Université Moulay Ismaïl
F.S.T.E.
Département de physique

Année Universitaire 2015/2016
Parcours : MIP S4 (Section 1)
Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 1

Exercice 1: Rayonnement du corps noir

1/- On rappelle que la densité d'énergie du champ électromagnétique se produisant dans le volume intérieur du corps noir est donnée par:

$$\xi_T^{R-J}(\nu) = \frac{8\pi k_B T}{C^3}\nu^2 \qquad \text{(modèle de Rayleigh-Jeans)}$$

et par:

$$\xi_T^{P}(\nu) = \frac{8\pi h}{C^3}\frac{\nu^3}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} \qquad \text{(modèle de Planck)}$$

Montrer qu'à basse fréquence, la formule de Planck peut être approchée par celle de Rayleigh-Jeans.

2/- Dans la théorie de Planck, la loi de répartition spectrale du rayonnement du corps noir est telle que la probabilité qu'un photon ait une fréquence comprise entre ν et $\nu+d\nu$ dans la cavité du corps noir à la température T soit égale à:

$$d\,Pr = \rho(\nu,T)d\nu = a\xi_T^P(\nu)d\nu$$

a- Calculer le coefficient de proportionnalité a. (on donne: $\int_0^{+\infty}\frac{x^3}{e^x - 1}dx = \frac{\pi^4}{15}$)

b- Evaluer la loi de répartition spectrale de Planck du rayonnement du corps noir en termes de la longueur d'onde λ et T (c-à-d calculer $\tilde{\rho}(\lambda,T)$)

c- Donner la relation qui détermine λ_m pour laquelle $\tilde{\rho}(\lambda,T)$ est maximum.

d- En assimilant le soleil à un corps noir et en admettant que le maximum d'intensité du spectre solaire se produit pour $\lambda_m = 0.5\mu$, calculer la température du soleil.

Exercice 2: Effet photoélectrique

1/- Quelle est la puissance d'une lampe à filament incandescent qui emet un rayonnement dont la longueur d'onde moyenne est $\lambda = 1{,}2\mu$. On donne le nombre de photons émis par seconde par cette lampe, soit $N = 13\times10^{20}$.

2/- On éclaire la cathode d'une cellule photoélectrique par un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 0.405\mu$, elle débite alors un courant électrique i que l'on peut compenser en portant l'anode de cette cellule à un potentiel de 1.26 V plus bas que celui de la cathode. On demande le potentiel d'extraction et le seuil en fréquence de l'effet photoélectrique du matériau constituant la cathode.

Exercice 3: Effet Compton

On considère un faisceau lumineux monochromatique de longueur d'onde λ se déplaçant dans le vide et se dirigeant vers une cible ne contenant que des électrons libres que l'on supposera au repos.

Soit m la masse de l'électron et soit λ' la longueur d'onde de la lumière diffusée après les chocs photon-électron, posons $\alpha = \frac{h}{m_o C\lambda}$.

1/- Ecrire les équations de conservation de l'impulsion et de l'énergie lors d'un choc photon-électron.

2/- Calculer la variation de la longueur d'onde $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ en fonction de λ, α et de l'angle θ que fait la direction du photon diffusé avec celle du photon incident.

3/- Calculer l'énergie du photon diffusé E'_ν en fonction de α et θ.

4/- Soit ϕ l'angle que fait la direction de l'électron après le choc avec celle du photon incident, on demande d'exprimer ϕ en fonction de α et θ.

5/- Dans le cas où $\theta = \frac{\pi}{2}$. Quelles sont les valeurs de λ', E'_ν et ϕ ?

Exercice 4: Emission photonique

Considérons l'annihilation d'un électron e^- ($q=-e$, $m=m_e$) et d'un positron e^+ ($q=e$, $m=m_e$) avec émission de photons γ: $e^+ + e^- \rightarrow n\gamma$

1/- Pour quelles valeurs de n, la réaction peut-elle se produire ? On suppose que e^- et e^+ sont pratiquement au repos quand la réaction se produit.

2/- Calculer la fréquence et la longueur d'onde supposée communes aux photons émis. Cas où n=2.

Série n°1

(théorie quantique de la lumière)

I. Rayonnement du corps noir :

1) la densité d'énergie du champ électromagnétique se produisant dans le volume intérieur du corps noir est donné par

$$\mathcal{E}_T^{R-J}(\nu) = \frac{8\pi k_B T}{C^3}\nu^2 \quad \text{modèle de Rayleigh-Jeans}$$

et par $$\mathcal{E}_T^{P}(\nu) = \frac{8\pi h}{C^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1} \quad \text{modèle de Planck}$$

Montrons que lorsque $\nu \to 0$ $\mathcal{E}_T^{P}(\nu) \longrightarrow \mathcal{E}_T^{R-J}(\nu)$:

On sait que pour ν faible $e^{\nu} \simeq 1+\nu$ d'où

$$\mathcal{E}_T^{P}(\nu) \sim \frac{8\pi h}{C^3}\frac{\nu^{\cancel{3}\,2}}{h\nu/k_BT} = \frac{8\pi k_B T}{C^3}\nu^2 = \mathcal{E}_T^{R-J}(\nu)$$

2°) (retrouvons la loi de Stefan :)

a) la probabilité pour qu'un photon ait une fréquence comprise entre ν et $\nu+d\nu$ est donnée par :

$$dP_r = \rho(\nu,T)\,d\nu = a\,\mathcal{E}_T^{P}(\nu)\,d\nu$$

avec a : loi de Stefan et $\rho(\nu,T)$ = loi de répartition spectrale à la température T.

Or $$\int_0^{+\infty} dP_r = 1 = a\int_0^{+\infty}\mathcal{E}_T^{P}(\nu)\,d\nu$$

$$= a\,\frac{8\pi h}{C^3}\int_0^{+\infty}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1}\,d\nu$$

sachant que $$\int_0^{+\infty}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx = \frac{\pi^4}{15}$$

on pose donc $x = \frac{h\nu}{k_BT} \Rightarrow dx = \frac{h}{k_BT}d\nu \rightsquigarrow \begin{cases}\nu^3 = \frac{k_B^3T^3}{h^3}x^3\\ d\nu = \frac{k_BT}{h}dx\end{cases}$

$$\Rightarrow 1 = a\,\frac{8\pi h}{C^3}\times\frac{k_B^3T^3}{h^3}\times\frac{k_BT}{h}\times\frac{\pi^4}{15} = a\,\frac{8\pi^5T^4k_B^4}{15C^3h^3}$$

$$\Rightarrow \boxed{a = \frac{15C^3h^3}{8\pi^5k_B^4T^4}}$$

La loi de Stefan est déduite de la puissance totale rayonnée soit

$$P^{P}(\nu) = \int_{0}^{+\infty} \mathcal{E}^{P}(\nu)\, d\nu = \sigma T^4 \quad \text{avec } \sigma = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15 h^3 C^3}$$

σ = cte de Stefan.
$= 7{,}62\ 10^{-16}\ W\ m^{-3} K^{-4}$

b) Evaluons la loi de répartition spectrale de Planck du rayonnement du corps noir en termes de la longueur d'onde λ et T (i.e $\tilde{\rho}(\lambda, T)$)

on a $dP_r = \tilde{\rho}(\lambda,T)\, d\lambda = \rho(\nu,T)\, d\nu$

or $\rho(\nu,T) = a\, \mathcal{E}_T^{P}(\nu) = a \times \frac{8\pi h}{C^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_BT} - 1}$

et $\nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$

$$\Rightarrow \rho(\nu,T)\, d\nu = a \times \frac{8\pi h}{C^3} \frac{C^3/\lambda^3}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} \times \frac{-c}{\lambda^2}\, d\lambda$$

i.e: $d\lambda\, \rho(\lambda,T) = +a \times \frac{8\pi h C}{\lambda^5} \times \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} \times (-d\lambda)$

$$= \frac{15 h^3 C^{4}}{\cancel{8}\pi^{4} k_B^4 T^4} \times \frac{\cancel{8}\pi h}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} (-d\lambda)$$

$$= \frac{15 h^4 C^4}{\pi^4 k_B^4 T^4 \lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} (-d\lambda)$$

$$= \frac{15 k_B T}{\pi^4 hc} \frac{\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right)^5}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} (-d\lambda)$$

note le (-) restera lié à $(-d\lambda)$ car ν et λ sont inversement proportionnels ce qui veut dire que par le changement de variable ν en λ il y a changement des bornes de l'intégrale donnant la probabilité totale $\Rightarrow -d\lambda$ pour ajuster ces bornes.

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{\rho}(\lambda,T) = \frac{15 k_B T}{\pi^4 hC} \frac{(hc/k_BT\lambda)^5}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_BT}\right) - 1} > 0}$$

c) Calculons la longueur d'onde λ pour laquelle $\tilde{\rho}(\lambda, T)$ est maximum.

note comme $\rho = a\xi$ et ξ est une fonction qui admet un maximum $\Rightarrow \rho$ admet un maximum

$\tilde{\rho}(\lambda, T)$ est maximum pour λ tel que $\dfrac{d\tilde{\rho}}{\partial\lambda} = 0$

$$\tilde{\rho}(\lambda, T) = \frac{15\, k_B T}{\pi^4 hc} \; \frac{\left(hc/k_B T\lambda\right)^5}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}$$

on pose $x = \dfrac{hc}{k_B T \lambda}$ $\Rightarrow$ $\tilde{\rho}(x, T) = \dfrac{15 k_B T}{\pi^4 hc} \; \dfrac{x^5}{e^x - 1}$

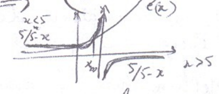
$$\Rightarrow \frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial\lambda} = \frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial x} \times \frac{\partial x}{\partial \lambda} = \frac{15\, k_B T}{\pi^4 hc} \, \frac{\partial x}{\partial \lambda} \times \frac{5x^4(e^x - 1) - x^5 e^x}{(e^x - 1)^2} = 0$$

1er cas : $\dfrac{\partial x}{\partial \lambda} = 0 = \dfrac{-hc}{k_B T \lambda^2}$ possible si $\lambda \longrightarrow +\infty$, solution inacceptable.

