

# S5 PHYSIQUE QUANTIQUE et APPLICATIONS Partie 1

## Les exercices

### Chapitre II –La physique ondulatoire de Schrödinger.

#### I Rappels : Fonctions d'onde associée à une onde progressive

La fonction d'onde associée à une onde progressive peut s'écrire

$$\Psi(x,t) = \Phi(x) e^{-i\omega t} = A e^{\pm ikx} e^{-i\omega t}$$

avec  $\Phi(x) = A e^{\pm ikx}$  la partie spatiale (ou amplitude complexe).

a) donner le sens de propagation des ondes

$$\Psi_1(x,t) = A e^{+ikx} e^{-i\omega t} \quad \text{ou} \quad \Psi_2(x,t) = A e^{-ikx} e^{-i\omega t}$$

b) Soit la fonction d'onde associée à une particule libre de la forme

$$\Psi_a(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{ou} \quad \Psi_b(x,t) = A e^{i(\omega t - kx)}$$

Dans quel sens chacune de ces ondes se propagent-elles ? Laquelle est compatible avec

l'équation de Schrödinger  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)$  ?

#### II Fonction d'onde - Probabilité de présence - valeurs moyennes

La fonction d'onde d'une particule ponctuelle est donnée par

$$\Psi(x,0) = \Phi(x) = A \left( e^{i\frac{\pi x}{a}} + 1 \right) \quad \text{pour } -a < x < a \quad \text{et} \quad \Phi(x) = 0 \text{ ailleurs.}$$

1.a. Calculer  $|A|$  pour que la fonction  $\Phi(x)$  soit normée. Rappeler la raison physique de la normalisation.

*Indication:*  $e^{iu} + e^{-iu} = 2 \cos u$

1.b. Dessiner  $|\Phi(x)|^2$ . Sans faire de calcul d'écart quadratique moyen, évaluer la dispersion  $\Delta x$  de la position de la particule.

1.c. Quelle est la probabilité  $P_1$  de trouver la particule entre les deux points d'abscisses respectives 0 et  $a/2$  lors d'une mesure de position effectuée à l'instant  $t=0$ .

#### III Facteur de transmission d'une barrière de potentiel . Application au STM.

On se propose de calculer, de manière approximative, le facteur de transmission d'une barrière de potentiel.

Une particule ponctuelle de masse  $m$ , d'énergie  $E$ , se déplace parallèlement à l'axe  $Ox$  (on traite un problème à une dimension d'espace). L'énergie potentielle de la particule est constante par sections et subit des discontinuités en certains points de l'axe  $Ox$ .

1. Dans le domaine  $x < 0$ , l'énergie potentielle est nulle, dans le domaine  $x \geq 0$ , elle est égale à  $V_0$  et on suppose que  $V_0$  est plus grand que  $E$ . La zone de potentiel égal à  $V_0$  s'étend à l'infini.

a. Pour  $x < 0$ , la fonction d'onde  $\Psi$  est la somme d'une onde (de de Broglie) d'amplitude  $A$  se propageant dans le sens  $x$  croissant et d'une onde d'amplitude  $B$  se propageant en sens inverse.

Donner en fonction de  $E$ ,  $m$  et  $\hbar$ , l'expression du module du vecteur d'onde  $k$  de ces ondes puis celle de la fonction d'onde  $\Psi(x, t)$  en fonction des paramètres  $A$ ,  $B$ ,  $E$  et  $k$ .

- b.** Calculer la valeur numérique de  $k$  pour :  
 $E = 1 \text{ eV}$ ,  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  et  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ . La charge de l'électron est égale à  $1,60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ .
- c.** Montrer que dans le domaine  $x \geq 0$ , la fonction d'onde indépendante du temps  $\Phi(x)$  est de la forme  $C \exp(-\alpha x)$ . Donner l'expression de  $\alpha$  en fonction de  $E$ ,  $V_0$ ,  $m$  et  $\hbar$ .
- d.** En imposant à la fonction d'onde les relations de passage nécessaires en  $x = 0$ , calculer les rapports  $C/A$  et  $B/A$  puis  $|C/A|^2$  et  $|B/A|^2$ . Quelle est la signification physique de la quantité  $|B/A|^2$  et comment interprète-t-on la valeur qu'il a dans ce problème ?

- 2.** L'énergie potentielle de la particule est maintenant définie ainsi :

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x \geq a$$

La fonction d'onde indépendante du temps  $\Phi(x)$  est de la forme :

$$C \exp(-\alpha x) + D \exp(+\alpha x) \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$F \exp(ikx) \quad \text{pour } x \geq a$$

- a.** Calculer  $D/C$  et  $F/C$  puis  $|F/C|^2$  en fonction de  $a$  et des paramètres  $k$  et  $\alpha$  introduits à la question **1**.
  - b.** On se place dans le cas où  $\alpha a$  est très supérieur à 1.  
 Vérifier que le rapport  $|D/C|$  est alors très inférieur à 1.
- 3.** L'énergie potentielle de la particule est maintenant définie de la manière suivante :

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x \geq a \text{ et pour } x < 0$$

Les notations sont les mêmes qu'aux questions précédentes et, dans chaque domaine de l'axe  $Ox$ , les expressions de la fonction d'onde  $\Phi(x)$  sont celles obtenues en **1** et en **2**. Comme en **2.b** on fait l'hypothèse  $\alpha a \gg 1$ , les relations de passage écrites à la question **1** pour l'abscisse  $x = 0$  sont alors valables (le terme  $D \exp(+\alpha x)$  est négligeable en  $x = 0$ ) ; les résultats des questions **1** et **2** peuvent donc être utilisés.

