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

$$\Rightarrow \mathcal{Z} = \left(\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^3$$

Donc $\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} = -3 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\beta \frac{\hbar\omega}{2} - \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) \right)$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = \frac{3\hbar\omega}{2} \coth\left(\beta \frac{\hbar\omega}{2}\right)}$$ Pour un atome

Pour N atomes

$$\langle E \rangle_N = N \langle E \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E_N \rangle = \frac{3N}{2} \hbar\omega \coth\left(\frac{\beta \hbar\omega}{2}\right)}$$

2/ Capacité Calorifique :

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle_N}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle_N}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T}$$

avec

$$\frac{\partial \beta}{\partial T} = \frac{-1}{k_B T^2}$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle_N}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta}\left[\frac{3N\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right]$$

$$= \left(\frac{3N\hbar\omega}{2} \times \frac{\hbar\omega}{2}\right)\left(\frac{-1}{\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{C_V = 3N k_B \left(\frac{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\right)^2}$$

avec N : Nbre d'atomes du solide

3° | A haute température : $T \gg \frac{\hbar\omega_0}{k_B} \Rightarrow$

$\beta\hbar\omega_0 \ll 1$ on peut développer

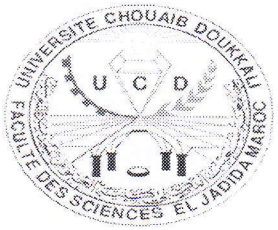
$\sinh x \underset{x \to 0}{\sim} x$, donc

$\boxed{C_V \approx 3Nk_B}$ c'est une constante indépendante de la température c'est donc analogue au comportement de C_V à haute température sur la Figure (série 2).

• A basse température, le solide est dans l'état fondamental d'énergie NE_0, donc l'énergie moyenne est $\langle E \rangle_N = NE_0 = \text{cte} \Rightarrow$

$\Rightarrow \frac{\partial \langle E \rangle_N}{\partial T} = \frac{N \partial E_0}{\partial T} \Rightarrow$

$\Rightarrow \boxed{C_V = 0} \equiv$ analogue au comportement de C_V sur la Figure à Basse Température



جامعة شعيب الدكالي
Université Chouaib Doukkali

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Module
Mécanique Quantique

AHMED JELLAL[1]

TRAVAUX DIRIGÉS AVEC SOLUTIONS

---

[1] jellal.ucd@gmail.com

Complément : Oscillateur Harmonique

Méthode analytique :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2 \quad , \quad k = cte$$

Equation aux valeurs propres :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) :$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\cancel{\psi(x)} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{km}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \qquad \boxed{\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}}$$

$$\alpha = \left(\frac{\hbar^2}{km}\right)^{1/4} = \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right)^{1/2}$$

Changement : avec

$$q = \alpha x \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{dq}{dx}\frac{d}{dq} = \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dq}$$

$$\Rightarrow \cancel{\left(\frac{d^2}{dq^2}\psi(q) - \frac{km}{\hbar^2}\alpha^4 q^2\right)\psi = -\alpha^2\frac{2m}{\hbar^2}E\psi}.$$

avec $\alpha = \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right)^{1/2}$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dq^2} - q^2\right)\psi = -\varepsilon\psi \quad (*) \qquad \text{avec } \boxed{\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}}$$

Fonction d'essai :

Solution simple : $\psi_0 = e^{-q^2/2}$ Vérifions (*) :

$$\frac{d}{dq} e^{-q^2/2} = -q\, e^{-q^2/2} \Rightarrow \frac{d^2}{dq^2} e^{-\frac{q^2}{2}} = \frac{d}{dq}\left(-q e^{-q^2/2}\right)$$

$$= \cancel{q^2 e^{-q^2/2}} \left(-e^{-q^2/2} + q^2 e^{-q^2/2}\right)$$

En remplace dans (*) :

$$-e^{-q^2/2} + q^2 e^{-q^2/2} - q^2 e^{-q^2/2} = -\mathcal{E} e^{-q^2/2}$$

$$(-1 + q^2 - q^2) = -\mathcal{E} \Rightarrow \boxed{\mathcal{E} = 1}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{\hbar\omega}{2}}$$