2e cas : $e^x - 1 \longrightarrow \infty$ possible si $x \longrightarrow +\infty$ i.e $\lambda \longrightarrow 0$ corps noir non irradié (aucune utilité)

3e cas : $5(e^x - 1) - x e^x = 0 \Rightarrow (5 - x) e^x - 5 = 0$

$$\Rightarrow e^x = \frac{5}{5 - x}$$



on peut déterminer x par la méthode graphique ce qui nous donne $x \simeq 4{,}96$ ou encore $\boxed{\lambda_m \simeq \dfrac{0{,}29}{T} \text{ (cm)}}$

avec bien entendu
$c = 3 \cdot 10^8$ m/s $= 3 \cdot 10^{10}$ cm/s
$h = 6{,}624 \cdot 10^{-34}$ J/s
$k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ J/°K

d) si on suppose que le soleil est un corps noir et en admettant que le maximum d'intensité du spectre solaire se produit pour $\lambda_m = 0{,}5\ \mu m$ on déduit que la température du soleil est $\boxed{T = 5800\,°K}$ (du moins à sa surface !)

II – Effet photoélectrique

1) La puissance rayonnée ~~par unité de temps~~ par la lampe = énergie rayonnée par unité de temps = nombre de photons émis par unité de temps multiplié par l'énergie d'un photon :

$$P = N h\nu = N \frac{hc}{\lambda} = 13\, 10^{20} \times \frac{6{,}624\, 10^{-34} \times 3\, 10^{8}}{1{,}2\, 10^{-6}}$$

soit $\boxed{P = 215 \text{ watts}}$ ou J/s

2°/ $h\nu = h\nu_0 + \mathcal{E}$ avec $\mathcal{E}$ = énergie communiquée à l'e⁻ pour lui permettre le déplacement entre l'anode et la cathode.

$= eV_0 + \mathcal{E}$

$= eV_0 + eV$ avec $V = |-1,26| = 1,26$ volts.

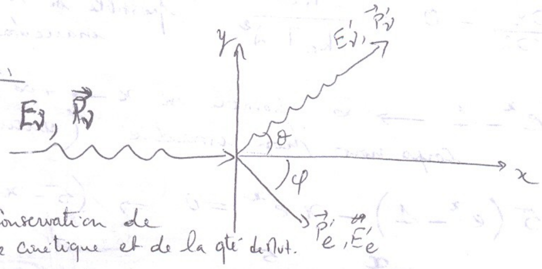
$\Rightarrow V_0 = \frac{h\nu}{e} - V = \frac{hc}{e\lambda} - V$

$e = 1,6\ 10^{-19} C$, $\lambda = 0,405\ 10^{-6} m$ $\Big\} \Rightarrow V_0 = 1,80$ volts.

Le seuil en fréquence : $\boxed{\nu_0 = \frac{eV_0}{h} = 43504\ 10^{10}\ Hz}$

$\Rightarrow \lambda_0 = \frac{C}{\nu_0} = 0,69\ \mu m$.

III. Effet Compton.



1) choc élastique ⇒ Conservation de l'énergie cinétique et de la qté de Mvt.

la projection sur Ox donne : $P_\nu = P'_\nu \cos\theta + P'_e \cos\varphi$ (1)

* la projection sur Oy donne : $0 = P'_\nu \sin\theta - P'_e \sin\varphi$ (2)

On sait que : $P_\nu = \frac{E_\nu}{C} = \frac{h\nu}{C} = \frac{h}{\lambda}$ de même $P'_\nu = \frac{h}{\lambda'}$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} (1) &: \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'}\cos\theta + P'_e\cos\varphi \\ (2) &: 0 = \frac{h}{\lambda'}\sin\theta - P'_e\sin\varphi \end{aligned}}$$

* Pour la conservation de l'énergie on a :

$$E_\nu + E_e = E'_\nu + E'_e$$

Soit $$\boxed{\frac{hc}{\lambda} + m_0C^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \left[m_0^2C^4 + P_e'^2C^2\right]^{1/2}} \quad (3)$$

2°/ $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = ?$

$(1) \Rightarrow P'_e \cos\varphi = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\cos\theta$

$(2) \Rightarrow P'_e \sin\varphi = \frac{h}{\lambda'}\sin\theta$

$(1)^2 + (2)^2 \Rightarrow P_e'^2 = \left(\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\cos\theta\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\sin\theta\right)^2$ (4)

or d'après (3) on a :

$$P_e'^2 C^2 = \left[\left(\frac{hC}{\lambda} - \frac{hC}{\lambda'}\right) + m_0 C^2\right]^2 - m_0^2 C^4$$

$$= h^2 C^2 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)^2 + 2 m_0 C^2 (hC)\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)$$

soit $$P_e'^2 = h^2\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)^2 + 2 m_0 h C\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) \qquad (5)$$

Comme (4) = (5) alors on déduit :

$$h^{\cancel{2}}\left(\cancel{\frac{1}{\lambda^2}} + \cancel{\frac{1}{\lambda'^2}} - \frac{\cancel{2}}{\lambda\lambda'}\cos\theta\right) = h^{\cancel{2}}\left(\cancel{\frac{1}{\lambda^2}} + \cancel{\frac{1}{\lambda'^2}} - \frac{\cancel{2}}{\lambda\lambda'}\right) + \cancel{2} m_0 h C\left(\frac{\lambda'-\lambda}{\lambda\lambda'}\right)$$

$$\Rightarrow \qquad m_0 C\, \Delta\lambda = h(1 - \cos\theta)$$

posons $\alpha = \dfrac{h}{m_0 C \lambda} \Rightarrow \dfrac{h}{m_0 C} = \alpha\lambda$ on a alors :

$$\boxed{\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \alpha\lambda(1 - \cos\theta)}$$

<u>Note</u> $1 - \cos\theta = 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \Rightarrow$ l'expression vue en cours.

$\dfrac{h}{m_0 C}$ est appelée longueur d'onde de Compton $\simeq 0{,}024$ Å

3°) $E'_\nu = ?$

$$E'_\nu = h\nu' = \frac{hC}{\lambda'} = \frac{hC}{\lambda\left[\alpha(1-\cos\theta) + 1\right]} = \frac{E_\nu}{\alpha(1-\cos\theta)+1}$$

$$\boxed{E'_\nu = \frac{E_\nu}{\alpha(1-\cos\theta)+1}}$$

$$\frac{\frac{h}{\lambda'}\sin\theta}{\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\cos\theta} = \frac{\sin\theta}{\frac{\lambda'}{\lambda} - \cos\theta}$$

4°) $\varphi = ?$

on a : $$\left.\begin{aligned} P'_e \cos\varphi &= \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\cos\theta \\ P'_e \sin\varphi &= \frac{h}{\lambda'}\sin\theta \end{aligned}\right\} \xRightarrow{(2)/(1)} tg\varphi = \frac{\sin\theta}{\frac{\lambda'}{\lambda} - \cos\theta}$$

$$\Rightarrow tg\varphi = \frac{\sin\theta}{\left[\alpha(1-\cos\theta)+1\right] - \cos\theta} = \frac{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}{(\alpha+1)\left(2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)} = \frac{1}{(1+\alpha)tg\frac{\theta}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{tg\varphi = \frac{1}{(1+\alpha)\, tg\frac{\theta}{2}}}$$

5°) pour $\theta = \frac{\pi}{2}$ $\quad \begin{cases} \lambda' = \lambda(1+\alpha) \\ E'_\gamma = \dfrac{E_\gamma}{1+\alpha} \\ tg\varphi = \dfrac{1}{1+\alpha} \end{cases}$

IV- Annihilation d'électron :

$$e^+ + e^- \longrightarrow n\gamma$$

1) d'après la conservation des qtés de mvts on a :

$$\vec{P}_{e^+} + \vec{P}_{e^-} = \sum_{i=1}^{n} \vec{P}_\gamma$$

Note le choc est inélastique car il y a changement de l'état interne de l'électron qui se transforme complètement

or le positron et l'électron sont dits au repos $\Rightarrow$

$$\vec{0} + \vec{0} = \sum_{i=1}^{n} \vec{P}_\gamma = \vec{0} \Rightarrow \boxed{n \geqslant 2}$$

il faut donc que n soit au moins = 2 de sorte que l'on ait deux qtés de mvts de photons de sens opposés.

2°) Le choc étant inélastique, l'énergie mise en jeu avant le choc se transforme complètement en énergie du rayonnement émis après le choc :

$$E_{e^-} + E_{e^+} = n E_\gamma = n h\nu$$

e^- et e^+ sont au repos donc :

$$2 m_0 C^2 = n h \nu$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{1}{n} \frac{2 m_0 C^2}{h}$$

pour n = 2 $\quad \nu_{max} = \dfrac{m_0 C^2}{h} \Rightarrow \lambda_{min} = \dfrac{C}{\nu_{max}} = \dfrac{h}{m_0 C} = 0{,}024\ \text{Å}$

= longueur d'onde de Compton.

Université Moulay Ismaïl
F.S.T.E.
Département de physique

Année Universitaire 2015/2016
Parcours : MIP S4 (Section 1)
Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 2

Exercice 1:Loi de Balmer dans le modèle de Bohr

1/- Donner en introduisant la règle des quanta de Bohr les rayons r_n des orbites quantifiées de l'électron dans l'atome d'hydrogène.

