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 $t_0=0$, définie 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 $\langle H\rangle_o$ 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°) 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 :

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

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

($2\hbar\omega$ 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 :

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

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

* <u>L'écart type ou valeur quadratique moyenne</u>

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

<u>Calculons $\langle H^2 \rangle_0$:</u>

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

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) <u>On mesure à $t=0$: A</u>

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 dégénérée 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 $\Rightarrow$

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

$\hookrightarrow$ 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

$$\left.\begin{array}{l}(\hbar\omega, a) \longrightarrow |u_1> \\ (2\hbar\omega, a) \longrightarrow |\varphi_1> \\ (2\hbar\omega, -a) \longrightarrow |\varphi_2>\end{array}\right\} \text{ de façon unique}$$

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

à t $\forall$ $\quad |\psi(t)> = ?$

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

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

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

On remplace dans (*) et on obtient

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

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

or $\quad |u_j>$ est vecteur propre de H $\quad / \; H|u_j> = E_j|u_j>$

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

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

$$\Rightarrow \quad c_j(t) = K\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_j \cdot t\right) \quad \text{où } K = c_j(0) \left\langle \begin{array}{l} c_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ c_2(0) = \frac{1}{2} \\ c_3(0) = \frac{1}{2} \end{array}\right.$$

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

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

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 $\frac{dH}{dt}=0 \Longrightarrow \langle H\rangle_t = \langle H\rangle_0$

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

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

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

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 : $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

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 (les $E_k \neq f(t)$) $\frac{dH}{dt}=0$ et en plus $[H,H]=0$

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

$\Rightarrow$ 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 $Pr(E_4) = 1$

ce sera un résultat certain.