Supposons que $\psi = e^{-q^2/2} H(q)$

$$\frac{dH(q)}{dq} = \frac{d}{dq}\left(e^{-q^2/2} H(q)\right) = -q e^{-q^2/2} H(q) + e^{-q^2/2} \frac{dH(q)}{dq}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dq^2}\psi(q) = \frac{d}{dq}\left[-q e^{-q^2/2} H(q) + e^{-q^2/2} \frac{dH(q)}{dq}\right]$$

$$= -e^{-q^2/2} H(q) + q^2 e^{-q^2/2} H(q) - q e^{-q^2/2} \frac{dH(q)}{dq}$$

$$- q e^{-q^2/2} \frac{dH(q)}{dq} + e^{-q^2/2} \frac{d^2 H(q)}{dq^2}$$

Dans (*) devient

$$\left(-e^{-q^2/2} H(q) + q^2 e^{-q^2/2} H(q) - 2q e^{-q^2/2} H(q) + e^{-q^2/2} \frac{dH(q)}{dq} - q^2 e^{-q^2/2} H(q) \right) = \varepsilon e^{-q^2/2} H(q)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2H(q)}{dq^2} - 2q \frac{dH(q)}{dq} - (1-\varepsilon) H(q) = 0} \quad (**)$$

C'est l'équation différentielle de Hermite

On cherche sa solution sous forme de série :

$$h(q) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n q^n = a_0 + a_1 q + a_2 q^2 + \cdots$$

$$h'(q) = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n q^{n-1} = a_1 + 2a_2 q + 3a_3 q^2 \cdots$$

$$h''(q) = 2a_2 + 2.3 a_3 q + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} q^n$$

$$(**) \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+1)(n+2) a_{n+2} q^n - 2q n a_n q^{n-1} + (\varepsilon - 1) a_n q^n \right] = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+1)(n+2) a_{n+2} - 2n a_n + (\varepsilon - 1) a_n \right] q^n = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{(n+1)(n+2) a_{n+2} - 2n a_n + (\varepsilon - 1) a_n = 0}$$

$\Rightarrow$ relation de récurrence :

$$\boxed{a_{n+2} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+1)(n+2)}\, a_n}$$

pair
$n=0$ $\quad a_2 = \frac{1-\varepsilon}{2} a_0$

$n=2$ $\quad a_4 = \frac{5-\varepsilon}{12}$

impair
$n=1$: $a_3 = \frac{3-\varepsilon}{6} a_1$

$n=3$: $a_5 = \frac{7-\varepsilon}{20} a_3$

$$H(q) = h_{pair}(q) + h_{impair}(q)$$

$$\| \qquad\qquad \|$$

$$a_0 + a_2 q^2 + \cdots \qquad a_1 + a_3 q^3 + \cdots$$

Pb : ~~les solutions ne sont pas toutes~~
Les toutes les solutions sont normalisables :

Si n est très grand alors

$$a_n \simeq \frac{2n}{n^2} a_n = \frac{2}{n} a_n$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

$\Rightarrow$ $a_n \simeq \frac{C}{(n/2)!}$ $\Rightarrow$ $h(q) \simeq C \sum_n \frac{1}{(n/2)!} q^n$

$$\simeq C \sum_n \frac{1}{n!} q^{2n}$$

$$= C e^{+q^2}$$

$\Rightarrow$ $h(q) \longrightarrow \infty$ lorsque $q \to \infty$

donc il faut limiter le développement de $H(q)$ à certains nombres

donc pour une valeur maximale de n on doit avoir $a_{n_{max}+2} = 0 \Rightarrow$

$$\boxed{\mathcal{E} = 2n+1}_{max}$$

$n_{max} = n$

$n = j$

donc $\boxed{E = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1)_{max}}$

Facile à faire :

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)}\, a_j$$

Pour $n=0 \Rightarrow H(q) = a_0 \Rightarrow$

$a_2 = 0 \ (j=0)$

$\psi_0(q) = a_0 e^{-q^2/2}$

$a_0 \neq 0$

$n=1$: la série finie est nulle $\Rightarrow (a_0 = 0)$ a_j reste $\Rightarrow j = 0$

$\Rightarrow h_1(q) = a_1 q \Rightarrow \psi_1(q) = a_1 q e^{-q^2/2}$

$n=2$: (série infinie est nulle)

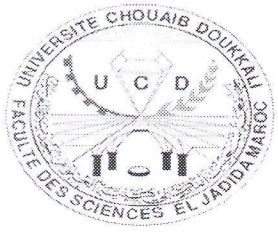
$\Rightarrow$ $j = 0$ ou $j = 2$

$a_4 = 0$

$a_2 = -2a_0$

$\Rightarrow h_2(q) = a_0(1-2q^2)$

$\Rightarrow \psi_2(q) = a_0(1-2q^2)\, e^{-q^2/2}$



جامعة شعيب الدكالي
Université Chouaïb Doukkali

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Module
Mécanique Quantique

AHMED JELLAL[1]

TRAVAUX DIRIGÉS AVEC SOLUTIONS

[1] jellal.ucd@gmail.com

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTMENT DE PHYSIQUE
EL JADIDA

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2015/2016
FILIÈRE : SMP
PHYSIQUE : M31
MODULE : MECANIQUE QUANTIQUE

SERIE 3

Exercice 1 : On considère une particule dans un état de moment cinétique $j = 1$ et soit $\vec{u}$ un vecteur réel de composantes u_x, u_y et u_z.