2/- Calculer les niveaux d'énergie quantifiées E_n de l'atome d'hydrogène. On admettra que l'énergie potentielle électrostatique de l'électron s'annule lorsque celui-ci devient suffisamment loin du noyau.

3/- En déduire la valeur théorique de la constante de Rydberg de la loi de Balmer. La comparer à sa valeur empirique, conclusion.

On donne la masse de l'électron m_e=0.9 10^{-30} kg, sa charge électrique e=-1.6 10^{-19} C, la constante de Coulomb K=9 10^9 Nm^2C^{-2}, la constante de Planck h=6.62 10^{-34} Js et la valeur empirique de la constante de Rydberg R=10967800 m^{-1}.

Exercice 2: Les ondes de matière de Louis de Broglie

1/- Considérons un grain de poussière de diamètre d=1μ, de masse m=10^{-12}g et animé d'un mouvement de vitesse moyenne v=3mm/s.

Quelles sont la longueur d'onde λ et la fréquence ν associée à cette particule ? Dire si le traitement physique de cette particule peut relever de la mécanique classique.

2/- Mêmes questions pour un véhicule de masse m=3 Tonnes, de longueur l=6m et roulant à une vitesse v=60 km/h.

3/- En considérant les électrons accélérés sous l'effet d'un etension électrique continue V=100 Volts comme des particules non-relativistes, calculer la vitesse qu'aquiert chacun d'eux. Calculer la longueur λ de l'onde de Broglie associée au mouvement de ces électrons. Conclusion ?

Exercice III: Vitesse de groupe - vitesse de phase - loi de dispertion des ondes de de Broglie:

1/- Une onde plane électromagnétique de fréquence ν se propageant dans le vide est donnée par le champ électrique E(t,x) qui s'écrit dans les relations complexes :

$$E(t,x)= E_0 \exp(kx-\omega t); \quad \text{avec : } k = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad \omega = 2\pi\nu \quad \text{et} \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

Déterminer l'onde plane lumineuse en termes de l'impulsion p et de l'énergie E du photon; puis en fonction de p seul.

Calculer la vitesse de groupe V_p et la vitesse de phase V_φ de cette onde, conclusion.

Rappeler l'expression de l'intensité I de cette onde, l'interpréter en termes quantiques.

2/- De même, l'onde plane monochromatique de De Broglie associée à une particule en mouvement peut être représentée par la fonction d'onde : $\psi(t,x)=A\exp i(kx-\omega t)$ où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est la norme du vecteur d'onde et $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation de l'onde de matière.

Etablir une relation entre la fréquence ν et la longueur d'onde λ de cette onde de matière.

Déterminer l'onde plane de matière en fonction de l'impulsion p et de l'énergie E de la particule dans le cas général et en fonction de p seul dans la cas d'une particule libre.

Calculer, dans ce dernier cas la vitesse de groupe et celle de phase; conclusion.

Calculer l'intensité de cette onde et l'interpréter physiquement.

3/- Pour une particule relativiste, montrer que la vitesse de groupe V_g de l'onde de matière associée coincide avec la vitesse de la particule.

Montrer que la vitesse de phase $V_\varphi$de cette onde coincide avec la célérité de propagation de celle-ci et qu'elle n'a pas de réalité physique (on vérifiera l'égalité $V_g V_\varphi=C^2$)

Calculer V_g et V_φ en termes de la fréquence ν, ou d'une façon équivalente en fonction de l'énergie E. En déduire la loi de dispersion pour l'onde associée à cette particule (on calculera l'indice de réfraction relatif aux ondes de matière, défini par $n=C/V_\varphi$ en fonction de ν). Conclusion.

Série n°2
Théorie quantique de la matière

I. Loi de Balmer dans le modèle de Bohr.

1) La règle des quanta de Bohr représente la quantification du moment cinétique

$$\vec{J} = \vec{OM} \wedge m\vec{v} = \vec{r} \wedge m\vec{v} = n\hbar$$

pour un mouvement circulaire on a :

$$r \times mv = n\hbar \Rightarrow r = \frac{n\hbar}{mv} \quad (1)$$

Or pour un atome d'hydrogène si on applique le principe fondamental de la dynamique et sachant que seule la force d'interaction Coulombienne agit sur le système on a :

$$\sum \vec{F}_{ext} = \vec{F} = m\vec{\gamma}$$

K cte de Coulomb

$$\Rightarrow -F = -m\gamma_n \Leftrightarrow \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (*)$$

$$\Rightarrow m^2v^2 = \frac{mKe^2}{r} \quad (2)$$

d'où (1) $\Rightarrow$ $\boxed{r_n = \frac{n^2\hbar^2}{mKe^2}}$ $\Rightarrow$ les orbites des électrons dans un atome (ici l'hydrogène) sont quantifiées.

2) L'énergie totale $E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + E_p$

$\vec{F} = \begin{cases} F_r = -F \\ F_\theta \\ F_z \end{cases}$

or la force Coulombienne dérive du potentiel

$$\vec{F} = -\vec{grad}\, E_p \Rightarrow -F = -\frac{\partial E_p}{\partial r} = -\frac{Ke^2}{r^2}$$

soit $E_p = -\frac{Ke^2}{r} + cte$

Or par énoncé $E_p(\infty) = 0 \Rightarrow cte = 0$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ke^2}{r}$$

sachant que : $mv^2 = \frac{Ke^2}{r}$ d'après (*) on a alors

$$E = -\frac{Ke^2}{2r_n} = -\frac{K^2e^4m}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2} \quad n \in N^*$$

$$\boxed{E_n = -\frac{K^2e^4m}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2} \quad n \in N^*}$$

Ainsi $\forall n \in N^*$ $E_n < 0$; pour $n = 1$ on a : $E_1 \simeq -13,6$ eV

$$\Rightarrow \boxed{\forall n \in N^* \quad E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ eV}}$$

3°) Loi de Balmer : $h\nu_{nm} = E_n - E_m = CRh\left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{m^2}\right)$ si $E_n > E_m$ (voir cours $E_n = -\frac{CRh}{n^2}$)

$$\Rightarrow E_n = -\frac{CRh}{n^2} = -\frac{K^2 m e^4}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2}$$

$$\Rightarrow R = -\frac{n^2 E_n}{Ch} = +\frac{K^2 m e^4}{2\hbar^2 Ch}$$

$\Rightarrow$ la cte de Rydberg théorique : $\boxed{R_{th} \# 109500 \text{ cm}^{-1}}$

La cte théorique est très proche de celle expérimentale $R_{exp} = 109678 \text{ cm}^{-1}$

Conclusion : le modèle de Bohr reproduit avec un bon accord l'expérience de Balmer - Rydberg

Ex II - Ondes de matière de Louis de Broglie

Rappel : . d'après Louis de Broglie à toute particule matérielle on peut associer une onde de longueur d'onde $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

. Lorsque l'on compare λ au diamètre d de la particule on peut dire que l'étude quantique est obligatoire si $\lambda \sim d$ mais si $\lambda \ll d$ alors le traitement classique suffit.

1°) grain de poussière : $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34}}{\underbrace{10^{-12} \times 10^{-3}}_{kg} \times 3 \times 10^{-3}} = 2{,}2 \cdot 10^{-10} \mu$

$\lambda \ll d = 1\mu \Rightarrow$ On peut traiter par la mécanique classique ce grain de poussière.

Note : le calcul de ν ne peut pas se faire car la relation $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ne peut être valable que lorsque la vitesse de phase $v_\varphi = \lambda\nu$ égale à C (c'est le cas pour le photon) mais ici on ne connait pas cette vitesse.

2°) véhicule : $\lambda = \frac{h}{mv} = 1{,}32 \cdot 10^{-38} \text{ m} \ll l = 6 \text{ m} \Rightarrow$ traitement classique

3°) électrons : $E_c = eV = \frac{1}{2} m v_e^2 \Rightarrow \boxed{v_e = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \simeq 6 \cdot 10^6 \text{ m/s}}$

$v_e \lesssim C \Rightarrow$ les électrons sont des particules relativistes $\Rightarrow$ $\lambda = \frac{h}{p}$ avec $p = \frac{1}{c}\sqrt{E^2 - m^2c^4} = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$

Série n° 2 (2)

Suite de l'ex 2 :

$$\lambda = \frac{hc}{\left[E^2 - m_0^2 c^4\right]^{1/2}} \quad \text{or } E = E_t(\text{électron}) = \overbrace{\frac{1}{2} m v_e^2}^{E_c} + m_0 C^2$$

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{e^2 V^2 + 2eV m_0 c^2}} \simeq 1{,}22 \text{ Å} \Longrightarrow \boxed{MQ}$$

Ex. 3 Vitesses de groupe et de phase

1) l'onde plane s'écrit en termes de la position x et du temps t.

$$E = E_0 \exp\left[i(kx - \omega t)\right]$$

* connaissant les relations de Planck - Einstein : $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$

en termes de p et E elle s'écrit : $E(t,x) = E_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]$

ou comme $E = h\nu = pc$ $\quad E(t,x) = E_0 \exp\left[\frac{ip}{\hbar}(x - ct)\right]$

* Par définition $\quad v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \overset{\text{pour le photon}}{=} C$

$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = C$ $\quad \Big\} \Rightarrow \boxed{v_\varphi v_g = C^2}$

* l'intensité $\quad I = |E(t,x)|^2 = E^*(t,x)\, E(t,x) = |E_0|^2$

= densité de proba. de présence du photon avec une fréquence entre ν et $\nu + d\nu$

2) L'onde de Louis de Broglie : $\psi(t,x) = A\exp\left[i(kx - \omega t)\right]$

* par définition $\quad v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} \Rightarrow \boxed{\lambda\nu = v_\varphi}$