- a.** Calculer le rapport  $T = |F/A|^2$  en fonction de  $\alpha$ ,  $k$  et  $a$ . Donner la signification physique de ce paramètre.
- b.** Calculer numériquement  $|F/A|^2$  avec les données de la question **1.b** et pour  $V_0 = 1,25 \text{ eV}$  (soit  $V_0/E = 5/4$ ) et  $a = 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

- 4.** Les développements précédents modélisent le fonctionnement d'un microscope à effet tunnel nommé **STM** ( Scanning Tunneling Microscope). Pour évaluer la sensibilité de ce dispositif, calculer l'augmentation d'épaisseur  $\delta a$  qui provoque une diminution de 10% du courant électronique à travers la barrière de potentiel. Calculer la valeur numérique de  $\delta a$  avec les données de la question **3.b**. Comparer cette valeur de  $\delta a$  aux dimensions des atomes.

#### IV Puits de potentiel carré infini

Une particule de masse  $m$  est piégée dans un milieu d'épaisseur  $a$  (problème à 1 dimension). Pour schématiser cet effet, on suppose que l'énergie potentielle de la particule est représentée par le puits de potentiel infini défini par

$$V(x) = 0 \text{ si } 0 < x < a.$$

$$V(x) = \text{infini si } x < 0 \text{ et } x > a.$$

a) Soit  $\Phi(x)$  la fonction d'onde spatiale associée à cette particule d'énergie totale  $E$ . Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps (1) qui admet  $\Phi(x)$  pour solution.

b) Donner les conditions aux limites imposées par le puits de potentiel à la solution générale de (1). Ces conditions traduisent le fait que la particule a une probabilité nulle de se trouver en dehors du puits ( $y$  compris pour  $x = 0$  et  $x = a$ ). En déduire l'expression des fonctions propres spatiales  $\varphi_n(x)$  (non normalisées) et les énergies propres  $E_n$  correspondantes. Montrer que  $E_n = n^2 E_1$ , où  $E_1$  est une constante dont on précisera l'expression.

c) Pour le niveau fondamental et le 1<sup>er</sup> état excité, que l'on définira, dessiner l'allure de la fonction d'onde et donner la valeur de l'énergie correspondante pour un électron, énergie exprimée en eV.

$$m = 0,9 \cdot 10^{-30} \text{ kg} \quad ; \quad a = 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.} \quad ; \quad |e| = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Pour le premier état excité, donner simplement la probabilité de trouver la particule entre 0 et  $a/2$ . Vérifier cette valeur par le calcul.

#### V Centres colorés : lasers et couleurs des pierres précieuses

On considère un électron de masse  $m$  confiné dans une boîte de potentiel cubique définie de la façon suivante :  $V = 0$  si  $0 < x < a; 0 < y < a; 0 < z < a$  et  $V = \infty$  en dehors. L'origine est choisie sur un des sommets du cube.

---

##### Première partie :

1) Vérifier que les fonctions propres de l'Hamiltonien peuvent se mettre sous la forme :  $\Psi(\vec{r}) = \Phi(x)\Theta(y)\Xi(z)$ , les énergies étant  $E_{tot} = E_x + E_y + E_z$ , les fonctions d'ondes et les énergies étant les mêmes que celles calculées dans le cas 1D. En utilisant les conditions aux limites, établissez l'expression générale des fonctions propres et des énergies propres correspondantes.

- 2) Ecrire les fonctions propres normées associées à l'état fondamental  $\Psi_0(\vec{r})$  et au premier niveau d'excitation  $\Psi_1(\vec{r})$ . Donner les énergies propres  $E_0$  et  $E_1$  correspondantes ainsi que la dégénérescence de ces deux niveaux.
- 3) Calculer ces deux énergies en eV avec  $a=0,67$  nm.

**Deuxième partie :**

On déforme maintenant la boîte de potentiel dans lequel se trouve l'électron de façon à passer d'un cube à un parallélépipède à base carrée. Cette déformation se fait à volume constant. On choisit une base carrée de telle sorte que la dimension suivant x et y vaut  $a2^{\frac{1}{3}}$  et celle suivant z vaut  $a2^{-\frac{2}{3}}$

- 1) Calculer les nouveaux niveaux d'énergie, sont-ils toujours dégénérés.
- 2) Etablir la fonction propre normée et l'énergie  $E'_0$  de l'état fondamental.
- 3) Etablir les fonctions propres normées et les énergies  $E'_1$  associées aux premiers niveaux excités. Montrer que la déformation lève partiellement la dégénérescence du niveau  $E_1$  du cas non déformé.

**Troisième partie :**

Supposons que l'on envoie un photon d'énergie  $E = h\nu$  sur l'électron se situant dans la boîte de potentiel cubique dans l'état fondamental.

- 1) Etablir l'expression générale de l'énergie du photon pour qu'il soit absorbé en fonction de a. Donner sa valeur pour  $a=0,67$  nm. Si on envoie de la lumière blanche sur la boîte quelle sera la couleur de la lumière absorbée et de celle qui est transmise.
- 2) Quelle sera la nouvelle couleur absorbée dans le cas de la boîte déformée ?
- 3) En fait, le changement de maille cristalline et le travail sur les impuretés est une méthode utilisée pour changer la couleur des pierres précieuses. Pour tous renseignements complémentaires voir le site : [http://www.couleur-diamants.com/diamants\\_couleur\\_info.php?id=2](http://www.couleur-diamants.com/diamants_couleur_info.php?id=2). La figure ci-dessous montre les couleurs obtenues par traitement de diamants : chauffage ou irradiation.



## Chapitre III

### Les outils mathématiques indispensables pour le formalisme de Dirac

1) Donner l'expression de la fonction propre  $\varphi(x)$  de l'opérateur  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$

associée à la valeur propre  $E$  réelle et positive.

Cet opérateur  $\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$  sera associé à l'énergie cinétique, dans un problème à 1 dim. Si cette fonction propre  $\varphi(x)$  est l'amplitude complexe associée à une onde, de quel type d'onde  $\psi(x,t)$  s'agit-il ?

