Corrigé type de l'Examen du module mécanique quantique 2 (2023/2024)

Exercice 01 :

Considérons une particule de spin 1/2.

(a) les valeurs propres et les vecteurs propres de $S_x$et S_z, :

les valeurs propres de S_x sont : $\frac{\hbar}{2}$ et : $-\frac{\hbar}{2}$

0,25 0,25

les vecteurs propres de S_x:

pour la valeur $\frac{\hbar}{2}$ soit $|\theta_+\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ le vecteur propre, l'équation aux valeurs propre donne :

$$S_x|\theta_+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\theta_+\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_2 = x_1 \\ x_1 = x_2 \end{cases} \Rightarrow |\theta_+\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

En appliquant la condition de normalisation :

$$\langle\theta_+|\theta_+\rangle = 1 \Leftrightarrow (x_1^* \quad x_1^*)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_1 \end{pmatrix} = 1 \Leftrightarrow 2|x_1|^2 = 1 \Rightarrow x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow |\theta_+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$ 1

pour la valeur $-\frac{\hbar}{2}$ soit $|\theta_-\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ le vecteur propre, l'équation aux valeurs propre donne :

$$S_x|\theta_-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\theta_-\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_2 = -x_1 \\ x_1 = -x_2 \end{cases} \Rightarrow |\theta_-\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ -x_1 \end{pmatrix}$$

En appliquant la condition de normalisation :

$$\langle\theta_-|\theta_-\rangle = 1 \Leftrightarrow (x_1^* \quad -x_1^*)\begin{pmatrix} x_1 \\ -x_1 \end{pmatrix} = 1 \Leftrightarrow 2|x_1|^2 = 1 \Rightarrow x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow |\theta_-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$ 1

les valeurs propres de S_z sont : $\frac{\hbar}{2}$ et : $-\frac{\hbar}{2}$

0,25 0,25

les vecteurs propres de S_z: pour la valeur $\frac{\hbar}{2}$ le vecteur propre est : $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

0,5

pour la valeur-$\frac{\hbar}{2}$ le vecteur propre est : $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

0,5

(c) l'état de système à t > 0 :

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = exp\left(-\frac{itH}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle$$

Où :

$$H = \hbar\frac{\gamma B_z}{2}\sigma_z = \gamma B_z S_z$$

$$|\psi(t)\rangle = exp\left(-\frac{it\gamma B_z}{\hbar}S_z\right)|\psi(0)\rangle$$

Où :

$$|\psi(0)\rangle = |\theta_-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2}\,|+\rangle - 1/\sqrt{2}\,|-\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = exp\left(-\frac{it\gamma B_z}{\hbar}S_z\right)\left(1/\sqrt{2}\,|+\rangle - 1/\sqrt{2}\,|-\rangle\right)$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right)|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right)|-\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right) \end{pmatrix}$$ 1

valeurs moyenne de S_z et S.

$$\langle S_z\rangle = \langle\psi(t)|S_z|\psi(t)\rangle$$

$$\langle S_z\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right) \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right)\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right) \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right)\right)\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(\frac{it\gamma}{2}\right) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} exp\left(-\frac{it\gamma}{2}\right) \end{pmatrix}$$ 1

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[-\frac{1}{2} exp(i\gamma t) - \frac{1}{2} exp(-i\gamma t)\right] = -\frac{\hbar}{2} cos(\gamma t)$$

Exercice 02 :

1. l'état $\psi_{100}(r,\theta,\varphi)$, de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène pour $n = 1\ et\ l < n \Rightarrow l = 0$. pour $n = 1\ et\ l = 0 \Rightarrow k_{max} = n - l - 1 = 0$

$$v(x) = x^{l+1}\sum_{k=0}^{k_{max}=0} c_k x^k = xc_0$$

$$u(x) = c_0 x e^{-\alpha x} \Rightarrow u(r) = c_0 \frac{r}{a_0} e^{-r/a_0}$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} = \frac{c_0}{a_0} e^{-r/a_0}$$ 1

puisque c_0 est le seul coefficient non nul. On obtient c_0 à partir de la condition de normalisation.

