Physique Quantique - 1 $^\circ$ A

2h - sans document ni calculatrice

6 Juin 2012

Les vecteurs sont notés en gras : $\mathbf{u}$. Un formulaire de cours est disponible à la fin du sujet. Les exercices sont indépendants.

1 Mouvement d'une particule libre à une dimension

On considère un atome de masse m, librement mobile sur l'axe Ox (l'énergie potentielle V est donc constante et sera prise arbitrairement égale à zéro). On note x l'abscisse sur l'axe Ox, et $\psi(x,t)$ la fonction d'onde de l'atome.

Q1. Déterminer la probabilité de présence de l'atome sur le segment $[0,1]$ de l'axe Ox, en fonction de $\psi(x,t)$.

Q2. On suppose qu'à $t=0$, $\psi(x,t=0)$ est décrit par une fonction porte d'amplitude A sur l'intervalle $[-2,2]$, et nulle partout ailleurs. Quelle est la probabilité de présence de l'atome sur le segment $[0,1]$? et sur l'axe Ox tout entier ? En déduire A.

Q3. Ecrire l'expression de l'Hamiltonien H.

Q4. Montrer que les fonctions d'onde de la forme $\psi(x,t)=e^{i(kx-\Omega t)}$, sont solutions de l'équation aux valeurs propres de H : $H[\psi]=E\psi$. En déduire une relation entre k et E, ainsi qu'entre Ω et E. Commentez.

Q5. En s'appuyant sur les postulats et sur la définition de l'observable P_x (quantité de mouvement), montrer que les fonctions d'onde de la forme $\psi(x,t)=e^{i(kx-\Omega t)}$ ont une quantité de mouvement p parfaitement déterminée, et déterminer laquelle. (indication : chercher les états propres de P_x, puis déterminer les probabilités de mesure en calculant les produits scalaires).

2 Proton dans un potentiel harmonique

Un proton de masse m est soumis à une énergie potentielle quadratique $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. On note $|\varphi_n\rangle$ et E_n les états stationnaires et les niveaux d'énergie du proton dans ce potentiel harmonique. On note a et $a^\dagger$ les opérateurs annihilation/création.

Soit l'état initial $|\psi(t=0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_0\rangle+|\varphi_1\rangle)$.

Q6. Ecrire l'équation de Schrödinger. En déduire $|\psi(t)\rangle$ pour t quelconque.

Q7. On réalise une mesure de l'énergie sur ce proton. Quelle observable est utilisée ? Quelle est la probabilité de trouver E_0 ? E_1 ? E_2 ? En déduire l'énergie moyenne.

On rappelle que X est l'observable de position. On s'intéresse à la position moyenne du proton, toujours dans l'état $|\psi(t)\rangle$ précédent.

Q8. Indiquer deux méthodes permettant de calculer $\langle X\rangle$.

Q9. Exprimer l'observable X en fonction des opérateur a et $a^\dagger$.

Q10. Calculer $a\,|\varphi_0\rangle$, $a\,|\varphi_1\rangle$, $a^\dagger\,|\varphi_0\rangle$ et $a^\dagger\,|\varphi_1\rangle$.
En déduire l'expression de $\langle\psi(t)|\,(a+a^\dagger)\,|\psi(t)\rangle$.

Q11. En déduire l'expression de la valeur moyenne de la position, en fonction du temps, dans l'état $|\psi(t)\rangle$. Commentez.

3 Quelques propriétés du moment cinétique orbital

On considère le système de coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) centré autour du noyau d'un atome. La fonction d'onde d'un électron de cet atome est, à l'instant $t = 0$, donnée par :

$$\psi(r, \theta, \phi) = A\frac{r}{a}e^{-r/a}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

où a est une constante physique et A une constante de normalisation.

Q12. A quelle unité est homogène a ?

On considère l'observable L_z correspondant à la mesure de la projection sur l'axe Oz du moment cinétique orbital :

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Q13. En quoi le moment cinétique orbital diffère-t-il du moment cinétique de spin ?

Q14. Montrer que $\psi(r, \theta, \phi)$ est fonction propre de L_z. Indiquer la valeur propre associée.