2) Soit  $\hat{A}$  un opérateur qui, pour une valeur propre  $a$ , admet une seule fonction propre  $|\varphi\rangle$  telle que  $\hat{A}|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ . Dans ce cas, on dit que  $a$  est une valeur propre non dégénérée.

Le commutateur de 2 opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  est défini par  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ . Soit  $\hat{B}$  un opérateur qui commute avec  $\hat{A}$  soit tel que  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Montrer que  $\hat{B}|\varphi\rangle$  est fonction propre de  $\hat{A}$ . Donner la valeur propre correspondante. En déduire que  $|\varphi\rangle$  est aussi fonction propre de  $\hat{B} \Rightarrow$  Quand 2 opérateurs commutent, ils ont des vecteurs propres communs.

### 3) Théorème de Dirac

a) Soit un opérateur  $\hat{A}$ . Montrer que si  $|u\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{A}$  associé à la valeur propre  $a$ , il est aussi vecteur propre de  $\hat{A}^2, \dots, \hat{A}^n$  associé aux valeurs propres  $a^2, \dots, a^n$ .

b) On considère l'opérateur  $\hat{A}$  tel que

$$\hat{A}|u_1\rangle = |u_2\rangle \quad \text{et} \quad \hat{A}|u_2\rangle = |u_1\rangle$$

Déterminer les valeurs propres de  $\hat{A}$ , puis ses vecteurs propres exprimés dans la base  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$ .

4) Soient les 2 opérateurs  $\hat{x}$  tel que  $\hat{x}\varphi(x) = x\varphi(x)$  et

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad \text{tel que} \quad \hat{p}\varphi(x) = -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx}$$

Ces 2 opérateurs commutent-ils ?

L'opérateur  $\hat{x}$  sera l'opérateur associé à la grandeur physique position. L'opérateur  $\hat{p}$  sera l'opérateur associé à la grandeur physique quantité de mouvement (dans un problème à 1 dimension).

5) Représentation matricielle d'un opérateur dans une base donnée.

On considère un système physique dont l'espace des états est à 3 dimensions, rapporté dans la base  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ . Dans cet espace, on considère l'action des opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ , définis de la façon suivante :

$$\begin{array}{ll} \hat{A}|u_1\rangle = |u_1\rangle & \hat{B}|u_1\rangle = |u_3\rangle \\ \hat{A}|u_2\rangle = 0 & \hat{B}|u_2\rangle = |u_2\rangle \\ \hat{A}|u_3\rangle = -|u_3\rangle & \hat{B}|u_3\rangle = |u_1\rangle \end{array}$$

Ecrire les matrices représentant  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{A}^2$  et  $\hat{B}^2$  dans cette base.

Ces opérateurs sont-ils des observables? Valeurs propres et vecteurs propres de ces 4 matrices.  $\hat{A}^2$  et  $\hat{B}$  forment-ils un ECOC ?

6) Les matrices de Pauli. On vous donne 3 opérateurs  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  et  $\hat{\sigma}_z$ . Ces 3 opérateurs sont représentés dans une base de vecteurs  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  par les matrices 2\*2

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

- Ces opérateurs sont-ils hermitiques ?
- Vérifier que ces 3 matrices ont les mêmes valeurs propres. Lesquelles ? Ceci est-il cohérent avec la question précédente ?
- Quel est l'opérateur, parmi les 3, qui est représenté dans la base de ses vecteurs propres ? (ce qui signifie : quel est l'opérateur qui admet les 2 vecteurs  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  comme vecteurs propres?)
- Quels sont les vecteurs propres des 2 autres opérateurs, exprimés en fonction de  $|u_1\rangle$  et de  $|u_2\rangle$  ?
- Ces opérateurs commutent-t-ils ? Vérifier les relations suivantes  
 $[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z$ ,  $[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x$ ,  $[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y$

Ces matrices de Pauli interviennent pour décrire les composantes du spin ( ou moment cinétique intrinsèque) de l'électron. L'opérateur associé au spin de l'électron  $\hat{S}$  sera  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$ , avec  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$  et  $\hat{\sigma}_z$  les composantes de  $\hat{\sigma}$ .

7) On considère un système physique dont l'espace des états, de dimension 3, est rapporté à la base orthonormée  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ . (Cet exercice sera repris au Ch IV - postulat sur la mesure : les opérateurs  $\hat{H}$ ,  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  seront associés à des grandeurs physiques mesurables H, A et B).

Dans cette base, l'opérateur  $\hat{H}$ , hamiltonien du système, s'écrit :

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Dans cette même base, deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont données par :

$$\hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où  $\omega_0$ , a et b sont des constantes réelles positives.

Pour chacun des 3 opérateurs  $\hat{H}$ ,  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ , calculer (le plus simplement possible) les valeurs propres et exprimer les vecteurs propres associés en fonction des vecteurs de la base choisie. Préciser le degré de dégénérescence de chaque valeur propre.

8) **Produit scalaire** (application directe du cours)

Soit  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$  une base orthonormée d'un espace tridimensionnel.

On définit 3 vecteurs  $|\varphi_1\rangle = |u_1\rangle - 2|u_2\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle = |u_1\rangle + i|u_3\rangle$  et  $|\varphi_3\rangle = |u_3\rangle$

a) Calculer les produits scalaires  $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ ,  $\langle \varphi_2 | \varphi_3 \rangle$  et  $\langle \varphi_3 | \varphi_1 \rangle$ .

b) Trouver 3 constantes  $c_1, c_2$  et  $c_3$  pour que les vecteurs  $c_1|\varphi_1\rangle, c_2|\varphi_2\rangle$  et  $c_3|\varphi_3\rangle$  soient normés.

9) **Système à 2 niveaux avec une perturbation extérieure** - On considère un système physique dont l'espace des états est de dimension 2 et on choisit comme base orthonormée l'ensemble des 2 vecteurs  $|\varphi_1\rangle$  et  $|\varphi_2\rangle$ , états propres de l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  tels que:

$$\hat{H}_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle \quad \text{et} \quad \hat{H}_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle$$

On veut maintenant tenir compte d'une **perturbation extérieure** ou d'interactions internes au système négligées dans  $\hat{H}_0$ . L'hamiltonien devient alors  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ .

$\hat{W}$  est une perturbation (appelée aussi couplage) supposée indépendante du temps et représentée dans la base des états propres  $|\varphi_1\rangle$  et  $|\varphi_2\rangle$  de  $\hat{H}_0$  (hamiltonien non-perturbé) par la matrice hermitique suivante :

$$(\hat{W}) = \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

a) Quelle condition doivent vérifier les éléments de matrice  $W_{12}$  et  $W_{21}$  - on posera  $W_{12} = |W_{12}|e^{-i\varphi}$ .

b) Déterminer les énergies propres  $E_-$  et  $E_+$  de  $\hat{H}$ . On les exprimera en fonction de  $E_m$  et de  $\Delta$  :  $E_m = \frac{E_1 + E_2}{2}$  et  $\Delta = \frac{E_1 - E_2}{2}$ .

c) Vérifier que les états  $|\varphi_-\rangle$  et  $|\varphi_+\rangle$  donnés ci dessous sont états propres de  $\hat{H}$  respectivement associés aux valeurs propres  $E_-$  et  $E_+$ .

$$|\varphi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle \quad \text{et} \quad |\varphi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{+i\varphi}|\varphi_2\rangle$$

$$\theta \text{ étant défini par } \operatorname{tg}\theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} = \frac{2\operatorname{tg}\frac{\theta}{2}}{1 - \operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}}$$

d) Etudier l'évolution des énergies propres  $E_-$  et  $E_+$  lorsque l'écart  $\Delta$  entre les niveaux d'énergies non-perturbés varie ( $W$  restant constant).

**Des exercices pour travailler à la maison :**

**A)** Donner l'expression de la fonction propre  $f(t)$  de l'opérateur différentiel  $\hat{A} = \frac{d}{dt}$  associée à la valeur propre  $\lambda$ .

**B)** Vérifier que la fonction  $f(u) = e^{-\frac{u^2}{2}}$  est fonction propre de l'opérateur  $\hat{M} = \frac{d^2}{du^2} - u^2$  associée à une valeur propre que l'on déterminera.

**C)** Soit la matrice  $(\hat{M}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  écrite dans la base orthonormée  $|u_2\rangle, |u_3\rangle$ . Calculer ses valeurs propres. Dans quelle base, cette matrice sera-t-elle diagonale ? Déterminer cette base.

Mêmes questions pour la matrice  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$  écrite dans la base orthonormée  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ .

**D)** On considère un opérateur  $\hat{A}$  représenté, dans la base orthonormée  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ , par la matrice suivante :

$$(\hat{A}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 \\ -i\sqrt{3} & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- L'opérateur  $\hat{A}$  est-il hermitique ? Que peut-on dire de ses valeurs propres ?
- Déterminer les valeurs propres de  $\hat{A}$ . En déduire un ensemble de vecteurs propres orthonormés associé à ces valeurs propres.

**E)** Dans la base orthonormée  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ , les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont représentés par les matrices suivantes :

$$(\hat{A}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (\hat{B}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i \\ 0 & 2i & 0 \end{pmatrix}$$

- Les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont-ils hermitiques ? Conclusions.
- Déterminer les valeurs propres de ces 2 opérateurs.
- Vérifier que  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent entre eux (2 méthodes).
- Trouver un ensemble de vecteurs propres communs à  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Constituent-ils un E.C.O.C ?



## Chapitre IV Les postulats

### I - Valeur moyenne de la quantité de mouvement, pour une fonction d'onde donnée

On reprend le premier exercice « Fonction d'onde - Probabilité de présence - valeurs moyennes » traité au début Ch II.

La fonction d'onde d'une particule ponctuelle est donnée par

$$\Psi(x,0) = \Phi(x) = A(e^{i\frac{\pi x}{a}} + 1) \text{ pour } -a < x < a \text{ et } \Phi(x) = 0 \text{ ailleurs.}$$

1.a. Calculer  $|A|$  pour que la fonction  $\Phi(x)$  soit normée. Rappeler la raison physique de la normalisation.

Indication:  $e^{iu} + e^{-iu} = 2 \cos u$

1.b. Dessiner  $|\Phi(x)|^2$ . Sans faire de calcul d'écart quadratique moyen, évaluer la dispersion  $\Delta x$  de la position de la particule.

1.c. Quelle est la probabilité  $P_I$  de trouver la particule entre les deux points d'abscisses respectives 0 et  $a/2$  lors d'une mesure de position effectuée à l'instant  $t=0$ .

2.a. Rappeler l'expression de l'opérateur quantité de mouvement  $p_x$ .

b. De façon générale, démontrer que, si la fonction d'onde est réelle, la valeur moyenne de  $p_x$  est nulle.

c. Calculer pour la fonction d'onde donnée ci-dessus la valeur moyenne de  $p_x$  à l'instant  $t = 0$ .

3.a. Rappeler l'expression de l'hamiltonien  $H$  associé à une particule libre de masse  $m$ .

b. Calculer la valeur moyenne de  $p_x^2$  ainsi que celle de l'énergie cinétique de la particule précédente.

4. On cherche à déterminer l'écart quadratique moyen de  $p_x$

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle}$$

a. Montrer que  $(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$

b. Calculer  $\Delta p_x$  pour la particule étudiée ici.

c. Confronter  $\Delta p_x$  à la valeur  $\Delta x$  obtenue en 1.c. Commenter le résultat.

### II - Système à 2 niveaux. Notion de valeur moyenne

1) On considère un hamiltonien  $\hat{H}$ , qui ne possède que 2 vecteurs propres normés notés  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , associés à 2 valeurs propres distinctes  $E_1$  et  $E_2$ .

a) On construit l'état  $|\Psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ . Quelle relation doivent satisfaire  $\alpha$  et  $\beta$  pour que  $|\Psi\rangle$  soit normé ?

