Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique, TD -0-

Rappels et révisions

Exercice 1

Une particule de masse m, dans un espace à une dimension, est soumise à un potentiel $V(x)$ qui est *nul* dans un intervalle de longueur a et *infini* ailleurs. Écrire l'équation de Schrödinger, et trouver les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes propres correspondantes. Justifier le choix de l'origine des axes adoptée. Vérifier l'orthogonalité.

Exercice 2

On considère l'oscillateur harmonique à une dimension

$$H = \frac{P_{op}^2}{2m} + \frac{KX_{op}^2}{2} \ .$$

1) Écrire l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde dépendant du temps $\Psi(x,t)$.

2) On cherche un état stationnaire d'énergie E sous la forme

$$\Psi(X,t) = \psi(X)\exp(-iEt/\hbar)$$

Écrire l'équation différentielle satisfaite par $\psi(X)$.

3) Expliquer qualitativement pourquoi seules certaines valeurs de E permettent d'avoir une fonction d'onde normalisable

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(X)|^2 < +\infty \ .$$

4) On pose $X = (Km/\hbar^2)^{1/4}x$ et $\psi(X) = \phi(x)$. Montrer que ϕ satisfait $h\phi = \epsilon\phi$, avec $h = -\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2 + x^2$ et préciser la relation entre h et H ainsi que ϵ et E.

5) On pose $p = -i\mathrm{d}/\mathrm{d}x$, $a = (x+ip)/\sqrt{2}$ et $a^\dagger = (x-ip)/\sqrt{2}$, ainsi que $N = a^\dagger a$. Donner les relations de commutation entre ces opérateurs. Montrer que $h = 2N+1 = 2a^\dagger a - 1$.

6) On note n une valeur propre de N et $|n\rangle$ un vecteur propre associé, supposé normalisé. Montrer que n est forcément réel et non négatif.

7) Montrer que $a^\dagger|n\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $n+1$. Quelle est sa norme ?

8) Montrer que $a|n\rangle$ est soit nul, soit vecteur propre de N avec la valeur propre $n-1$. Quelle est sa norme ?

9) Montrer que le spectre de N est formé des entiers positifs ou nuls, $n = 0, 1, 2, \ldots$. En déduire le spectre de H.

10) On cherche une solution *paire* de $-\phi''(x) + x^2\phi(x) = \epsilon x$ comme

$$\phi(x) = f(x)\exp(-x^2/2) \ .$$

Écrire l'équation différentielle satisfaite par $f(x)$. Si on cherche une solution comme série entière $f(x) = a_0 + a_1 x^2 + \cdots + a_n x^{2n} + \cdots$, quelle est la relation de récurrence entre les a_n ?

11) Montrer qu'en général $a_{n+1}/a_n \simeq 1/n$ quand n est grand, et que $f(x) \sim \exp(x^2)$ quand $x \to \infty$.

12) Retrouver ainsi les énergies des états pairs.

13) Procéder de même pour les états impairs.

14) Les polynômes de Hermite $H_n(x)$ satisfont

$$H_n(x) = 2^n x^n + \cdots \ , \qquad H_n'' - 2xH_n + 2nH_n = 0$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n H_m \exp(-x^2)\, \mathrm{d}x = \delta_{nm}\sqrt{\pi}2^n\, n! \ .$$

Exprimer les fonctions propres de h en termes des H_n.

Exercice 3

Dans la molécule d'ammoniac NH_3, l'azote peut osciller par effet tunnel d'un coté à l'autre du plan des atomes d'hydrogène. Classiquement, le potentiel est trop répulsif au milieu des deux points d'équilibre et la transition est interdite.

Soit x la distance algébrique de N au plan H_3, et μ la masse réduite N–H_3. Le potentiel (= énergie potentielle) est décrit très schématiquement comme

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si} \quad x > b \ , \\ 0 & \text{si} \quad a < x < b \ , \\ V_0 & \text{si} \quad 0 \leq x < a \ , \end{cases}$$

et symétriquement pour $x < 0$, où $V_0 > 0$ est la hauteur de la barrière, $(a+b)/2 > 0$ l'abscisse du point d'équilibre classique, $0 < b - a$ la largeur du puits, et $2a$ la largeur de la barrière.