Q15. En déduire quel(s) serai(en)t le(s) résultat(s) possible(s) d'une mesure de L_z, et sa(leur) probabilité associée lorsque la fonction d'onde de l'électron est donnée par $\psi(r, \theta, \phi)$?

4 Interaction d'un noyau atomique avec un champ magnétique

On considère une modélisation rudimentaire d'un noyau atomique comme une particule de masse m, immobile dans l'espace, dont seul le spin $\mathbf{S}$ peut varier. L'état quantique de ce noyau est décrit par le vecteur d'état : $|\psi\rangle = \alpha\,|+z\rangle + \beta\,|-z\rangle$, où $|+z\rangle$ et $|-z\rangle$ sont états propres, de valeurs propres respectives $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$, de l'opérateur S_z. On note S_x et S_y les deux autres opérateurs de spin (cf. formulaire).

Q16. On mesure S_z avec un appareil de Stern-Gerlach. Quels sont les résultats possibles, et les probabilités associées ? Quel est l'état du noyau immédiatement après la mesure ?

Q17. Immédiatement après cette mesure de S_z, on mesure S_x dans un second appareil. Quelles sont les résultats possibles, et les probabilités associés ? Vous pourrez indiquer vos réponses sous forme d'un graphe.

On place le noyau dans un champ magnétique uniforme $\mathbf{B}$ de 1 Tesla dirigé selon l'axe Ox (oui il s'agit bien de l'axe horizontal Ox).

Q18. Rappeler la relation de proportionnalité entre le moment magnétique $\mathbf{M}$ du proton et son spin.

Q19. Déterminer l'Hamiltonien du noyau en interaction avec le champ magnétique.

Q20. Déterminer la position des deux niveaux d'énergie, et pour chacun des 2 niveaux, indiquer l'état de spin correspondant.

5 Spin d'un couple de deux électrons

On considère un système constitué de deux électrons "1" et "2". Les états de spin du système sont représentés dans l'espace $\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E} \otimes \mathcal{E}$ engendré par la base orthonormée

$$\mathcal{B}_{12} = \{|z+\rangle \otimes |z+\rangle\,, |z+\rangle \otimes |z-\rangle\,, |z-\rangle \otimes |z+\rangle\,, |z-\rangle \otimes |z-\rangle\}.$$

où $\mathcal{E}$ est généré par les états propres de S_z. Si vous le souhaitez, vous pourrez, dans votre copie, utiliser la notation condensée $|{+}{+}\rangle$ pour $|z+\rangle \otimes |z+\rangle$, etc.

Q21. On considère l'observable $\mathbf{1} \otimes S_z$. Quelle(s) grandeur(s) mesure cette observable ? Déterminer sa matrice (4×4), calculer ses valeurs propres. Que représentent physiquement ces valeurs propres ?

On mesure la composante verticale (selon Oz) du spin total du système des deux électrons, via l'observable $S_z^T = S_z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_z$

Q22. Déterminer sa matrice et ses valeurs propres.

Q23. Reprendre les deux questions précédentes si cette fois on mesure le spin total selon l'axe Ox et selon l'axe Oy.

Q24. On dispose désormais des observables de mesure des trois composantes du spin total. En déduire la matrice de l'observable mesurant le module au carré du spin total, $(S^T)^2$, et calculer ses valeurs propres. Commentez (quel est le spin équivalent du système des deux électrons ?)

Formulaire

L'état quantique d'une particule (sans spin) est décrit par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{L}^2$. La quantité $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ est *interprétée* comme la **densité volumique de probabilité de présence** au point $\mathbf{r} = (x, y, z)$ (Postulat 1)

Le produit scalaire de 2 fonctions d'onde $\varphi_1(\mathbf{r})$ et $\varphi_2(\mathbf{r})$ (ou indifférement, des kets $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$) est le nombre complexe

$$\langle\varphi_1|\,\varphi_2\rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} \varphi_1(\mathbf{r})^* \varphi_2(\mathbf{r})\, dV = \langle\varphi_2|\,\varphi_1\rangle^*$$

On associe à chaque grandeur physique $\mathcal{A}$ une observable A : c'est un opérateur hermitique, i.e. tel que $A = A^\dagger$ (rappel : $A^\dagger$ est l'opérateur adjoint, défini comme ${}^T(A^*)$, i.e., c'est la matrice transposée de la conjuguée complexe de A).