* d'après les relations de Planck - Einstein $\quad$ cas général

$$\psi(t,x) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]$$

* pour une particule libre $\quad E = E_c$ (car pas d'interaction)

or $E_c = \frac{p^2}{2m}$ $\Rightarrow$ $\psi(t,x) = A\exp\left[\frac{ip}{\hbar}\left(x - \frac{p}{2m}t\right)\right]$

∘ vitesse de groupe $\quad v_g = \frac{d\omega}{dk}$ $\quad$ or $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$

(Note l'énergie d'une particule libre est donc $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)

$$\Rightarrow v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \qquad \boxed{v_g = v}$$

• vitesse de phase : $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$ $\quad$ aucune signification physique

3°) particule relativiste :

$$E = \sqrt{p^2C^2 + m_0^2C^4} \qquad \left\{ \begin{array}{l} E = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{array} \right.$$

$$* \ v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pC^2}{E}$$

or $\left. \begin{array}{l} E = m_{rel}C^2 \\ p = m_{rel}v \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{p}{E} = \frac{v}{C^2}$ $\Bigg\} \Rightarrow \boxed{v_g = v}$

$$* \ v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi\lambda} \Rightarrow v_\varphi = \lambda\nu = \text{célérité de propagation de l'onde.}$$

or $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{C^2}{v} = \frac{C^2}{v_g}$ $\Big\} \boxed{v_\varphi \times v_g = C^2}$

$v_g = v \Rightarrow < C \Rightarrow v_\varphi > C$?! $\Rightarrow v_\varphi$ n'a pas de signification ou réalité physique.

* En termes de fréquence ou en termes d'énergie

∘ $E = h\nu = \frac{m_0C^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{C^2}}} = \frac{m_0^2C^2}{\sqrt{1 - \frac{v_g^2}{C^2}}}$

$$\Rightarrow \boxed{v_g = C\sqrt{1 - \frac{m_0^2C^4}{\underbrace{h^2\nu^2}_{E^2}}}} < C$$

m_0C^2 = énergie au repos.
$h\nu$ = énergie totale

∘ $v_\varphi \times v_g = C^2 \Rightarrow \boxed{v_\varphi = \frac{C^2}{v_g} = \frac{C}{\sqrt{1 - \frac{m_0^2C^4}{h^2\nu^2}}} \geqslant C}$

∘ Loi de dispersion :

$$n(\nu) = \frac{C}{v_\varphi} = \sqrt{1 - \frac{m_0^2C^4}{h^2\nu^2}}$$ = indice de réfraction relatif aux ondes de matière

Conclusion $\boxed{n(\nu) \leqslant 1}$

Université Moulay Ismaïl | Année Universitaire 2015/2016
F.S.T.E. | Parcours : MIP S4 (Section 1)
Département de physique | Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 3

I- Transformation de Fourier

On rappelle qu'en terme d'impulsion, la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\psi(x)$ au point p sera définie par:

$$\overline{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

On peut déduire $\psi(x)$ à partir de $\overline{\psi}(p)$ à l'aide de la transformation inverse de Fourier:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(p) e^{+ipx/\hbar} dp$$

Exercices:

1/- Calculer les transformées de Fourier $g(k) = F[\psi(x)](k)$ et $\overline{\psi}(p)$ des fonctions suivantes:

a- $\psi(x) = \begin{cases} 1/a & -a/2 \le x \le a/2 \\ 0 & |x| \rangle a/2 \end{cases}$

b- $\psi(x) = e^{\frac{-|x|}{a}}$, $a > 0$

c- $\psi(x) = e^{\frac{-x^2}{a^2}}$

On admettra que l'on a: $\displaystyle\int_{-\infty+i\alpha}^{+\infty+i\alpha} e^{-\beta z^2} dz = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{1/2} \quad \forall \alpha \in \Re$

2/- Evaluer les relations de récurrence suivantes:

$$F[\psi^{(n)}(x)](k) = (ik)^n F[\psi(x)](k)$$

et

$$\overline{\psi^{(n)}}(p) = \left(i\frac{p}{\hbar}\right)^n \overline{\psi}(p)$$

où $\psi^{(n)}(x)$ désigne la dérivée $n^{ième}$ de $\psi(x)$ dont les limites sont supposées nulles lorsque x tend vers $\pm\infty$.

3/- On appellera produit de convolution de deux fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$, l'intégrale (si elle existe) :

$$(\psi_1 * \psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y) \psi_2(x-y) dy$$

Montrer que l'on a bien : $F[(\psi_1 * \psi_2)(x)](k) = (2\pi)^{1/2} F[\psi_1(x)](k) \times F[\psi_2(x)](k)$, et
$$\overline{(\psi_1 * \psi_2)}(p) = (2\pi\hbar)^{1/2}\,\overline{\psi_1}(p)\overline{\psi_2}(p)$$

4/- Démontrer l'égalité : $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\psi_1}^*(p)\overline{\psi_2}(p)dp$, en déduire l'identité de Parseval-Plancherel : $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|\overline{\psi}(p)|^2\,dp$.

II- Fonction delta de Dirac

On introduit la fonction $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o)$ qui ne prend de valeur appréciable que dans un intevalle de longueur ε autour de x_o, et telle que : $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o)dx = 1$ (5)

on appellera fonction δ de Dirac centrée au point x_o, la limite d'une telle fonction $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o)$ lorsque ε tend vers zéro: $\delta(x-x_o) = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o)\right]$

Exercices:

1/- Montrer que les fonctions suivantes satisfont la condition (5):

a- $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o) = \begin{cases} 1/\varepsilon & -\varepsilon/2 \le x-x_o \le \varepsilon/2 \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$

b- $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o) = \frac{1}{2\varepsilon}\exp\left(-\frac{|x-x_o|}{\varepsilon}\right)$

c- $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o) = \frac{1}{\varepsilon\pi^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_o)^2}{\varepsilon^2}\right]$

d- $\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o) = \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{(x-x_o)^2+\varepsilon^2}$

2/- Démontrer la propriété fondamentale de la fonction de Dirac
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_o)f(x)dx = f(x_o)$$

Pour cela on remarquera que dans l'intervalle effectif d'intégration $\left[x_o-\frac{\varepsilon}{2}, x_o+\frac{\varepsilon}{2}\right]$, l'on a :
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^{(\varepsilon)}(x-x_o)f(x)dx \cong f(x_o)$$

3/- Calculer les transformées de Fourier $F[\delta(x-x_o)](k)$ et $\overline{\delta}(p)$ de $\delta(x-x_o)$. En déduire que $\delta(x-x_o)$ s'écrit explicitement :
$$\delta(x-x_o) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{+ik(x-x_o)}dk = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{+ip(x-x_o)/\hbar}dp \qquad (6)$$

4/- Montrer que $\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x)$, en déduire que $\delta(x)$ est paire.

5/- En utilisant l'équation (6), montrer que l'intégrale $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\psi}(p)e^{+ipx/\hbar}dp$ est bien égale à $\psi(x)$; redémontrer alors l'identité de Parseval-Plancherel.

Série n° 3 (1)

I- Transformation de Fourier

1.) Calculons les transformées de Fourier $g(k) = F[\psi(x)](k)$ et $\overline{\Psi}(p)$ des fonctions suivantes :

a- $\psi(x) = \begin{cases} 1/a & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & |x| > a/2 \end{cases}$

$$g(k) = F[\psi(x)](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{-a/2} \psi(x) e^{-ikx} dx + \int_{-a/2}^{a/2} \psi(x) e^{-ikx} dx + \int_{a/2}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{a} e^{-ikx} dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \left(\frac{-1}{ik}\right) e^{-ikx} \Big]_{-a/2}^{a/2}$$

$$= \frac{+i}{ak\sqrt{2\pi}} \left[e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{+ik a/2} \right] = \frac{2}{ak\sqrt{2\pi}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Soit $\boxed{g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\left(\frac{ka}{2}\right)}}$ $\Rightarrow \overline{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} g\left(\frac{p}{\hbar}\right)$

donc $\overline{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}$

b- $\psi(x) = e^{-|x|/a}$ $\quad a > 0$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{0} e^{+\frac{x}{a}} e^{-ikx} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{x}{a}} e^{-ikx} dx \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{0} e^{\left(\frac{1}{a} - ik\right)x} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{\left(-\frac{1}{a} - ik\right)x} dx \right]$$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a}-ik\right)} e^{\left(\frac{1}{a}-ik\right)x}\right]_{-\infty}^{0} + \frac{1}{-\frac{1}{a}-ik} \left. e^{\left(-\frac{1}{a}-ik\right)x}\right]_{0}^{+\infty}\Bigg]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\frac{1}{a}-ik} - \frac{1}{-\frac{1}{a}-ik}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{2/a}{(1/a)^2+k^2}\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\bar{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2/a}{(1/a)^2+\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2}}$$

c- $\psi(x) = e^{-x^2/a^2}$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{a^2}x^2} e^{-ikx} dx\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)} dx$$

or $\frac{x^2}{a^2} + ikx = \left(\frac{x}{a} + i\frac{ka}{2}\right)^2 + \frac{k^2a^2}{4}$

d'où $g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{a}+i\frac{ka}{2}\right)^2} dx$

on pose $u = \frac{x}{a} + i\frac{ka}{2} \Rightarrow du = \frac{dx}{a}$ $\begin{cases} x \to -\infty : u \to -\infty + i\frac{ka}{2} \\ x \to +\infty : u \to +\infty + i\frac{ka}{2}\end{cases}$

donc : $g(k) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \int_{-\infty+i\frac{ka}{2}}^{+\infty+i\frac{ka}{2}} e^{-u^2} du$