1- On désigne par $\{|\varphi_m\rangle\}$ la base engendrée par les vecteurs propres de J_z :

$$J_z \mid \varphi_m\rangle = m \mid \varphi_m\rangle \tag{1}$$

en unité de $\hbar$. Soit $|\Psi\rangle$ le vecteur propre normé de l'oprérateur $\vec{J}\cdot\vec{u}$ associé à la valeur propre zero. On définit $u_\pm$ par

$$u_\pm = u_x \pm i u_y. \tag{2}$$

On demande de

i) déterminer les composantes de $|\Psi\rangle$ dans la base $\{|\varphi_m\rangle\}$.

ii) montrer que $|\Psi\rangle$ peut s'écrire sous la forme :

$$|\Psi\rangle = \sum_k u_k \mid \varphi_k\rangle, \qquad k = x, y, z \tag{3}$$

où les kets $|\varphi_k\rangle$ sont des combinaisons linéaires des $|\varphi_m\rangle$. Vérifier que les $|\varphi_k\rangle$ sont des vecteurs orthogonaux.

2- Maintenant, on considère la base $\{|\varphi_k\rangle\}$ et on demande de :

i) donner les matrices représentant les opérateurs J_k.

ii) trouver les énergies de la particule sachant qu'elle est soumise à des forces qui se traduisent par un Hamiltonien de la forme :

$$H = \sum_k A_k J_k^2 \tag{4}$$

où les A_k sont des constantes réelles.

On rappelle les résultats suivants :

$$J_\pm \mid \varphi_{j,m}\rangle = [(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{\frac{1}{2}} \mid \varphi_{j,m\pm1}\rangle. \tag{5}$$

Exercice 2 : Une particule sans spin de moment cinétique orbital L se trouve dans un état $|l, m\rangle$ propre et commun à L^2 et L_z. Cette particule est soumise à un gradient de champ électrique et dont le Hamiltonien est donné par

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar}\left(L_u^2 - L_v^2\right) \tag{6}$$

où L_u et L_v sont les composantes de L sur les directions ou et ov du plan xoz faisant $\frac{\pi}{2}$ avec les axes ox et oz. La quantité ω_0 est une constante reelle.

1- Ecrire H en terme des composantes L_x, L_z et donner la matrice représentant H dans la base $\{\mid l, m\rangle\}$.

2- Déterminer les énergies et les états stationnaires de la particule.

3- Supposons que à l'instant $t = 0$, la particule est dans l'état :

$$\mid \Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid 1, 1\rangle - \mid 1, -1\rangle) \tag{7}$$

i) Quel est l'état $\mid \Psi(t)\rangle$ à un instant t donné.

ii) Calculer $\langle L_z \rangle$ dans l'état $\mid \Psi(0)\rangle$ et puis dans l'état $\mid \Psi(t)\rangle$.

SERIE N° 3.

I. Moment Cinétique :

$|\varphi_m\rangle = |\varphi_{j,m}\rangle \quad \{|\varphi_1\rangle, |\varphi_0\rangle, |\varphi_{-1}\rangle\}$

$J^2 |\varphi_m\rangle = j(j+1)|\varphi_m\rangle = 2|\varphi_m\rangle$

$J_z |\varphi_m\rangle = m|\varphi_m\rangle$

$J_\pm |\varphi_{j,m}\rangle = \left[(j \mp m)(j \pm m + 1)\right]^{1/2} |\varphi_{j,m\pm1}\rangle$

$\vec{J}.\vec{u}\,|\psi\rangle = 0 \qquad \langle\psi|\psi\rangle = 1 \Rightarrow |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$

$|\psi\rangle = a|\varphi_1\rangle + b|\varphi_0\rangle + c|\varphi_{-1}\rangle$

$(J_x u_x + J_y u_y + J_z u_z)|\psi\rangle = 0$

$J_z |\varphi_m\rangle = m|\varphi_m\rangle$

$J_z |\varphi_1\rangle = 1|\varphi_1\rangle$

$J_z |\varphi_0\rangle = 0 \quad$ et $J_z |\varphi_{-1}\rangle = -|\varphi_{-1}\rangle$