Exemples importants :

- l'opérateur **position** $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$, défini par $X\,|\mathbf{r}\rangle = x\,|\mathbf{r}\rangle$, ou de manière équivalente $X[\varphi(\mathbf{r})] = x\varphi(\mathbf{r})$, et *idem* pour Y et Z ;
- l'opérateur **impulsion** $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ défini par $P_x\,|\mathbf{p}\rangle = p_x\,|\mathbf{p}\rangle$, ou de manière équivalente $P_x[\varphi(\mathbf{r})] = -i\hbar\partial\varphi(\mathbf{r})/\partial x$;
- l'opérateur hamiltonien (énergie mécanique) $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$.

La famille $\{|\varphi_n\rangle\}$ des vecteurs propres de l'opérateur A est orthonormée. Le spectre des valeurs propres $\{a_n\}$ représente l'ensemble des résultats possibles d'une mesure de $\mathcal{A}$ (postulat 3). La probabilité de trouver a_n lors d'une mesure de A, la particule étant juste **avant la mesure** dans l'état $|\psi\rangle$, est $|\langle\varphi_n|\,\psi\rangle|^2$ (postulat 4). Réduction du paquet d'onde : après une mesure donnant la valeur a_n, l'état du système est $|\varphi_n\rangle$ (postulat 5).

Grandeurs statistiques relatives aux résultats de N mesures de $\mathcal{A}$ ($N \to \infty$), la particule étant dans l'état $|\psi\rangle$:

- moyenne : $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|\,A\,|\psi\rangle$
- écart-type : $\delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$

États stationnaires

États propres de l'Hamiltonien : $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ où les E_n sont les niveaux d'énergie.

Pour les problèmes qu'on peut approximer par des modèles unidimensionnels : si $V(x)$ est constant par morceaux : résoudre $H[\varphi_n(x)] = E_n\varphi_n(x)$ dans chaque région, puis imposer des conditions de raccordement sur $\varphi_n(x)$ et $\varphi_n'(x)$ entre chaque région ; les niveaux d'énergie E_n sont les valeurs de E telles que $\varphi_n(x) \in \mathcal{L}^2$;

Évolution temporelle d'un état quantique

L'évolution est régie par l'équation de Schrödinger (postulat 6) : $i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$

Évolution d'un état stationnaire $|\psi(0)\rangle = |\varphi_n\rangle$: $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|\varphi_n\rangle = e^{-i\omega_nt}|\varphi_n\rangle$, relation qui s'étend à une superposition linéaire quelconque d'états stationnaires,

$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}|\varphi_n\rangle$.

L'oscillateur harmonique

États stationnaires d'une particule plongée dans un potentiel quadratique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$:

- niveaux d'énergie : $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ avec n positif ou nul ;
- fonctions d'onde : voici les 3 premières,

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$
$$\varphi_1(x) = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$
$$\varphi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{64\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(4x^2 - 2\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

- opérateurs de création ($a^\dagger$) et annihilation (a) : $a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$ et $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ avec par définition $a = X\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} + i\frac{P_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ et $a^\dagger = X\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} - i\frac{P_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$.

Application : approximation d'un potentiel $V(x)$ au voisinage d'un minimum.

Moment cinétique orbital & spin

Moment cinétique caractérisant le mouvement orbital de l'électron autour du noyau : $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$. En coordonnées sphériques (r, θ, ϕ), on a notamment $L_z = -ih\frac{\partial}{\partial\phi}$.

Particule de spin $\frac{1}{2}$ Spin : moment cinétique propre de la particule. Comme pour le moment cinétique orbital, on ne peut mesurer que sa projection selon une direction arbitraire à la fois, par exemple l'axe Oz : $\sigma_z = \pm\frac{1}{2}$.

Notation de Dirac : $|\chi\rangle = \mu|+z\rangle + \nu|-z\rangle$, où $|+z\rangle$ et $|-z\rangle$ sont une base d'états propres de l'opérateur de spin S_z.

Opérateurs de spin : $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$. Représentation matricielle dans la base $\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$