Sachant que $\int_{-\infty+i\alpha}^{+\infty+i\alpha} e^{-\beta z^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$ $\forall \alpha \in \mathbb{R}$

nous avons :

$$g(k) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \times \sqrt{\pi}$$

Soit $\boxed{g(k) = \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}}}$

d'où : $\bar{\Psi}(p) = \frac{a}{\sqrt{2\hbar}} e^{-\left(p^2a^2/4\hbar^2\right)}$

2) évaluons les relations de récurrence :

$$F\left[\psi^{(n)}(x)\right](k) = (ik)^n F\left[\psi(x)\right](k) \quad (*)$$

* pour $n=1$

$$F\left[\psi'(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi'(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

on pose $\begin{cases} \psi'(x) = f'(x) \\ e^{-ikx} = g(x) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f(x) = \psi(x) \\ g'(x) = -ik\, e^{-ikx} \end{cases}$

$$F\left[\psi'(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \cancel{\left[\psi(x) e^{-ikx}\right]_{-\infty}^{+\infty}}^{\to 0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \times (-ik) \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (ik) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, e^{-ikx} = ik\; F\left[\psi(x)\right](k)$$

* Supposons l'égalité $(*)$ vraie pour l'ordre n et montrons qu'elle l'est pour l'ordre $n+1$:

$$F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{(n+1)}(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

on pose $\begin{cases} \psi^{(n+1)}(x) = f'(x) \\ e^{-ikx} = g(x) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f(x) = \psi^{(n)}(x) \\ g'(x) = (-ik)\, e^{-ikx} \end{cases}$

$$\Rightarrow F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \cancel{\left[\psi^{(n)}(x)\, e^{-ikx}\right]_{-\infty}^{+\infty}}^{\to 0} + ik \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{(n)}(x) e^{-ikx} dx \right\}$$

$$= (ik)\, F\left[\psi^{(n)}(x)\right](k) = ik \times (ik)^n\, F\left[\psi(x)\right](k)$$

donc : $$F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = (ik)^{n+1} F\left[\psi(x)\right](k)$$

Il s'en suit que : $$\overline{\psi^{(n)}(p)} = \left(i\frac{p}{\hbar}\right)^n \overline{\psi}(p)$$

3°) Sachant que le produit de convolution est donné par :

$$(\psi_1 * \psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, \psi_2(x-y)\, dy$$

montrons que : $F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \sqrt{2\pi}\, F\left[\psi_1(x)\right](k)\, F\left[\psi_2(x)\right](k)$

$$F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1 * \psi_2)(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, \psi_2(x-y)\, dy \right) e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(x-y)\, e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, e^{-iky}\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(x-y)\, e^{-ik(x-y)}\, dx$$

on pose $u = x - y \Rightarrow du = dx$

$$\Rightarrow F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, e^{-iky}\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(u)\, e^{-iku}\, du$$

$$\Rightarrow F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \sqrt{2\pi}\, F\left[\psi_1(x)\right](k)\, F\left[\psi_2(x)\right](k)$$

(x, y ou u sont des variables muettes)

Il s'en suit que :

$$\boxed{\overline{\psi_1 * \psi_2}(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\; \overline{\psi_1}(p)\, \overline{\psi_2}(p)}$$

4) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx \overset{?}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_1^*(p)\,\overline{\psi}_2(p)\,dp$$

par définition :
$$\overline{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, e^{-ikx}\,dx \qquad k = \frac{p}{\hbar}$$
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(p)\, e^{+ikx}\,dp \qquad p/\hbar$$

donc :
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_2(p)\, e^{ipx/\hbar}\,dp \right) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_2(p)\,dp \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\, e^{ipx/\hbar}\,dx}_{\overline{\psi}_1^*(p)\, *\, \sqrt{2\hbar\pi}}$$

$$\Longrightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \int \psi_1^*(p)\,\overline{\psi}_2(p)\,dp}$$

dans le cas où $\psi_1 = \psi_2$ nous aurons :
$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\overline{\psi}(p)|^2\,dp.}$$ identité de Parseval - Plancherel

II - Fonction delta de Dirac :

$$\delta(x - x_0) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left[\delta^{(\varepsilon)}(x - x_0) \right]$$

avec $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx = 1$$

1) a) $$\delta^{(\varepsilon)}(x-x_0) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} & -\frac{\varepsilon}{2} \leq x-x_0 \leq \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

satisfait-elle la relation précédente ?

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx = \cancel{\int_{-\infty}^{-\varepsilon/2} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx}^{\to 0} + \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx$$

$$+ \cancel{\int_{\varepsilon/2}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx}^{\to 0}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon}\Big[x\Big]_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} = 1$$

b) $$\delta^{(\varepsilon)}(x-x_0) = \frac{1}{2\varepsilon} \exp\left(-\frac{|x-x_0|}{\varepsilon}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx = \frac{1}{2\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{|x-x_0|}{\varepsilon}\right) dx$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\left[\int_{-\infty}^{x_0} \exp+\left(\frac{x-x_0}{\varepsilon}\right) dx + \int_{x_0}^{+\infty} \exp-\left(\frac{x-x_0}{\varepsilon}\right) dx\right]$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\left[\varepsilon \exp\frac{x-x_0}{\varepsilon}\Big]_{-\infty}^{x_0} - \varepsilon \exp\frac{-x+x_0}{\varepsilon}\Big]_{x_0}^{+\infty}\right]$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\left[\varepsilon(1) + \varepsilon\right] = 1.$$

c) $$\delta^{(\varepsilon)}(x-x_0) = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\varepsilon^2}\right]$$ on pose $x - x_0 = z$, $\beta = \frac{1}{\varepsilon^2}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x-x_0)\,dx = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp -\beta z^2\, dz = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} * \varepsilon\sqrt{\pi} = 1.$$

Université Moulay Ismaïl
F.S.T.E.
Département de physique

Année Universitaire 2014/2015
Parcours : MIP S4 (Section 2)
Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 4

I- Opérations sur les opérateurs linéaires

1/- Trace d'un opérateur: on définit la trace d'un opérateur linéaire A par

$$Tr(A) = \sum_{i=1}^{n} \langle U_i | A | U_i \rangle \text{ dans la base } (|U_i\rangle)$$

$$Tr(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \alpha | A | \alpha \rangle d\alpha \text{ dans la base } (|\alpha\rangle)$$

Montrer que Tr(AB)=Tr(BA). En déduire que la trace est invariante par pérmutation circulaire: Tr(ABC)=Tr(CAB)=Tr(BCA).

2/- Opérateurs adjoints: montrer que si deux opérateurs A et B sont adjoints l'un de l'autre dans une représentation donnée $\{U_i\}$, alors ils le sont dans n'importe quelle autre représentation $\{W_i\}$

3/- Opérateurs Hermitiques - Observables: soit H un opérateur Hermitique et soient $|\varphi_k\rangle$ ses vecteurs propres normés correspondant à ses valeurs propres E_k toutes non dégénérées: $H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$, k=1,2....n=dimension de l'espace des états. Considérons l'opérateur $U(k,l) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$, on demande de:

a)- calculer l'adjoint de U(k,l). Conclusion.

b)- établir la relation $U(k,l)U^+(k',l') = \delta_{ll'} U(k,k')$

c)- calculer le commutateur [H,U(k,l)].

4/- Fonctions d'opérateurs: par analogie avec les fonctions d'une variable réelle x, développables en séries entières: $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k x^k$, nous définissons une fonction F de l'opérateur linéaire A par le développement en séries entières: $F(A) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k A^k$.

Il est facile de vérifier que [A,F(A)]=0 quelque soient A et F(A).

- démontrer le théorème suivant: si B commute avec [A,B] alors quelque soit F(B) l'on a $[A, F(B)] = [A, B]\dfrac{\partial F(B)}{\partial B}$ (on montrera que $[A, B^k] = [A, B]kB^{k-1}$

- montrer que si $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ alors $F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle$

II- Les observables X et P:

1/- En calculant $\langle x|[X,P]|\psi\rangle$ et $\langle p|[X,P]|\psi\rangle$ montrer de deux façons différentes que l'on a $[X,P] = i\hbar\mathbb{1}$.

2/- En déduire que pour toute fonction V de l'observable X et pour toute fonction E_c de l'observable P, l'on a $\left[P, V(X)\right] = -i\hbar \frac{\partial V(X)}{\partial X}$ et $\left[X, E_c(P)\right] = i\hbar \frac{\partial E_c(P)}{\partial P}$.

Cas particuliers: $V(X) = \frac{1}{2} m w^2 X^2$ et $E_c(P) = \frac{P^2}{2m}$

3/- Dans un problème à une dimension, on considère une particule dont l'Hamiltonien H s'écrit $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ tel que $H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$. En considérant le commutateur [X,H], montrer que $\langle\varphi_k|P|\varphi_l\rangle = \alpha\langle\varphi_k|X|\varphi_l\rangle$ où α est un coefficient scalaire que l'on déterminera.