1) Représenter ce potentiel.

2) Écrire la forme de la fonction d'onde d'énergie $E = \hbar^2 k^2/(2\mu)$ dans chacune des régions. On posera $K = \sqrt{2\mu(V_0 - E)}/\hbar$.

3) Écrire les conditions de raccordement.

On se concentre désormais sur les deux premiers niveaux. Le premier est symétrique, d'énergie E_s et de fonction d'onde $\psi_s(x)$, le second d'énergie E_a et de fonction d'onde impaire $\psi_a(x)$ antisymétrique.

4) Montrer qu'à la limite où $V_0 \to \infty$, ces deux états sont dégénérés. Donner leur énegie commune et leurs fonctions d'onde.

5) On suppose que V_0 est grand, mais fini, de sorte que $k \ll K$ et $Ka \gg 1$. On pose $K_0 = \sqrt{2\mu V_0}/\hbar$. On utilisera les approximations bien connues $\tanh X \simeq 1 - 2\exp X$ pour X grand et $tan(\pi + \epsilon) \simeq \epsilon$ pour ϵ petit. Montrer qu'en première approximation

$$E_m = \frac{E_a + E_a}{2} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\pi^2}{(b-a)^2}\left[1 - \frac{2}{(b-a)K_0}\right] \ .$$
$$A = \frac{E_a - E_s}{2} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\pi^2}{(b-a)^2}\frac{4\exp(-2K_0 a)}{(b-a)K_0} \ .$$

6) Dans quel problème similaire trouverait-on un facteur $\exp(-2K_0 a)$ impliquant la hauteur et la largeur de la barrière ?

7) On suppose que $\psi_a(x) < 0$ pour $x < 0$. Décrire qualitativement l'allure des états $\psi_g = (\psi - s - \psi_a)/\sqrt{2}$ et $\psi_d = (\psi_s + \psi_a)/\sqrt{2}$.

8) Décrire l'évolution en temps d'un état $\phi(t)$ qui à $t = 0$ serait $\phi(0) = \psi_d$. Identifier la pulsation des oscillations et la calculer en fonction des caractéristiques du problème.

9) Vérifier que $\psi(x) = (1 + \sqrt{2}x^2)\exp(-x^4/4)$ est solution de $-\psi''(x) + (x^6 - 7x^2)\psi(x) = \epsilon\psi(x)$ avec $\epsilon = -2\sqrt{2}$. Représenter la fonction d'onde et le potentiel. Est-ce l'état fondamental ?

Exercice 4

1) Un système à deux niveaux $|1\rangle$ et $|2\rangle$, d'énergies respectives $E_1 < E_2$ est modifié par une contribution non diagonale constante (et réelle) si bien que l'hamiltonien devient

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & b \\ b & E_2 \end{pmatrix}$$

Trouver les nouveaux états propres et leur énergie. Montrer sans calcul que l'écart entre les énergies est amplifié. Généraliser ce résultat.

2) Au temps $t = 0$, le système est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculer la probabilité de le trouver dans l'état $|2\rangle$ au temps t.

3) On modélise l'excitation par laser par un terme non diagonal oscillant, soit

$$H = \begin{pmatrix} a & b\exp(+i\omega t) \\ b\exp(-i\omega t) & c \end{pmatrix}$$

On pose $|\psi(t)\rangle = x(t)|1\rangle + y(t)|2\rangle$. Écrire le système différentiel satisfait par $x(t)$ et $y(t)$. Le résoudre en utilisant le changement de fonction $X(t) = x(t)\exp(-i\omega t/2)$ et $Y(t) = y(t)\exp(+i\omega t/2)$. Au temps $t = 0$, le système est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculer la probabilité de le trouver dans l'état $|2\rangle$ au temps t.