1°)

$$(J_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(J_+) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow J_- = J_+^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(J_x) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (J_y) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left(\vec{J}.\vec{u}\right) = \begin{pmatrix} u_z & \frac{u_-}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{u_+}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{u_-}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{u_+}{\sqrt{2}} & -u_z \end{pmatrix}$$

donc $\vec{J}.\vec{u}\,|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u_z a + \frac{u_-}{\sqrt{2}} b = 0 \\ \frac{u_+}{\sqrt{2}} a + \frac{u_-}{\sqrt{2}} c = 0 \\ \frac{u_+}{\sqrt{2}} b - u_z c = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{a}{b} = -\frac{u_-}{u_z\sqrt{2}} \\ \frac{a}{c} = -\frac{u_-}{\sqrt{2}u_+} \\ \frac{b}{c} = \frac{\sqrt{2}u_z}{u_+} \end{cases}$

or on a : $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$

$$\rightarrow b^2\left(1 + \frac{|u_-|^2}{2u_z^2} + \frac{|u_+|^2}{2u_z^2}\right) = 1$$

$$\Rightarrow |b| = u_z \rightarrow b = u_z e^{i\varphi}$$

b) $|\psi\rangle = \sum_k u_k |\varphi_k\rangle = u_x|\varphi_x\rangle + u_y|\varphi_y\rangle + u_z|\varphi_z\rangle$ $\quad k = x,y,z$.

$$|\psi\rangle = u_x \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle - |\varphi_{+1}\rangle\right)\right] + u_y \left[\frac{i}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle + |\varphi_{+1}\rangle\right)\right] + u_z|\varphi_0\rangle$$

$$|\varphi_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle - |\varphi_{+1}\rangle\right)$$

$$|\varphi_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle + |\varphi_{+1}\rangle\right)$$

$$|\varphi_z\rangle = |\varphi_0\rangle$$

On vérifie que : $\langle\varphi_x|\varphi_{0x}\rangle = \langle\varphi_z|\varphi_y\rangle = 0$ et que $\langle\varphi_x|\varphi_y\rangle = 0$.

2°) a) On considère la base $\{|\varphi_k\rangle\}$.

J_k avec $k = x,y,z$

(*) $$J_z|\varphi_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-|\varphi_{-1}\rangle - |\varphi_{+1}\rangle\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle + |\varphi_{+1}\rangle\right) = i|\varphi_y\rangle$$

$$J_z|\varphi_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(-|\varphi_{-1}\rangle + |\varphi_{+1}\rangle\right) = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_{-1}\rangle - |\varphi_{+1}\rangle\right) = -i|\varphi_x\rangle$$

$$J_z|\varphi_z\rangle = J_z|\varphi_0\rangle = 0.$$

$$J_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(**) $$J_x|\varphi_x\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(J_+ + J_-\right)\left(|\varphi_{-1}\rangle - |\varphi_{+1}\rangle\right) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(J_+|\varphi_{-1}\rangle - J_-|\varphi_{+1}\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\sqrt{2}|\varphi_0\rangle - \sqrt{2}|\varphi_0\rangle\right) = 0.$$

$$J_x|\varphi_y\rangle = i|\varphi_z\rangle$$

$$J_x|\varphi_z\rangle = -i|\varphi_y\rangle$$

$$(J_x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Idem $$(J_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

b) $$H = \sum A_k J_k^2 \quad (\text{les } A_k \text{ sont des cts réelles})$$

$$= A_x J_x^2 + A_y J_y^2 + A_z J_z^2$$

$$(J_x^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (J_y^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (J_z^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

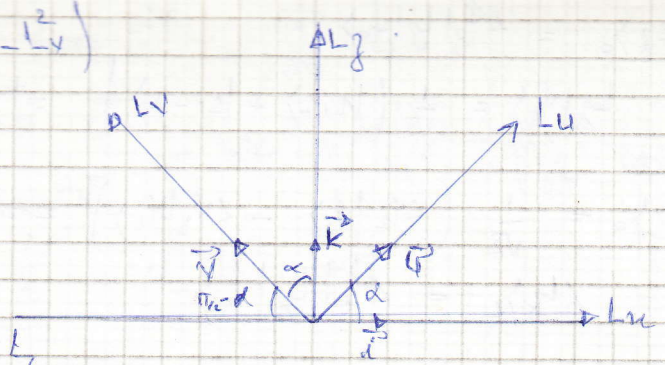
$$\begin{pmatrix} A_y + A_z & 0 & 0 \\ 0 & A_x + A_z & 0 \\ 0 & 0 & A_x + A_y \end{pmatrix}$$

