Université Paris-Sud, Orsay **L3 PAPP**

PHYS A302 Physique Quantique

Partiel du 3 novembre 2015 (9.30h - 12.30h)

Aucun document n'est autorisé, pas plus que téléphone portable ou calculatrice

I. Courant de probabilité dans la mécanique ondulatoire

Soit $\psi(x,t)$ une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger en une dimension pour une particule soumise à un potentiel $V(x)$, de sorte que $H = -(\hbar^2/2m)\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2 + V(x)$. Nous avons déjà vu que $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$, où $P\mathrm{d}x$ donne la probabilité qu'une particule se trouve entre x et $x + \mathrm{d}x$ au temps t. Lorsque cette densité n'est pas uniforme dans l'espace, on a un courant de densité de probabilité. *On peut comparer la situation avec celle d'une distribution de charge non-uniforme, avec un flot de charge depuis les régions de charge élevée vers les régions de charge moins élevée.*

Dans cet exercice on va chercher à exprimer et ensuite calculer ce courant de densité, noté j, pour une fonction d'onde $\psi(x,t)$ quelconque.

1. Rappeler la raison pour laquelle on veut que la fonction d'onde soit normalisée.
2. Ecrire $\partial P/\partial t$ en termes de $\partial\psi(x,t)/\partial t$ et $\partial\psi^*(x,t)/\partial t$.
3. Ecrire l'équation de Schrödinger pour $\partial\psi(x,t)/\partial t$. Faire de même pour $\partial\psi^*(x,t)/\partial t$.
4. On pose $\partial P/\partial t = \partial j/\partial x$. Déduire, à partir des deux questions précédentes, une expression de $j(x,t)$ où figurent les produits $\psi\partial\psi^*/\partial x$ et $\psi^*\partial\psi/\partial x$.

On considère la fonction d'onde $\psi(x,t) = \{A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)\}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}$, où A et B sont des nombres complexes tels que $|A|^2 + |B|^2 = 1$.

5. Calculer $j(x)$. Est-ce que le courant dépend de la position ? Pourquoi ?
6. On considère le cas particulier de $A = B = 1/\sqrt{2}$. Calculer j et commenter votre résultat.

II. Formalisme de Dirac et postulats

On donne les définitions des matrices de Pauli :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

1. Calculer les commutateurs $C_1 = [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z]$, $C_2 = [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]$ et $C_3 = [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y]$.
2. Laquelle de ces matrices est exprimée dans sa base de vecteurs propres ? Précisez ces vecteurs propres, que l'on notera $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$. Donner les résultats de i) $\hat{\sigma}_x|u_1\rangle$ ii) $\hat{\sigma}_x|u_2\rangle$ iii) $\hat{\sigma}_y|u_1\rangle$ et iv)$\hat{\sigma}_y|u_2\rangle$.

On donne que l'hamiltonien d'un certain système s'écrit

$$\hat{H} = b_1\hat{\sigma}_x + b_2\hat{\sigma}_y$$

où b_1 et b_2 sont des nombres réels.

3. Soit $|\psi(t)\rangle = a_1(t)|u_1\rangle + a_2(t)|u_2\rangle$ le vecteur d'état à l'instant t de la particule. Quelle est l'équation qui décrit son évolution dans le temps ?
4. En utilisant cette équation, montrer que

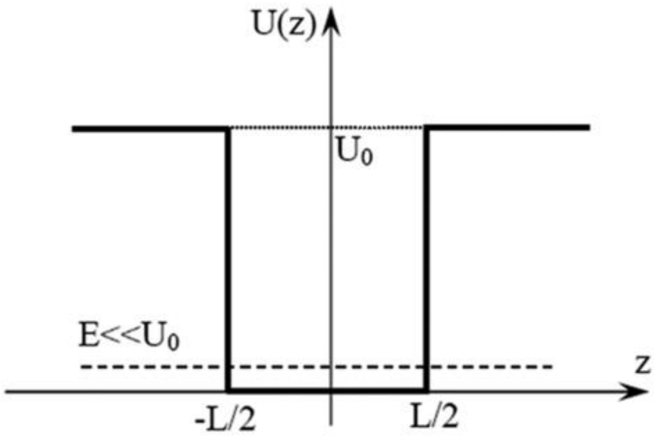
$$\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t}|u_1\rangle + \frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t}|u_2\rangle = f_1|u_1\rangle + f_2|u_2\rangle$$

en précisant les coefficients f_1 et f_2. En déduire (en projetant sur chacun des vecteurs de base) deux équations différentielles couplées pour $\mathrm{d}a_1/\mathrm{d}t$ et $\mathrm{d}a_2/\mathrm{d}t$. On introduira $b_1 + ib_2 = be^{i\theta}$ et $b_1 - ib_2 = be^{-i\theta}$.
5. Montrer, à partir des équations précédentes, que $a_1(t)$ satisfait une équation différentielle homogène de 2nd ordre. Montrer que les solutions de celles-ci sont périodiques, et précisez la pulsation, ω_0 ainsi que la période, T en fonction des paramètres. Obtenir de même l'équation differentielle pour $a_2(t)$.
6. On donne les conditions initiales $a_1(0) = 1$ et $\mathrm{d}a_1/\mathrm{d}t = 0$. Montrer alors que $a_1(t) = \cos(\omega_0 t)$.
7. En utilisant les équations couplées de la question 5, déduire la solution de $a_2(t)$. En déduire l'expression de $|\psi(t)\rangle$.
8. Définir et calculer la valeur moyenne de l'observable $\langle\hat{\sigma}_z\rangle_\psi$ à l'instant t. Montrer quelle est périodique, de période $T/2$.
9. $|\psi\rangle$ décrit une grandeur physique, appelée spin, associée à une particule. Le spin de cette particule peut être dans 2 états différents : état (+) décrit par $|u_1\rangle$ et (-) décrit par $|u_2\rangle$. À $t = 0$, $|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle$ donc le spin de la particule est dans l'état (+). On effectue une mesure à l'instant $t = T/4$. Donner les probabilités P_+ et P_- de trouver les deux états (+) et (-) respectivement.
10. On effectue une mesure au temps $t = T/2$. Quelle est la valeur moyenne de l'observable $\hat{\sigma}_z$? Définir et calculer son écart moyen quadratique, $\Delta\sigma_z$.