$$\int_0^\infty R^*(r)R(r)r^2 dr = 1$$

$$\int_0^\infty \left(\frac{c_0^*}{a_0} e^{-r/a_0}\right)\left(\frac{c_0}{a_0} e^{-r/a_0}\right) r^2 dr = 1$$

$$\frac{|c_0|^2}{a_0^2}\int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^2 dr = 1 \Rightarrow \frac{|c_0|^2}{a_0^2}\left(\frac{a_0^3}{4}\right) = 1 \Rightarrow a_0 = \frac{2}{\sqrt{a_0}}$$ 0,5

0,5 $$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$$ 0,5

Puisque $l = 0, m = 0 \Rightarrow Y_0^0(\theta,\varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$, soit

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$ 0,5

2. Calculer la densité probabilité radiale $P(r)$.

$$P(r) = r^2|R_{10}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$$ 0,5

3. Déduire les rayons des sphères les plus probables

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{4}{a_0^3}\left(2re^{-2r/a_0} - \frac{2r^2}{a_0} e^{-2r/a_0}\right) = 0$$ 0,5

$$1 - \frac{r}{a_0} = 0 \Rightarrow r = a_0$$

4. Représentation graphiquement de $P(r)$ 0,5

Exercice 03 :

(a). Les valeurs et les vecteurs propres approchés de H, en utilisant la théorie de la perturbation stationnaire du second ordre pour

$$H = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}}_{H_0} + \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \end{pmatrix}}_{W} \quad \varepsilon \ll 1$$

La correction de second ordre de l'énergie s'écrire :

$$E_n \approx E_n^0 + \langle \varphi_n^0 | W | \varphi_n^0 \rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k^0 | W | \varphi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$ 0,25

Et les vecteurs propres:

$$|\psi_n\rangle \approx |\varphi_n^0\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k^0 | W | \varphi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_k^0} |\varphi_k^0\rangle$$ 0,25

où les vecteurs $|\varphi_n^0\rangle$ sont les vecteurs propres de H_0 qui sont:

$$|\varphi_1^0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_2^0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_3^0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$ 0,25 0,25 0,25

correspondant aux valeurs propres de H_0 $E_1^0 = 0$, $E_2^0 = 1$ et $E_3^0 = 2$ respectivement.

Pour le niveau 1 : 0,25 0,25 0,25

$$E_1 = E_1^0 + \langle \varphi_1^0 | W | \varphi_1^0 \rangle + \frac{|\langle \varphi_2^0 | W | \varphi_1^0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{|\langle \varphi_3^0 | W | \varphi_1^0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_3^0}$$

$$\langle \varphi_1^0 | W | \varphi_1^0 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \varepsilon$$

$$\langle \varphi_2^0 | W | \varphi_1^0 \rangle = (0 \quad 1 \quad 0) \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \varphi_3^0 | W | \varphi_1^0 \rangle = (0 \quad 0 \quad 1) \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$E_1 = 0 + \varepsilon + 0 + 0 = \varepsilon$$ 1

Le vecteur propre :

$$|\psi_1\rangle \approx |\varphi_1^0\rangle + \frac{\langle \varphi_2^0 | W | \varphi_1^0 \rangle}{E_1^0 - E_2^0} |\varphi_2^0\rangle + \frac{\langle \varphi_3^0 | W | \varphi_1^0 \rangle}{E_1^0 - E_3^0} |\varphi_3^0\rangle$$

$$|\psi_1\rangle \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{0}{0-1}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{0}{0-2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$ 1