On construit l'état  $|\Psi'\rangle = \alpha'|\psi_1\rangle + \beta'|\psi_2\rangle$ . Quelle relation doivent satisfaire  $\alpha, \beta, \alpha'$  et  $\beta'$  pour que  $|\Psi\rangle$  et  $|\Psi'\rangle$  soient orthogonaux ?

b) On construit l'état  $|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle)$ .

L'état  $|\Psi_-\rangle$  est-il normalisé ? Cet état s'écrit sous forme d'une combinaison linéaire d'états propres de  $\hat{H}$ . Est-il un état propre de  $\hat{H}$ ? Dans quel cas, une combinaison linéaire d'états propres de  $\hat{H}$  peut-elle être état propre de  $\hat{H}$  ?

Calculer  $\langle H \rangle$ ,  $\langle H^2 \rangle$  et  $(\Delta H)^2$ , le système étant dans l'état  $|\Psi_-\rangle$ .

### III- Postulat sur la mesure – Evolution d'un système physique.

On considère **un système physique** dont l'espace des états, de dimension 3, est rapporté à la base orthonormée  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ .

Dans cette base, l'opérateur  $\hat{H}$ , hamiltonien du système, s'écrit :

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Dans cette même base, deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont données par :

$$\hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où  $\omega_0$ , a et b sont des constantes réelles positives.

#### Préliminaires (à traiter par chaque étudiant avant la séance)

Pour chacun des 3 opérateurs  $\hat{H}$ ,  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ , calculer (le plus simplement possible) les valeurs propres et exprimer les vecteurs propres associés en fonction des vecteurs de la base choisie. Préciser le degré de dégénérescence de chaque valeur propre.

Si on effectue une mesure de l'énergie du système, quelles valeurs peut-on trouver ? Ces valeurs dépendent-elles de l'état du système ?

Si on effectue une mesure de la grandeur physique **A** représentée par l'opérateur  $\hat{A}$ , quelles valeurs peut-on trouver ? Même question pour **B** grandeur physique associée à l'opérateur  $\hat{B}$ .

**(A) Au temps  $t = 0$ , le système se trouve dans l'état :**

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n \sum_i c_n^i |u_n^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle.$$

1°) Cet état  $|\psi(0)\rangle$  est-il normé ? Cet état, écrit sous la forme d'une combinaison linéaire d'états propres de  $\hat{H}$ , est-il un état propre de  $\hat{H}$  ?

2°) Au temps  $t = 0$ , on mesure l'énergie du système.

- Quelles valeurs de l'énergie peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
- Donner le vecteur d'état immédiatement après la mesure.
- En déduire la valeur moyenne  $\langle \hat{H} \rangle$  à  $t = 0$  (3 méthodes).

3°) Toujours au temps  $t=0$ , on mesure à présent la grandeur physique **A**.

- Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités? Justifier ce résultat.

b) Donner le vecteur d'état immédiatement après la mesure.

c) En déduire la valeur moyenne  $\langle \hat{A} \rangle$  à  $t = 0$ .

**(B) Mesures à un instant t quelconque**

1°) Donner l'expression du vecteur d'état  $|\Psi(t)\rangle$  du système à un instant t quelconque (voir cours). Cet état est-il toujours normé ? Pouvez-vous justifier ce résultat à l'aide de l'expression démontrée dans le cours  $\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_t$  [1] ?

2°) Si on effectue une mesure de l'énergie, en  $t > 0$ , quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Ce résultat est-il compatible avec l'expression [1] ?

3°) On effectue une mesure de  $\mathbf{A}$  en  $t > 0$ . Calculer la valeur moyenne  $\langle \hat{A} \rangle(t)$  de 2 façons différentes.

4°) On effectue une mesure de  $\mathbf{B}$  en  $t > 0$ . Calculer la valeur moyenne  $\langle \hat{B} \rangle(t)$ . Commenter ce résultat par rapport à la question précédente.

## Chapitre V Oscillateur harmonique

**A) Oscillateur harmonique : fonctions d'onde et énergies propres** associées au niveau fondamental et au premier état excité. **Evolution** de l'état du système en fonction du temps.

On considère un point matériel de masse  $m$  se déplaçant le long de l'axe  $\vec{x}'x$  et soumis à la seule force de rappel  $F(x) = -kx$  où  $k$  est une constante positive.

**1a)** Donner l'équation aux dimensions de la constante de Planck réduite  $\hbar$  et de la constante  $k$ .

**1b)** En s'appuyant sur les seules considérations de dimensions, comment peut-on exprimer  
- la pulsation  $\omega$  d'un mouvement périodique du point matériel en fonction de  $m$  et de  $k$ ;  
- l'énergie  $E$  de la particule en fonction des constantes  $\hbar$ ,  $k$  et  $m$ .

**c)** Caractériser numériquement l'ordre de grandeur de  $\omega$  et de  $E$  (exprimée en électron-volt eV) dans le cas où la particule est un électron de masse  $m = 0,9 \times 10^{-30}$  Kg et où  $k = 0,9$  MKS. On donne:  $\hbar = 1,05 \times 10^{-34}$  J.s.

**2.** Montrer que l'énergie potentielle  $V(x)$  de la particule a pour valeur  $V(x) = \frac{kx^2}{2}$

[avec la convention  $V(0) = 0$ ].

**3.** On étudie le mouvement du point matériel du point de vue de la **mécanique classique**.

**a)** Montrer que ce mouvement est périodique. Donner la valeur de la pulsation  $\omega$ .

**b)** Exprimer en fonction du temps et donner une représentation graphique (sur la même figure) de l'énergie potentielle  $V$ , de l'énergie cinétique  $E_c$  et de l'énergie totale  $E$ .