les énergies sont donc

B/ $H = \frac{\omega_0}{\hbar}\left(L_u^2 - L_v^2\right)$

1°/ $\vec{L} = L_u\vec{u} + L_z\vec{k}$

$\vec{L} = L_u\vec{u} + L_v\vec{v}$



$$\begin{cases} L_u = L_x\cos\alpha + L_z\sin\alpha \\ L_v = -L_x\sin\alpha + L_z\cos\alpha \end{cases} \quad \alpha = 45° \Rightarrow \begin{cases} L_u = \frac{1}{\sqrt{2}}(L_x + L_z) \\ L_v = \frac{1}{\sqrt{2}}(L_z - L_x) \end{cases}$$

$$H = \frac{\omega_0}{2\hbar}\left\{(L_x + L_z)^2 - (L_z - L_x)^2\right\} = \frac{\omega_0}{\hbar}(L_xL_z + L_zL_x)$$

$\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$.

$$L_z = \hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \quad L_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$$

$|1,1\rangle \; |1,0\rangle \; |1,-1\rangle$

$$L_xL_z = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar^2\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}, \quad L_zL_x = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar^2\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix} \Rightarrow H = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}$$

2°/ $\det(H - \lambda I) = 0 \Rightarrow -\lambda(\lambda^2 - \hbar^2\omega_0^2) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \hbar\omega_0 ; \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -\hbar\omega_0$

$\lambda_i \longrightarrow |\varphi_i\rangle = \alpha_i|1,1\rangle + \beta_i|1,0\rangle + \gamma_i|1,-1\rangle$

$\lambda_1 \longrightarrow |\varphi_1\rangle = \frac{1}{2}|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle - \frac{1}{2}|1,-1\rangle$

$\lambda_2 \longrightarrow |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1,1\rangle + |1,-1\rangle\}$.

$\lambda_3 \longrightarrow |\varphi_3\rangle = \frac{1}{2}|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle$

3°/ a- $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle)$, $|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_0\rangle$

on remarque que : $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_1\rangle - |\varphi_3\rangle)$

sachant que $H|\varphi_1\rangle = \hbar\omega_0|\varphi_1\rangle$ et $H|\varphi_3\rangle = -\hbar\omega_0|\varphi_3\rangle$.

$$\Rightarrow |\psi_t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0t}|\varphi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{+i\omega_0t}|\varphi_3\rangle$$

$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}$ et $C_3 = -C_1^*$

b- $\langle L_z \rangle_0 = \langle \psi_0 | L_z | \psi_0 \rangle$

$L_z |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,1\rangle + |1,-1\rangle \right) = |\psi_2\rangle$

$\langle L_z \rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle - \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle \right) = 0$ ou $\langle L_z \rangle_0 = \frac{1}{2} \left(1 - 1 \right) = 0$

$\langle L_z \rangle_t = \langle \psi_t | L_z | \psi_t \rangle$

$L_z |\psi_t\rangle = c_1 L_z |\psi_1\rangle + c_3 L_z |\psi_3\rangle = c_1 \left(\frac{1}{2} |1,1\rangle + \frac{1}{2} |1,-1\rangle \right) + c_3 \left(\frac{-1}{2} |1,1\rangle - \frac{1}{2} |1,-1\rangle \right)$

$= \frac{c_1}{\sqrt{2}} |\psi_2\rangle - \frac{c_3}{\sqrt{2}} |\psi_2\rangle$

$\langle L_z \rangle_t = \frac{|c_1|^2}{\sqrt{2}} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle - \frac{|c_3|^2}{\sqrt{2}} \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle = 0$

$\Rightarrow$ L_z est conservée au cours.

T.E

$\frac{d}{dt} \langle L_z \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [L_z, H] \rangle$

$[L_z, H] = \frac{\omega_0}{\hbar} [L_z, L_x L_z + L_z L_x] = \frac{\omega_0}{\hbar} \left\{ [L_z, L_x L_z] + [L_z, L_z L_x] \right\}$

$= \frac{\omega_0}{\hbar} \left\{ [L_z, L_x] L_z + L_z [L_z, L_x] \right\}$

$= \frac{\omega_0}{\hbar} \left\{ i\hbar L_y L_z + i\hbar L_z L_y \right\} \neq 0$

$H |\psi_i\rangle = \lambda_i |\psi_i\rangle \longrightarrow \langle \psi_i | H = \lambda_i \langle \psi_i |$

$\langle \psi_i | [L_z, H] | \psi_i \rangle = \langle \psi_i | L_z H | \psi_i \rangle - \langle \psi_i | H L_z | \psi_i \rangle$

$= \lambda_i \left\{ \langle \psi_i | L_z | \psi_i \rangle - \langle \psi_i | L_z | \psi_i \rangle \right\} = 0$