En déduire, en introduisant la relation de fermeture relative à la base $\left(|\varphi_k\rangle\right)$ l'égalité:

$$\sum_l \left(E_k - E_l\right)^2 \left|\langle\varphi_k|X|\varphi_l\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle\varphi_k|P^2|\varphi_k\rangle$$

I - Opérations sur les opérateurs:

Exercice n° 1 : Trace d'un opérateur

* Montrons que $tr(AB) = tr(BA)$

– Cas discret: $tr(A) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A|u_i\rangle$

$$\Rightarrow tr(AB) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A\underset{RF}{\wedge}B|u_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A\mathbb{1}_n B|u_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A\left(\sum_{j=1}^{n}|u_j\rangle\langle u_j|\right)B|u_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|B|u_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle u_j|B|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle = \sum_{j=1}^{n}\langle u_j|BA|u_j\rangle$$

$$= tr(BA)$$

– Cas Continue: $tr(A) = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\alpha|A|\alpha\rangle d\alpha$

$$tr(AB) = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\alpha|AB|\alpha\rangle d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \langle\alpha|A\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|\beta\rangle\langle\beta|d\beta\right)B|\alpha\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\int_{-\infty}^{+\infty} d\beta\left(\langle\alpha|A|\beta\rangle\langle\beta|B|\alpha\rangle\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\int_{-\infty}^{+\infty} d\beta\,\langle\beta|B|\alpha\rangle\langle\alpha|A|\beta\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta\,\langle\beta|BA|\beta\rangle = tr(BA)$$

$$\Rightarrow \boxed{\forall \text{ la base} \quad Tr(AB) = Tr(BA)}$$

* Montrons que $Tr(ABC) = Tr(BCA) = tr(CAB)$

$$Tr(ABC) = tr[(AB)C] = tr[C(AB)] = tr[(CA)B] = tr(BCA)$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{La trace reste invariante par permutation circulaires de trois opérateurs}}$

Exercice n° 2 : Opérateurs adjoints :

Rappel: A et A^+ sont dits adjoints l'un de l'autre si

$$\langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

Montrons que si A et B (A^+) sont adjoints l'un de l'autre dans la base $\{u_i\}$ ils le sont dans toute autre base $\{w_i\}$.

on a: $\langle u_i|B|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$ dans $\{u_i\}$

$$\langle w_i \underset{RF}{|} B \underset{}{|} w_j\rangle = \langle w_i|\mathbb{1}_n B\mathbb{1}_n|w_j\rangle = \langle w_i|\left(\sum_k|u_k\rangle\langle u_k|\right)B\left(\sum_l|u_l\rangle\langle u_l|\right)|w_j\rangle$$

$$= \sum_{l,k}\langle w_i|u_k\rangle\underbrace{\langle u_k|B|u_l\rangle}_{=\langle u_l|A|u_k\rangle^*}\langle u_l|w_j\rangle = \sum_{l,k}\langle w_i|u_k\rangle\left(\langle u_l|A|u_k\rangle\right)^*\langle u_l|w_j\rangle$$

$$\langle w_i|B|w_j\rangle = \sum_{l,k} \left(\langle u_k|w_i\rangle\right)^* \left(\langle u_l|A|u_k\rangle\right)^* \left(\langle w_j|u_l\rangle\right)^*$$

$$= \sum_{l,k} \left[\langle u_k|w_i\rangle \langle u_l|A|u_k\rangle \langle w_j|u_l\rangle\right]^*$$

$$= \sum_{l,k} \left[\langle w_j|u_l\rangle \langle u_l|A|u_k\rangle \langle u_k|w_i\rangle\right]^*$$

$$= \left(\langle w_j|A|w_i\rangle\right)^*$$

ainsi $\boxed{\langle w_i|B|w_j\rangle = \left(\langle w_j|A|w_i\rangle\right)^* \Leftrightarrow \text{B et A sont adjoints l'un de l'autre dans la base } \{w_i\}}$

<u>Exercice n°3</u> : Opérateurs hermitiques – Observables.

H est hermitique $\Leftrightarrow H = H^+$

$|\varphi_k\rangle$ $\vec{v}_p$ de H avec v_p $|\varphi_k\rangle \Leftrightarrow H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle \quad k = 1, \dots n.$

on a : $U(k,l) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$

a) l'adjoint de $U(k,l)$: $U^+(k,l) = (\langle\varphi_l|)^+ (|\varphi_k\rangle)^+ = |\varphi_l\rangle\langle\varphi_k|$

$$= U(l,k) \neq U(k,l)$$

$\boxed{U(k,l) \text{ n'est donc pas hermitique.}}$

Si $k = l$ $\quad U(k,l) = U(l,l) = U(k,k) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$ c'est l'opérateur projecteur puisque les $|\varphi_k\rangle$ sont normés ($\langle\varphi_k|\varphi_k\rangle = 1$) ; il est donc hermitique.

b) $U(k,l)\, U^+(k',l') \overset{?}{=} \delta_{ll'}\, U(k,k')$

$$U(k,l)\, U^+(k',l') = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|\varphi_{l'}\rangle\langle\varphi_{k'}| = \langle\varphi_l|\varphi_{l'}\rangle\, |\varphi_k\rangle\langle\varphi_{k'}|$$

$= \delta_{ll'}\, U(k,k')$ d'après la relation d'orthonormalisation dans $\{|\varphi_k\rangle\}$

c) <u>N.B</u> Comme H est hermitique et ses vecteurs propres forment une base orthonormée <u>Complète</u> c'est une <u>Observable</u>.

$$[H, U(k,l)] = H\,U(k,l) - U(k,l)\,H$$

$$= H|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|H$$

$$= E_k|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|E_l^*$$

or les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles $\Rightarrow E_l^* = E_l$

$$\Rightarrow [H, U(k,l)] = (E_k - E_l)\,|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$$

$$\Leftrightarrow \boxed{[H, U(k,l)] = (E_k - E_l)\, U(k,l)}$$

Série n°4 (2)

Exercice n°4 fonctions d'opérateurs :

Soit A un opérateur linéaire et f une fonction associée telle que :

$$F(A) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k A^k$$

* Montrons que si B commute avec $[A,B]$ alors $\forall F(B)$ on a :

$$[A, F(B)] = [A,B] \frac{\partial F(B)}{\partial B}$$

pour cela montrons d'abord que : $[A,B^k] = [A,B] k B^{k-1}$

et cela par récurrence :

* pour $k=0$ $[A, \mathbb{1}] = 0 = [A,B] \times 0 \times B^{-1}$
* pour $k=1$ $[A,B] = [A,B]$
* pour $k=2$ $[A,B^2] = AB^2 - B^2 A$

or $[A,BC] = B[A,C] + [A,B]C$

$\Rightarrow [A,B^2] = B[A,B] + [A,B]B$

mais comme B commute avec $[A,B]$ $\Big\} \Rightarrow [A,B^2] = [A,B]\, 2B$

* on suppose que la relation est vraie pour $(k-1)$

$$[A,B^{k-1}] = [A,B](k-1) B^{k-2}$$

+ montrons qu'elle reste vraie à l'ordre k :

$$[A,B^k] = [A, B B^{k-1}] = B[A,B^{k-1}] + [A,B]B^{k-1}$$

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

B commute avec $[A,B]$ $\Rightarrow [A,B^k] = [A,B](k-1) B B^{k-2} + [A,B]B^{k-1}$

$$= [A,B](k) B^{k-1}$$

donc pour le théorème : on pose : $F(B) = \sum_k f_k B^k$

$$[A,F(B)] = [A, \sum_k f_k B^k] = A \sum_k f_k B^k - \sum_k f_k B^k A$$

$$= \sum_k f_k AB^k - \sum_k f_k B^k A = \sum_k f_k [A, B^k]$$

$$= \sum_k f_k [A,B] k B^{k-1} = \underbrace{[A,B]}_{\text{ne dépend pas de } k} \underbrace{\sum_k f_k k B^{k-1}}_{\frac{\partial F(B)}{\partial B}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\forall F(B) : \quad [A,F(B)] = [A,B] \frac{\partial F(B)}{\partial B}}$$

* Montrons que si $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ alors $F(A)|\psi\rangle = F(a)|\psi\rangle$

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$$

$$F(A)|\varphi\rangle = \sum_k f_k A^k|\varphi\rangle = \sum_k f_k A^{k-1}(A|\varphi\rangle) = \sum_k f_k a A^{k-1}|\varphi\rangle$$

$$= \dots = \sum_k f_k a^k|\varphi\rangle \Longrightarrow \boxed{F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle}$$

II. Les observables X et P

Exercice n° 1

$$* \quad \langle x|[X,P]|\psi\rangle = \langle x|XP|\psi\rangle - \langle x|PX|\psi\rangle$$

$$= \langle x|X|P\psi\rangle - \langle x|P|X\psi\rangle = x\langle x|P\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|X\psi\rangle$$

$$= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\langle x|\psi\rangle$$

or $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

$$\Rightarrow \langle x|[X,P]|\psi\rangle = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}[x\psi(x)]$$

$$= \cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}} - \cancel{\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}} - \frac{\hbar}{i}\psi(x)\times 1$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\psi(x) = -\frac{\hbar}{i}\langle x|\psi\rangle = i\hbar\langle x|\psi\rangle$$

$$= \langle x|i\hbar\mathbb{1}_n|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{[X,P] = i\hbar\mathbb{1}_n}$$

$$* \langle p|[X,P]|\psi\rangle = \langle p|XP|\psi\rangle - \langle p|PX|\psi\rangle$$

$$= \langle p|X|P\psi\rangle - \langle p|P|X\psi\rangle =$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|P|\psi\rangle - p\langle p|X|\psi\rangle$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}[p\langle p|\psi\rangle] - p\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle$$

$$= i\hbar\langle p|\psi\rangle + \cancel{ip\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle} - \cancel{p\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle}$$

$$= \langle p|i\hbar\mathbb{1}_n|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{[X,P] = i\hbar\mathbb{1}_n}$$

Exercice n°2

d'après le théorème $[A, F(B)] = [A, B]\dfrac{\partial F(B)}{\partial B}$

où B commute avec $[A, B]$

on a : $[P, V(X)] = [P, X]\dfrac{\partial V(X)}{\partial X}$

avec X qui commute avec $[P, X]$ puisque :

$[X, [P, X]] = [X, -i\hbar \mathbb{1}] = -i\hbar [X, \mathbb{1}] = 0$

$\mathbb{1}$ commute avec $\forall A$.

$$\Rightarrow \boxed{[P, V(X)] = -i\hbar \dfrac{\partial V(X)}{\partial X}}$$

on a aussi $[P, [X, P]] = 0 \Rightarrow$ d'après le théorème

$$\boxed{[X, E_c(P)] = [X, P]\dfrac{\partial E_c(P)}{\partial P} = i\hbar \dfrac{\partial E_c(P)}{\partial P}}$$

pour les cas particuliers :

$E_c(P) = \dfrac{P^2}{2m}$ et $V(X) = \dfrac{1}{2} m\omega^2 X^2$

on a : $[P, V(X)] = -i\hbar m\omega^2 X$

$[X, E_c(P)] = i\hbar \dfrac{P}{m}$.