**4.** On considère maintenant ce problème du point de vue **quantique**.

**a)**  $\Phi(x)$  est la fonction d'onde associée à ce système physique. Ecrire l'équation de Schrödinger (1 dimension), dont  $\Phi(x)$  est la solution.

**b)** Montrer que la fonction d'onde  $\Phi_0(x) = C_0 e^{-a x^2}$  (où  $C_0$  et  $a$  sont deux constantes), fonction paire de  $x$ , est solution de l'équation de Schrödinger écrite ci-dessus pourvu que la constante  $a$  ait une valeur que l'on déterminera. Déterminer la valeur de l'énergie  $E_0$  associée à la fonction d'onde  $\Phi_0(x)$ .

**c)** On admettra que le premier état excité correspond à une fonction d'onde

$\Phi_1(x) = C_1 \times e^{-a x^2}$ , fonction impaire de  $x$ . Déterminer l'énergie propre  $E_1$ . Vérifier que

$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$  où  $n$  est un nombre entier positif ou nul.  $n = 0$  correspond à l'état fondamental,  $n = 1$  correspond au premier état excité,  $n$  est associé à un état quelconque.

Par continuité, peut-on en déduire l'allure de la fonction d'onde correspondant au second état excité  $\Phi_2(x)$ ? Dessiner l'allure des densités de probabilité de présence de ces 3 premiers états.

**d)** A l'instant  $t = 0$ , on suppose que les fonctions d'onde  $\Phi_0(x)$  et  $\Phi_1(x)$  sont normalisées et que le système se trouve décrit par la fonction d'onde:

$$\psi(x, t = 0) = \Phi_0(x) + 3\Phi_1(x)$$

Exprimer l'expression de la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  à un instant  $t$  quelconque.

## B) Traitement de l'OH avec les opérateurs création $\hat{a}^+$ et annihilation $\hat{a}$ .

### 1. Opérateurs sans dimension.

Soient  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  les opérateurs position et impulsion associés à une particule de masse  $m$  (problème à 1 dimension). Exprimer l'hamiltonien associé à un Oscillateur Harmonique en fonction de  $\hat{x}$  et de  $\hat{p}$ .

**1.1.** Montrer que, pour l'oscillateur harmonique, on peut définir deux opérateurs sans dimension :

$$\hat{X} = \sqrt{(m\omega/\hbar)} \hat{x} \quad \text{et} \quad \hat{P} = \sqrt{(1/m\omega\hbar)} \hat{p}$$

Calculer leur commutateur  $[\hat{X}, \hat{P}]$ .

**1.2.** Ecrire l'hamiltonien sans dimension  $\hat{H}$  associé à  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$ .

### 2. Opérateurs création $\hat{a}^+$ et annihilation $\hat{a}$ .

Définition :  $\hat{a} = \sqrt{1/2} (\hat{X} + i\hat{P})$  et  $\hat{a}^+ = \sqrt{1/2} (\hat{X} - i\hat{P})$

**2.1.** Ces opérateurs sont-ils hermitiques ?

(On utilisera le fait que les opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  sont hermitiques)

**2.2.** Calculer  $\hat{a}\hat{a}^+$  et  $\hat{a}^+\hat{a}$  et en déduire le commutateur  $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ .

### 3. Opérateur $\hat{N}$ .

Définition :  $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ .

**3.1.** Cet opérateur est-il hermitique ?

(On utilisera la relation donnant l'adjoint d'un produit d'opérateurs :  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ ).

**3.2.** Calculer  $[\hat{N}, \hat{a}]$  et  $[\hat{N}, \hat{a}^+]$ .

**3.3.** Exprimer  $\hat{H}$  en fonction de  $\hat{N}$ .

#### 4. Valeurs propres et états propres de $\hat{N}$ .

**4.1.** Soit  $|\varphi_\alpha\rangle$  un état propre normé de  $\hat{N}$  associé à la valeur propre  $\alpha : \hat{N}|\varphi_\alpha\rangle = \alpha|\varphi_\alpha\rangle$ .  
Montrer que le produit scalaire  $\langle \varphi_\alpha | \hat{N} | \varphi_\alpha \rangle$  est égal au carré de la norme d'un vecteur que l'on déterminera. En déduire que  $\alpha \geq 0$ . Montrer que  $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ .

**4.2.** En utilisant les résultats de la question **3.2.**, montrer que  $\hat{a}|\varphi_\alpha\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $(\alpha - 1)$ .

**4.3.** De la même façon, montrer que  $\hat{a}^+|\varphi_\alpha\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $(\alpha + 1)$ .

**4.4.** Montrer que  $\alpha \in \mathbb{N}$ . On s'inspirera du résultat de la question 4.1) qui précise que si  $\alpha$  est valeur propre de  $\hat{N}$ , alors soit  $\alpha$  est positif, soit il est nul. On appliquera l'opérateur annihilation au vecteur  $\alpha|\varphi_\alpha\rangle$  et on fera le raisonnement par récurrence autant de fois que nécessaire. On appellera cette valeur propre  $n$ . En déduire la valeur de l'énergie  $E_n$  d'un état stationnaire.

**4.5.** Exprimer  $|\varphi_{n+1}\rangle$  et  $|\varphi_{n-1}\rangle$  en fonction respectivement de  $\hat{a}^+|\varphi_n\rangle$  et  $\hat{a}|\varphi_n\rangle$ .

(On calculera  $\|\hat{a}^+|\varphi_n\rangle\|^2$  et  $\|\hat{a}|\varphi_n\rangle\|^2$  en faisant apparaître l'opérateur  $\hat{N}$ )

#### 5 Fonctions d'onde.

Soient  $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle$  et  $|\varphi_2\rangle$  les 3 premiers états propres (état fondamental, premier état excité et deuxième état excité) de  $\hat{H}$ .  $\varphi_0(X), \varphi_1(X)$  et  $\varphi_2(X)$  sont les fonctions d'onde correspondantes.