Pour le niveau 2 :

$$E_2 = E_2^0 + \langle \varphi_2^0 | W | \varphi_2^0 \rangle + \frac{|\langle \varphi_1^0 | W | \varphi_2^0 \rangle|^2}{E_2^0 - E_1^0} + \frac{|\langle \varphi_3^0 | W | \varphi_2^0 \rangle|^2}{E_2^0 - E_3^0}$$

$$\langle\varphi_2^0|W|\varphi_2^0\rangle = (0 \quad 1 \quad 0)\begin{pmatrix}\varepsilon & 0 & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle\varphi_1^0|W|\varphi_2^0\rangle = \langle\varphi_2^0|W|\varphi_1^0\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_3^0|W|\varphi_2^0\rangle = (0 \quad 0 \quad 1)\begin{pmatrix}\varepsilon & 0 & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \varepsilon$$

$$E_2 = 1 + 0 + 0 + \frac{\varepsilon^2}{1-2} = 1 - \varepsilon^2$$ 1

Le vecteur propre :

$$|\psi_2\rangle \approx |\varphi_2^0\rangle + \frac{\langle\varphi_1^0|W|\varphi_2^0\rangle}{E_2^0 - E_1^0}|\varphi_2^0\rangle + \frac{\langle\varphi_3^0|W|\varphi_2^0\rangle}{E_2^0 - E_3^0}|\varphi_3^0\rangle$$

$$|\psi_2\rangle \approx \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} + \frac{0}{1-0}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{1-2}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\-\varepsilon\end{pmatrix}$$ 1

Pour le niveau 3 :

$$E_3 = E_3^0 + \langle\varphi_3^0|W|\varphi_3^0\rangle + \frac{|\langle\varphi_1^0|W|\varphi_3^0\rangle|^2}{E_3^0 - E_1^0} + \frac{|\langle\varphi_2^0|W|\varphi_3^0\rangle|^2}{E_3^0 - E_2^0}$$

$$\langle\varphi_3^0|W|\varphi_3^0\rangle = (0 \quad 1 \quad 0)\begin{pmatrix}\varepsilon & 0 & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle\varphi_1^0|W|\varphi_3^0\rangle = \langle\varphi_3^0|W|\varphi_1^0\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_2^0|W|\varphi_3^0\rangle = \langle\varphi_3^0|W|\varphi_2^0\rangle = \varepsilon$$

$$E_3 = 2 + 0 + 0 + \frac{\varepsilon^2}{2-1} = 2 + \varepsilon^2$$ 1

Le vecteur propre :

$$|\psi_3\rangle \approx |\varphi_3^0\rangle + \frac{\langle\varphi_1^0|W|\varphi_3^0\rangle}{E_3^0 - E_1^0}|\varphi_1^0\rangle + \frac{\langle\varphi_2^0|W|\varphi_3^0\rangle}{E_3^0 - E_2^0}|\varphi_2^0\rangle$$

$$|\psi_2\rangle \approx \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} + \frac{0}{2-0}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{2-1}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\varepsilon\\1\end{pmatrix}$$ 1

(b) Trouvez les valeurs propres exactes de H

$$det[H - \lambda I]0 = \begin{vmatrix}\varepsilon - \lambda & 0 & 0\\ 0 & 1-\lambda & \varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 2-\lambda\end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (\varepsilon - \lambda)[(1-\lambda)(2-\lambda) - \varepsilon^2] = 0$$

$$E_1 = \varepsilon, E_2 = \frac{3 - \sqrt{1 + 4\varepsilon^2}}{2}, E_3 = \frac{3 + \sqrt{1 + 4\varepsilon^2}}{2}$$ 1

(c) Comparaison entre les résultats des parties (a) et (b).

Le valeurs exactes	Le valeurs approchées
$E_1 = \varepsilon$	$E_1 = \varepsilon$
$E_2 = E_2 = \frac{3 - \sqrt{1 + 4\varepsilon^2}}{2} \approx 1 - \varepsilon^2$	$E_2 \approx 1 - \varepsilon^2$
$E_3 = E_3 = \frac{3 + \sqrt{1 + 4\varepsilon^2}}{2} \approx 2 + \varepsilon^2$	$E_3 \approx 2 + \varepsilon^2$

1

Nous développons $\sqrt{1 + \varepsilon^2}$ dans une série binomiale :

$$\sqrt{1 + \varepsilon^2} = 1 + \frac{\varepsilon^2}{2} + \cdots \quad \varepsilon^2 \ll 1$$