Exercice n°3

Soit $H = \dfrac{P^2}{2m} + V(X)$ tel que $H|\varphi_\ell\rangle = E_\ell |\varphi_\ell\rangle$

$$[X, H] = \underbrace{[X, V(X)]}_{=0} + \left[X, \frac{P^2}{2m}\right] = i\hbar \frac{P}{m} = XH - HX$$

$$\Rightarrow \langle\varphi_k|[X, H]|\varphi_\ell\rangle = \frac{i\hbar}{m}\langle\varphi_k|P|\varphi_\ell\rangle$$

$$= \langle\varphi_k|X H|\varphi_\ell\rangle - \langle\varphi_k|H X|\varphi_\ell\rangle$$

$$= E_\ell\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle - E_k\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle$$

(vp réelle pour H qui est hermitique)

$$= (E_\ell - E_k)\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\varphi_k|P|\varphi_\ell\rangle = \alpha\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle \quad \text{avec } \alpha = \frac{m}{i\hbar}(E_\ell - E_k)}$$

b) Montrons que $\sum_{l} (E_k - E_l)^2 |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle$

$$\langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle = \langle \varphi_k | P \, \mathbb{1}_n \, P | \varphi_k \rangle = \sum_{l} \langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle \langle \varphi_l | P | \varphi_k \rangle$$

$$= \sum_{l} \langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle \left(\langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle \right)^*$$

$$= \sum_{l} |\langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle|^2 = \sum_{l} |\alpha|^2 \, |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2$$

avec $\alpha = \frac{m}{i\hbar} (E_l - E_k)$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{l} (E_k - E_l)^2 |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle}$$

Université Moulay Ismaïl

F.S.T.E.

Département de physique

Année Universitaire 2015/2016

Parcours : MIP S4 (Section 1)

Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n°5

Exercice n° 1 :

L'espace des états d'un système physique est à trois dimensions et est rapporté à la base orthonormée complète $\{|U_j\rangle\}$; j=1,2,3. L'opérateur hamiltonien H et l'observable A sont représentés par les matrices:

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \text{ et } A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Exprimées dans la base $\{|U_j\rangle\}$, ω et a étant deux constantes réelles positives. A l'instant t_0=0, l'état du système est décrit par le vecteur:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|U_1\rangle + \frac{1}{2}|U_2\rangle + \frac{1}{2}|U_3\rangle$$

1/- A l'instant t_0=0, on mesure l'énergie du système.

- Quelles valeurs peut-on trouver ?
- Et avec quelles probabilités ?
- Calculer la valeur moyenne dans l'état $|\psi(0)\rangle$ de l'énergie.
- Calculer la valeur quadratique moyenne de l'énergie à l'insatnt t_0=0, défine par $(\Delta H)_0 = \left(\langle H^2\rangle_0 - \langle H\rangle_0^2\right)^{1/2}$.

2/- Au lieu de mesurer l'énergie à l'insatnt t_0=0, on mesure la grandeur physique représentée par l'observable A.

- Quelles résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
- Quel est éventuellement l'état du système immédiatement après la mesure ?

3/- Les observables H et A représentent-elles des grandeurs physiques compatibles ? Forment-elles un E.C.O.C. ? Que peut-on en déduire ?

4/- Aucune mesure n'étant effectuée dans l'intervalle de temps [0,t], quel est l'état du système à l'instant t ?

5/- Quels résultats peut-on obtenir si l'on mesure à l'instant t l'énergie du système ou la grandeur physique représentée par A et avec quelles probabilités ?

Exercice 2 :

Une particule de masse m se trouve confinée dans un puits de potentiel infini de largeur a. Soient $|\varphi_k\rangle$ les états propres normés de l'Hamiltonien H de cette particule conservative et E_k les énergies propres correspondantes.

On donne $\varphi_k(x) = \langle x|\varphi_k\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right)$ et $E_k = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, $k \in Z^*$.

1/- Les niveaux d'énergie E_k ne sont pas dégénérés, pourquoi ?

2/- L'état de la particule à l'instant t=0 est donné par le vecteur normé :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{k=1}^{4} C_k|\varphi_k\rangle, \qquad C_k \in C^*$$

a/- Quelles valeurs peut-on trouver lors d'une mesure de l'énergie de cette particule à l'instant t=0 ?

b/- Avec quelles probabilités trouve-t-on ces valeurs ?

c/- Quelle est la probabilité de trouver une valeur inférieure ou égale à $\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$? En déduire la probabilité de trouver une valeur supérieure ou égale à $\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ en fonction de C_1 et C_2 puis en fonction de C_3 et C_4.

3/- Calculer la valeur moyenne $\langle H\rangle_0$ de l'énergie de cette particule dans l'état $|\psi(0)\rangle$.

4/- La mesure de l'énergie n'étant pas effectuée, évaluer le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ de la particule à un instant t quelconque. Cet état est-il normé ? Conclusion.

5/- on mesure l'énergie de la particule à cet instant, quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Que deviennent les probabilités calculées en 2°c et la valeur moyenne calculée en 3° ? Conclusion.

6/- Lors d'une mesure de l'énergie, on trouve $\frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$, quel est l'état de la particule immédiatement après la mesure ? Que trouve-t-on si l'on mesure à nouveau l'énergie ? avec quelle probabilité ?

Série n° 5 (1)

1°) à $t=0$, on mesure l'énergie :

* d'après le postulat III (quantification), la mesure d'une grandeur physique ne peut donner comme résultats que les valeurs propres de l'observable correspondante.

Dans notre cas on s'interesse à l'énergie, l'observable correspondante est H $\Rightarrow$ Res(mes H) = valeurs propres de H qui sont les éléments de la diagonale puisque celle ci est diagonale :

$$\boxed{Res(mes\ H) = \{\hbar\omega, 2\hbar\omega\}}$$

* Avec quelles probabilités ?

D'après le postulat 4 (décomposition spectrale), le système étant dans l'état $|\psi(0)\rangle$; qui est normé $\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1$:

$$Pr(\hbar\omega) = \frac{|\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2}{\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$$

Note : les $|u_i\rangle$ vérifient la relation d'orthonormalisation :

$$R.O: \quad \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & si\ j=i \\ 0 & sinon \end{cases}$$

$$Pr(2\hbar\omega) = \frac{|\langle u_2|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle u_3|\psi(0)\rangle|^2}{\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle} = \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}$$

($2\hbar\omega$ est une valeur dégénerée 2 fois, les $\vec{V_p}$ associés sont $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$)

N.B on peut vérifier que $\sum_{k=1}^{2} Pr(a_k) = 1$.

* la valeur moyenne de H à $t=0$: $\langle H\rangle_0$?

par définition la valeur moyenne, dans un état $|\psi\rangle$, est donnée par :

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad ou \quad \sum_{k=1}^{n} a_k Pr(a_k)$$

$$\Rightarrow \langle H\rangle_0 = \sum_{k=1}^{2} E_k \, Pr(E_k) = \frac{1}{2}\times\hbar\omega + \frac{1}{2}\times 2\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

* L'écart type ou valeur quadratique moyenne

$$(\Delta H)_0 = \sqrt{\langle H^2\rangle_0 - \langle H^2\rangle_0} = ?$$

Calculons $\langle H^2\rangle_0$:

$$H^2 = \begin{pmatrix} \hbar^2\omega^2 & 0 & 0 \\ 0 & 4\hbar^2\omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & 4\hbar^2\omega^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle H^2\rangle_0 = \langle\psi(0)|H^2|\psi(0)\rangle \times \frac{1}{\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle}$$

ou $\sum_{k=1}^{2} E_k^2 \, Pr(E_k^2)$

$$\Rightarrow Res(mes\ H^2) = \{\hbar^2\omega^2, 4\hbar^2\omega^2\} \quad (\text{postulat } 3)$$

$$\left.\begin{aligned} Pr(\hbar^2\omega^2) &= |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 = \frac{1}{2} \\ Pr(4\hbar^2\omega^2) &= |\langle u_2|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle u_3|\psi(0)\rangle|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} (\text{postulat } 4)$$

$$\Rightarrow \langle H^2\rangle_0 = \frac{1}{2}\times\hbar^2\omega^2 + \frac{1}{2}\times(4\hbar^2\omega^2) = \frac{5}{2}\hbar^2\omega^2$$

d'où : $\boxed{(\Delta H)_0 = \sqrt{\frac{5}{2}\hbar^2\omega^2 - \frac{9}{2}\hbar^2\omega^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega}$

2) On mesure à $t=0$: A

on sait d'avance que la valeur $(+a)$ est une valeur propre de A associée au vecteur propre $|u_1\rangle$