**5.1** Quelle relation permet de passer de  $|\varphi_n\rangle$  à  $\varphi_n(X)$ ?

D'après la question 4, nous pouvons écrire  $|\varphi_1\rangle = \hat{a}^+|\varphi_0\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle = \hat{a}^+|\varphi_1\rangle$  et  $|\varphi_0\rangle = \hat{a}|\varphi_1\rangle$ .

**5.2** En partant de la relation  $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ , donner l'énergie  $E_0$  et la fonction d'onde  $\varphi_0(X)$  associées au niveau fondamental. Il faudra exprimer  $\hat{P}$  en fonction de  $\frac{d}{dX}$ .

**5.3** A partir de  $E_0$  et de  $\varphi_0(X)$ , calculer l'énergie  $E_1$  et la fonction  $\varphi_1(X)$  associées au premier état excité. Même question pour le deuxième état excité.

**5.4** Tracer l'allure des 3 fonctions d'onde  $\varphi_0(X), \varphi_1(X)$  et  $\varphi_2(X)$ .

**Indication :**  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

### C) Applications aux niveaux de vibration de la molécule CO

On suppose la molécule CO dans son état électronique fondamental et on note  $V(r)$  la valeur de son énergie potentielle calculée en supposant les 2 noyaux fixes et distants de  $r$ . On admettra que le mouvement relatif de vibration des 2 noyaux se ramène à celui d'une particule unique affectée de sa masse réduite de la molécule et d'énergie potentielle  $V(r)$ .

- 1) Une forme approchée de  $V(r)$  est  $V(r) = D_e(1 - e^{-a(r-r_e)})^2$  où  $a$  et  $r_e$  sont des constantes positives. Tracer  $V(r)$  et commenter sa forme. Que représentent les quantités  $D_e$  et  $r_e$  ?
- 2) Montrer que pour  $r$  voisin de  $r_e$ ,  $V(r)$  est approximativement l'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique. Donner l'expression de la constante de force en fonction de  $D_e$ ,  $a$  et  $r_e$ .
- 3) Calculer, en eV, le quantum de vibration  $\hbar\omega$  puis l'énergie des 4 premiers niveaux vibrationnels.

$D_e$  vaut 11.23 eV, calculer l'énergie de liaison de la molécule.

- 4) Sachant que les transitions vibrationnelles n'ont lieu qu'entre 2 niveaux successifs, montrer que, dans la précédente approximation, le spectre de vibration ne présente qu'une raie. Calculer sa longueur d'onde. Dans quel domaine des ondes électromagnétiques se trouve-t-elle ?

Constante de la force de liaison  $k = 1895 \text{ N/m}$

$$m_O = 2.6610^{-26} \text{ kg} \quad m_C = 1.9910^{-26} \text{ kg}$$

## Chapitre VI Moment cinétique orbital. Moment cinétique

**I) Questions de cours :** Les opérateurs associés au **moment cinétique orbital**

$\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y$  et  $\hat{L}_z$  satisfont aux relations de commutation

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= 0, [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0, [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \text{ et} \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \end{aligned}$$

Les états propres communs à  $\hat{L}^2$  et à  $\hat{L}_z$  s'écrivent sous la forme  $|l, m\rangle$  avec

$$\hat{L}^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle \text{ et } \hat{L}_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle.$$

c. Quelle est la dimension du moment cinétique orbital et de la constante de Planck réduite  $\hbar$  ? En déduire celle des nombres quantiques  $l$  et  $m$ .

d. On introduit les opérateurs  $\hat{L}^+$  et  $\hat{L}^-$  tels que  $\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$  et  $\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ .

Calculer les commutateurs  $[\hat{L}_z, \hat{L}^+]$  et  $[\hat{L}_z, \hat{L}^-]$ .

e. Montrer que les fonctions d'onde  $\hat{L}^+|l, m\rangle$  et  $\hat{L}^-|l, m\rangle$  sont fonctions propres de  $\hat{L}_z$  associées à des valeurs propres que l'on déterminera.

En déduire l'action des opérateurs  $\hat{L}^+$  et  $\hat{L}^-$  sur les états  $|l, m\rangle$ .

### II) Niveaux d'énergie

On considère un système dont le moment cinétique est  $\hat{J}$ . L'hamiltonien de ce système s'écrit

$$\hat{H}_0 = a \hat{J}_z + \frac{b}{\hbar} \hat{J}_z^2$$

où  $a$  et  $b$  sont deux constantes positives et non nulles.

On suppose, dans tout le problème, que le moment cinétique  $\hat{J}$  est associé à la valeur  $j=1$ .

1°) En utilisant les propriétés de commutation de  $\hat{H}_0$  et de  $\hat{J}$ , déduire la base dans laquelle  $\hat{H}_0$  est diagonale. Etablir les états propres et les valeurs propres de  $\hat{H}_0$ .

2°) Faire un schéma clair représentant les différents niveaux d'énergie en précisant les énergies, leurs dégénérescences et les expressions des états propres associés. Quel est l'état fondamental ? Distinguer le cas  $a \neq b$  (avec comme hypothèse  $a > b$ ) et le cas  $a = b$ .

3°) On applique un champ magnétique statique  $\vec{B}_0$  (de module  $B_0$ ) sur ce système physique. L'énergie d'interaction entre le champ magnétique et le système physique s'écrit :

$$W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

où  $\vec{\mu}$  est le moment magnétique du système, que l'on peut écrire  $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$  ( $\gamma$  rapport gyromagnétique, négatif ici). A l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  il faut donc ajouter un terme  $\hat{W}$  pour obtenir l'hamiltonien total  $\hat{H}_t = \hat{H}_0 + \hat{W}$ .

a) On applique un champ  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{u}_z$  (cas  $a = b$ ). Montrer que le terme d'interaction permet de lever la dégénérescence des niveaux d'énergie.



b) On applique un champ  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{u}_x$ . Comment s'écrit la matrice  $\hat{W}$  dans la base des états propres de  $\hat{H}_0$ . *Indication : on exprimera  $\vec{J}_x$  en fonction de  $\hat{J}_+$  et de  $\hat{J}_-$ .* Cette matrice est-elle diagonale et hermitique ? Conclusions.