III FORMALISME DE SCHRÖDINGER :

On considère une particule de masse *m* soumise au potentiel *U(z)* schématisé ci-dessous : *U(z)=U0* quand *z<-L/2* et *z>L/2* ; *U(z)=0* quand *L/2<z<L/2*. *U(z)* présente deux discontinuités finies en *z=±L/2*.

Ce type de potentiel peut être utilisé en première approximation pour décrire un état lié nucléaire tel que le deutéron qui est constitué d'un proton et d'un neutron. L'interaction 'forte' qui lie le proton au neutron est en effet 'confinante' et de très courte portée.



$$\phi = \begin{cases} \phi_I(z) & z \in \left]-\infty, -\frac{L}{2}\right] \\ \phi_{II}(z) & z \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \\ \phi_{III}(z) & z \in \left[\frac{L}{2}, \infty\right[\end{cases}$$

1. Ecrire l'équation de Schrödinger dépendante du temps et justifiez que l'on puisse chercher la solution sous la forme : $\psi(z,t) = \phi(z)e^{-iEt/\hbar}$. Donner l'expression de l'équation de Schrödinger *indépendante du temps* à laquelle obéit $\phi(z)$.
2. On cherche l'expression de $\phi(z)$. On délimite trois régions I, II, III et l'on définit $\phi_I(z), \phi_{II}(z), \phi_{III}(z)$ (**cf. figure ci-dessus**).
   a. Donner les expressions des équations auxquelles obéissent $\phi_I(z), \phi_{II}(z), \phi_{III}(z)$.
   On introduira les deux constantes $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; K = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.
   b. Donner les expressions mathématiques littérales de $\phi_I(z), \phi_{II}(z), \phi_{III}(z)$ (**on ne cherchera pas à trouver les expressions des constantes d'intégration ni à normaliser ces fonctions d'ondes**)
3. Nous ne ferons pas les calculs qui mènent aux expressions des constantes d'intégrations car ils sont assez longs.
   a. On peut montrer que l'on peut écrire les solutions sous la forme
   $$\phi^S(z): \begin{Bmatrix} z \le -L/2: & \phi_I^S(z) = Ae^{Kz} \\ L/2 \le z \le L/2: & \phi_{II}^S(z) = B\cos kz \\ z \ge L/2: & \phi_{III}^S(z) = Ae^{-Kz} \end{Bmatrix} \text{ ou } \phi^A(z): \begin{Bmatrix} z \le -L/2: & \phi_I^A(z) = Ae^{Kz} \\ L/2 \le z \le L/2: & \phi_{II}^A(z) = B\sin kz \\ z \ge L/2: & \phi_{III}^A(z) = -Ae^{-Kz} \end{Bmatrix}$$
   Vérifier que les deux ensembles de fonctions d'ondes suivantes sont bien solutions.
   b. Justifiez que la première solution soit dite 'Symétrique' et la deuxième 'Antisymétrique' (cf. les exposants '*S*' et '*A*' dans les expressions ci-dessus).
   c. Ecrire les conditions de continuité pour $\phi(z)$ et $d\phi(z)/dz$ en $z = -L/2$ et $z = +L/2$. On traitera séparément les solutions 'A' et 'S'.

d. En déduire que les équations de quantification des niveaux d'énergies pour les solutions '*A*' et '*S*'s'écrivent :

$$\begin{cases} \text{solution 'S' :} \tan\dfrac{kL}{2} = \dfrac{K}{k} \\ \text{solution 'A' :} \dfrac{1}{\tan\dfrac{kL}{2}} = \dfrac{K}{k} \end{cases}$$

Indiquer en quoi ces équations sont bien des équations de quantification qui permettent de calculer les expressions des niveaux d'énergies du système (**on ne cherchera pas à résoudre ces équations).**

i. ***Question subsidiaire hors barème, qui est indépendante de la suite du problème*** : *représentez graphiquement les solutions de l'équations 'S' et montrer ainsi graphiquement comment déterminer les niveaux d'énergie. Il sera commode d'introduire* $k_0^2 = k^2 + K^2$ *et de prendre le carré de l'équation*.

e. Donner l'expression de la probabilité d'observer la particule dans l'intervalle $z \in [-L/4, +L/4]$ en fonction de *B* et *k* pour les deux types de solutions '*A*' et '*S*'en admettant que $k=k_n$ soit une des valeurs permises de la question précédente.

4. On se place maintenant dans l'approximation $E \ll U_0$ de sorte que l'on puisse considérer $\dfrac{k}{K} \to 0$.

a. En prenant la limite $\dfrac{k}{K} \to 0$ des équations de quantifications de la question 3.d), donner les expressions des niveaux d'énergies correspondants aux solutions '*S*' et '*A*'.

b. Tracer l'allure des fonctions d'ondes qui correspondent aux deux premiers niveaux de chaque type solutions '*S*' et '*A*.'

5. ***Question subsidiaire hors barème*** : *calculer l'expression de la probabilité d'observer la particule dans l'intervalle* $z \in]-\infty, -L/2]$ *en fonction de L, k, et K (on ne se placera pas dans la limite* $E \ll U_0$ *pour ce calcul).*