On pose : $\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}$ si on diagonalise $\tilde{A}$, on le fera dans le sous espace de dégénérescence de $2\hbar\omega$: $\mathcal{E}_{2\hbar\omega}$ dont la base est $\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. Cela permettra d'obtenir des $\vec{V_p}$ communs à A et à H ($|u_1\rangle$ est déjà $\vec{V_p}$ communs)

$$\det(\tilde{A} - \lambda\mathbb{I}) = \begin{vmatrix} -\lambda & a \\ a & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - a^2 = 0 \Rightarrow \text{valeurs propres } \lambda = \pm a$$

$$\Rightarrow \boxed{Res\ mes(A) = \{-a, a\}}$$

$-a$ non dégénérée
$+a$ 2 fois dégénérée

pour avoir les proba. associés il faut déterminer les $\vec{V_p}$ associés :

on cherche $|\varphi\rangle = \alpha|u_2\rangle + \beta|u_3\rangle$ / $\begin{cases} \tilde{A}|\varphi\rangle = +a|\varphi\rangle \\ \langle\varphi|\varphi\rangle = 1 \Rightarrow \sqrt{\alpha^2+\beta^2} = 1 \end{cases}$

$$\Rightarrow \alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

Idem pour $|\varphi_2\rangle$ associé à $(-a)$ on trouvera $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle - \frac{1}{2}|u_3\rangle$

Série n°6 (2)

les probabilités :

$$Pr(a) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle \varphi_1|\psi(0)\rangle|^2$$ a étant dégénéré 2 fois

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{2\sqrt{2}} + \frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2 = 1$$

a est donc un résultat certain $\Rightarrow Pr(-a) = 0$

* L'état du système immédiatement après la mesure.

d'après le postulat V (réduction du paquet d'onde)

« si résultat(mes B) = b_n dans $|\psi\rangle$ avec b_n / $B|u_n\rangle = b_n|u_n\rangle$,
alors immédiatement après la mesure le système est dans l'état $|u_n\rangle$ »

Sachant que a est valeur propre dégénérée 2 fois

$$A|u_1\rangle = a|u_1\rangle$$
$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$$

l'état du système après la mesure serait un état combiné de $|u_1\rangle$ et $|\varphi\rangle$ qui doit être normé $|\psi_1\rangle = \alpha|u_1\rangle + \beta|\varphi_1\rangle$
avec $\sqrt{\alpha^2+\beta^2} = 1$ on choisit $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\Rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle$$
$$= |\psi(0)\rangle$$ puisque $|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$

$\Rightarrow$ l'état du système n'est donc pas perturbé par la mesure de A.

3°/ Rappel : définition : deux grandeurs physiques sont dites compatibles si la mesure de l'une ne fait pas perdre l'information qu'on a eu au préalable sur l'autre. Ceci se traduit par la commutation des observables associées à ces grandeurs »

* Soit $[A,B]=0$, $A|u_1\rangle = a_1|u_1\rangle$, $A|u_2\rangle = a_2|u_2\rangle$ a_1 et a_2 non dégénérés.

$\hookrightarrow$ A et B admettent un système de vecteurs propres commun $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$

mes A $\longrightarrow a_1 \xrightarrow[\text{V}^e\text{ postulat}]{}$ l'état immédiatement après la mesure est $|u_1\rangle$

mes B $\longrightarrow b_1 \longrightarrow Pr(b_1) = 1$

remes(A) $\longrightarrow a_1$ (pas de changement)

* $$[H,A] = HA - AH = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$ $\Rightarrow$ H et A sont associés à des grandeurs compatibles

* H et A forment un E.C.O.C. car :
H et A commutent et ils ont pour chaque couple de v_p un et un seul $\vec{v}_p$ associé

$$(\hbar\omega, a) \longrightarrow |u_1\rangle$$
$$(2\hbar\omega, a) \longrightarrow |\varphi_1\rangle$$
$$(2\hbar\omega, -a) \longrightarrow |\varphi_2\rangle$$
de façon unique

4°) à $t=0$ $\quad |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$

à t $\forall$ $\quad |\psi(t)\rangle = ?$

d'après le postulat VI $|\psi(t)\rangle$ vérifiera l'équation de Schrödinger $\quad i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ (*)

or H ne dépend pas de $t \Longleftrightarrow$ système conservatif

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|u_1\rangle + c_2(t)|u_2\rangle + c_3(t)|u_3\rangle$$
$$= \sum_{j=1}^{3} c_j(t)|u_j\rangle$$

On remplace dans (*) et on obtient

$$i\hbar \sum_{j=1}^{3} \frac{dc_j(t)}{dt}|u_j\rangle = \sum_{j=1}^{3} c_j(t) H|u_j\rangle$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt}|u_j\rangle = c_j(t) H|u_j\rangle \quad \forall j=1,2,3$$

or $|u_j\rangle$ est vecteur propre de H / $H|u_j\rangle = E_j|u_j\rangle$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt}|u_j\rangle = c_j(t)E_j|u_j\rangle \quad \forall |u_j\rangle.$$

Soit $\quad \frac{dc_j(t)}{c_j(t)} = -\frac{i}{\hbar}E_j\, dt$

$$\Rightarrow \quad c_j(t) = K\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_j t\right) \quad \text{où } K = c_j(0)$$

$c_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c_2(0) = \frac{1}{2}$, $c_3(0) = \frac{1}{2}$

et on sait que $E_1 = \hbar\omega$ et $E_2 = E_3 = 2\hbar\omega$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}|u_1\rangle + \frac{1}{2}e^{-2i\omega t}\left[|u_2\rangle + |u_3\rangle\right]}$$

5°) Evolution dans le temps

D'après le théorème d'Ehrenfest :

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

* Or $[A,H]=0$ et A étant indépendant de t

nous avons $\frac{dA}{dt}=0 \Rightarrow \frac{d\langle A\rangle}{dt}=0$

$\Rightarrow \langle A\rangle_t = \langle A\rangle_0$ = cte du mouvement

Comme $\langle A\rangle = \sum_k a_k P_r(a_k)$ on en déduit que $\forall t$ les résultats de mesure seront les mêmes pour A et avec les mêmes probabilités.

* De même pour H :

on a $[H,H]=0$ et $\frac{dH}{dt}=0 \Rightarrow \langle H\rangle_t = \langle H\rangle_0$

Or $\langle H\rangle = \sum_k E_k P_r(E_k)$ donc là aussi $\forall t$ nous obtiendrons les mêmes résultats de mesure et avec les mêmes probabilités.

Exercice n°2

1°) Les niveaux d'énergie E_k ne sont pas dégénérés car pour k donné, E_k correspond à un seul vecteur propre $\varphi_k(x)$

2°) l'état de la particule étant, à $t=0$, donné par :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{k=1}^{4} c_k |\varphi_k\rangle \qquad c_k \in \mathbb{C}^*$$

a- les valeurs de la mesure de l'énergie seront d'après le postulat (3) les valeurs propres de l'observable H :

$$Res\,(mes\,H) = \{E_1, E_2, E_3, E_4\}$$

Soit $Res\,(mes\,H) = \left\{ \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}, \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2} \right\}$

b- d'après le postulat (4), les mesures E_k sont obtenues avec la probabilité $Pr(E_k) = \dfrac{|\langle\varphi_k|\psi(0)\rangle|^2}{\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle}$

Soit : $Pr(E_1) = |c_1|^2$, $Pr(E_2) = |c_2|^2$, $Pr(E_3) = |c_3|^2$

et $Pr(E_4) = |c_4|^2$.

$|\psi(0)\rangle$ étant normé $\sum_{i=1}^{4} |c_i|^2 = \sum_{i=1}^{4} Pr(E_i) = 1$.

c- $Pr\left(E \leqslant \dfrac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\right) = Pr(E_1) + Pr(E_2) = |c_1|^2 + |c_2|^2$

$Pr\left(E \geqslant \dfrac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right) = 1 - \left(|c_1|^2 + |c_2|^2\right) = |c_3|^2 + |c_4|^2$.

3°) $\langle H\rangle_0 = \sum_{k=1}^{4} E_k\, Pr(E_k) = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(|c_1|^2 + 4|c_2|^2 + 9|c_3|^2 + 16|c_4|^2\right)$

4°) * On cherchera $|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1}^{4} c_k(t)\,|\varphi_k\rangle$ / d'après le postulat (6) l'équation de Schrödinger soit vérifiée : $i\hbar \dfrac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

On suit les mêmes étapes que l'exercice (1) et on obtient

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1}^{4} C_k(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\, |\varphi_k\rangle}$$

* $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = |c_1|^2+|c_2|^2+|c_3|^2+|c_4|^2 = 1$

$|\psi(t)\rangle$ est donc normé.

Conclusion : la norme est conservée dans le temps.

5°) D'après le théorème d'Ehrenfest

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \left\langle\frac{dA}{dt}\right\rangle$$ évolution dans le temps de la moyenne

Dans notre cas on s'interesse à H et l'on sait que H ne dépend pas du temps $\frac{dH}{dt}=0$ (les $E_k \neq f(t)$) et en plus $[H,H]=0$

$$\Rightarrow \frac{d\langle H\rangle}{dt}=0 \Rightarrow \langle H\rangle_t = \langle H\rangle_0 = \text{cte du mouvement} = \sum_k E_k P_r(E_k)$$

$\Rightarrow$ On trouvera à l'instant t les mêmes valeurs avec les mêmes probabilités que pour $t=0$.

De ce fait les probabilités calculées en 2°c ou la valeur moyenne calculée en 3° seront conservées.

6°) Si l'on mesure l'énergie et on trouve $E_4 = \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ alors d'après le postulat 5 l'état immédiatement après la mesure sera : $|\psi'(t)\rangle = \frac{P_4|\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle\psi(t)|P_4|\psi(t)\rangle}} = \frac{c_4}{|c_4|}e^{-\frac{i}{\hbar}E_4 t}|\varphi_4\rangle$

où $P_4 = |\varphi_4\rangle\langle\varphi_4|$, $|\varphi_4\rangle$ étant normé

$$\Rightarrow \boxed{|\psi'(t)\rangle \sim |\varphi_4\rangle}$$

Si on remesure l'énergie l'état étant $|\varphi_4\rangle$ on trouvera d'après le postulat 4 $E_4 = \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ avec $P_r(E_4) = 1$

ce sera un résultat certain.