*Cet exercice pourra être continué ultérieurement, dans la cadre de la théorie des perturbations indépendantes du temps.*

### III) Moments cinétiques orbitaux

On considère un système de moment cinétique orbital  $\vec{J}$ . Les vecteurs propres communs à  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  s'écrivent  $|jm\rangle$  tels que

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \\ \hat{J}_z |jm\rangle &= m\hbar |jm\rangle \end{aligned}$$

Dans ce problème  $j = 1$  et la base  $\mathcal{B}$  constituée des vecteurs  $\{|jm\rangle\}$  s'écrira  $\{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$ .

On suppose que l'hamiltonien  $\hat{H}$  du système s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\omega}{\hbar} (\hat{J}_u^2 - \hat{J}_w^2)$$

où  $\hat{J}_u$  et  $\hat{J}_w$  sont les composantes du vecteur  $\vec{J}$  sur les deux directions  $Ou$  et  $Ow$  du plan  $Oxz$  à  $45^\circ$  de  $Ox$  et  $Oz$ .  $\omega$  est une constante réelle. On définit aussi les opérateurs  $\hat{J}_+$  et  $\hat{J}_-$  de façon habituelle  $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$  et  $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$ .

1°) Vérifier que  $\hat{H}$  peut s'écrire sous la forme

$$\hat{H} = \frac{\omega}{\hbar} (\hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x) = \frac{\omega}{2\hbar} (\hat{J}_+ \hat{J}_z + \hat{J}_- \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_+ + \hat{J}_z \hat{J}_-).$$

Pour cela on pourra projeter  $\vec{J}$  de deux façons différentes  $\vec{J} = J_x \vec{u}_x + J_z \vec{u}_z = J_u \vec{u}_u + J_w \vec{u}_w$ , ce qui permettra d'exprimer  $\hat{J}_u$  et  $\hat{J}_w$  en fonction de  $\hat{J}_x$  et  $\hat{J}_z$ .

Ecrire la matrice représentant  $\hat{H}$  dans la base  $\mathcal{B}$ . Déterminer, en diagonalisant cette matrice, les valeurs  $E_1 > E_2 > E_3$  de l'énergie ainsi que les états stationnaires correspondants qui seront notés  $|E_1\rangle, |E_2\rangle$  et  $|E_3\rangle$ .

2°) Définition de l'état du système:

A l'instant  $t = 0$  le système est dans l'état  $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle - |-1\rangle)$ .

- Ecrire  $|\Psi(0)\rangle$  dans la base des états stationnaires.
- Comment s'écrit le vecteur d'état  $|\Psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  en fonction de  $|+1\rangle, |0\rangle$  et  $|-1\rangle$ ?

3°) Valeurs moyennes à l'instant  $t$ :

a) Calculer la valeur moyenne de  $\hat{J}_z$  à l'instant t.

b) Calculer la valeur moyenne de  $\hat{J}_+$  à l'instant t. En déduire la valeur moyenne de  $\hat{J}_-$  (en remarquant que  $\hat{J}_-$  est l'opérateur adjoint de  $\hat{J}_+$ ) et ensuite les valeurs moyennes de  $\hat{J}_x$  et  $\hat{J}_y$  sans calcul supplémentaire ..

c) Quel est le mouvement effectué par le vecteur  $\langle \vec{J} \rangle(t)$  ?

4°) (Facultatif) Mesures:

On effectue, à l'instant t, une mesure de  $\hat{J}_z^2$  :

a) Existe-t-il des instants où un seul résultat est possible ?

b) On suppose que cette mesure a donné le résultat  $\hbar^2$ . Quel est l'état du système immédiatement après la mesure en fonction de  $|+1\rangle, |0\rangle$  et  $|-1\rangle$  ?

#### IV) Niveaux de rotation de la molécule HCl

On suppose que la distance entre les 2 noyaux est fixe et égale à  $r_0$ . On s'intéresse aux mouvements de rotation, à la vitesse angulaire  $\omega$ , de la molécule autour d'un axe perpendiculaire à l'axe internucléaire et passant par le centre de masse de la molécule.

En mécanique classique, on démontrerait facilement que la norme du moment cinétique orbital L de la molécule a pour expression  $L = \mu r_0^2 \omega$  (où  $\mu$  est la masse réduite) et que l'énergie cinétique de rotation s'écrit  $E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2\mu r_0^2}$ .

On étudie le problème du point de vue de la mécanique quantique. La distance internucléaire étant fixe, tous les termes d'énergie autres que l'énergie de rotation sont constants et on les choisit nuls, de sorte que le hamiltonien  $\hat{H}$  s'exprime facilement en fonction de l'opérateur  $\hat{L}^2$ .

1) La fonction d'onde liée à l'énergie de rotation ne dépend que des variables  $\theta$  et  $\varphi$ . Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante de t qu'elle satisfait.

2) Montrer que les énergies propres de rotation ont pour expressions

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} (l(l+1))$$

Quelles sont les fonctions d'onde spatiales correspondantes ? Quel est le degré de dégénérescence de chaque niveau d'énergie ?

3) Calculer, en eV, les énergies des 3 premiers niveaux d'énergie de rotation.

4) Par absorption d'un photon, la molécule peut passer d'un niveau rotationnel au niveau immédiatement supérieur. Calculer les longueurs d'onde correspondant aux excitations possibles mettant en jeu les 3 niveaux calculés. Dans quel domaine des ondes électromagnétiques se trouvent-elles ?

$$r_0 = 0.128 \text{ nm}, \quad m_{\text{H}} = 1.6610^{-27} \text{ kg}, \quad m_{\text{Cl}} = 6.1410^{-26} \text{ kg} \\ \hbar = 1.0510^{-34} \text{ Js}$$

