Mécanique quantique II
Corrigé série 1

1 Bra et Ket

Soit $\mathscr{H}$ un espace de Hilbert de dimension n, et $\mathscr{B} = \{|e_i\rangle,\ i \in \{1 \ldots n\}\}$ une base orthonormée.

1. Un élément $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ se décompose dans la base $\mathscr{B}$ comme
$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i |e_i\rangle \qquad \text{avec} \qquad \psi_i = \langle e_i|\psi\rangle\,.$$
2. L'espace dual $\mathscr{H}^*$ est l'ensemble des formes linéaires sur $\mathscr{H}$, c'est-à-dire l'ensemble des fonctions linéaires $\mathscr{H} \to \mathbb{C}$. A tout élément $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ correspond une unique forme linéaire $\langle\psi| \in \mathscr{H}^*$ définie par le produit hermitien. Réciproquement à toute forme linéaire $\langle\psi| \in \mathscr{H}^*$ correspond un unique vecteur $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. La base duale est $\mathscr{B}^* = \{\langle e_i|,\ i \in \{1 \ldots n\}\}$.
   <u>Remarque :</u> si $\mathscr{H}$ est de dimension infinie, il n'est pas évident que les formes linéaires soient en bijection avec les vecteurs, cela résulte du théorème de représentation de Riesz.
3. L'action de $P_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ sur un élement $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ est donnée par $P_i|\psi\rangle = |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \psi_i|e_i\rangle$, ce qui correspond à la projection sur le vecteur de base $|e_i\rangle$. Pour le carré nous avons $P_i^2|\psi\rangle = |e_i\rangle\langle e_i|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \psi_i|e_i\rangle$ et donc $P_i^2 = P_i$.
4. Un opérateur $A : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ est hermitien s'il vérfie $A = A^\dagger$ où $A^\dagger$ est l'adjoint de A défini par
$$A^\dagger_{ij} = \langle e_i|A^\dagger|e_j\rangle = A^*_{ji} = \langle e_j|A|e_i\rangle^*\,.$$
   Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles et les vecteurs propres engendrent $\mathscr{H}$, ce qui veut dire qu'il est possible de trouver une base de vecteurs propres.
   <u>Remarque :</u> si $\mathscr{H}$ est de dimension infinie, les vecteurs propres d'un opérateur hermitien n'engendrent pas forcémement $\mathscr{H}$, *i.e.* il n'est pas toujours possible de trouver une base de vecteurs propres.
5. Une base de l'espace des opérateurs sur $\mathscr{H}$ est donnée par $\left\{|e_j\rangle\langle e_i|,\ i,j \in \{1 \ldots n\}\right\}$ et l'opérateur identité est
$$1 = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i|\,.$$

2 Equation de Schrödinger

1. L'évolution d'un état $|\psi(t)\rangle$ par un Hamiltonien $H(t)$ est donnée par l'équation de Schrödinger
$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle\,.$$
2. Lorsque H ne dépend pas du temps, l'équation de Schrödinger peut être intégrée
$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{-iHt}{\hbar}\right\}|\psi(0)\rangle\,.$$
3. En particulier si $|\psi(0)\rangle$ est un vecteur propre de H de valeur propre E, alors $H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle$ et donc
$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{-iHt}{\hbar}\right\}|\psi(0)\rangle = \exp\left\{\frac{-iEt}{\hbar}\right\}|\psi(0)\rangle\,.$$

3 Système à deux états

L'espace de Hilbert associé à une particule de spin $1/2$ est $\mathbb{C}^2$ et une base orthonormée est donnée par les deux états "up" et "down"

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

1. Les opérateurs de projection du spin le long des trois axes sont donnés par

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i\,,$$

   où σ_i sont les matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

   Les opérateurs de projection du spin ne commutent pas, et cela veut dire qu'il est impossible de mesurer simultanément la projection du spin selon deux axes différents.

2. Avec

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle + |d\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

   nous avons

$$\langle\psi|S_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2},$$

   et

$$\langle\psi|S_z|\psi\rangle = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0\,,$$

   ce qui veut dire que la mesure du spin de $|\psi\rangle$ donne $\hbar/2$ selon l'axe x et zéro selon l'axe z.

3. L'hamiltonien d'un spin dans un champs magnétique $\mathbf{B} = Be_x$ est

$$H = -\gamma S_x B = \frac{-\hbar\gamma B}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

   Les valeurs propres et vecteurs propres de H sont donnés par

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar\gamma B}{2}, \qquad |E_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad |E_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

   si bien que l'état initial peut s'écrire comme

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|E_+\rangle + |E_-\rangle\right).$$

   L'évolution de $|\psi(0)\rangle$, est alors donnée par

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \exp\left\{\frac{-iHt}{\hbar}\right\}|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left\{\frac{-iHt}{\hbar}\right\}(|E_+\rangle + |E_-\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left\{\frac{-iE_-t}{\hbar}\right\}|E_-\rangle + \exp\left\{\frac{-iE_+t}{\hbar}\right\}|E_+\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\exp\left\{\frac{i\gamma Bt}{2}\right\}(|u\rangle + |d\rangle) + \exp\left\{\frac{-i\gamma Bt}{2}\right\}(|u\rangle - |d\rangle)\right) \\
&= \cos\left(\frac{\gamma Bt}{2}\right)|u\rangle + i\sin\left(\frac{\gamma Bt}{2}\right)|d\rangle\,.
\end{aligned}$$

4 Oscillateur harmonique

L'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique en une dimension avec $m = \omega = \hbar = 1$ est donné par

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{X^2}{2} \, .$$

Pour trouver les états propres de l'énergie, on définit les opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \, , \qquad\qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) \, ,$$

avec lesquels on peut écrire l'Hamiltonien comme

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2} \, .$$

1. Avec les définitions de a et $a^\dagger$, et sachant que $[X, P] = i$, alors

   $$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[X + iP, X - iP] = \frac{1}{2}\Big([X, X] - i[X, P] + i[P, X] + [P, P]\Big) = 1$$

   et

   $$[a, H] = [a, a^\dagger a] = aa^\dagger a - a^\dagger aa = [a, a^\dagger]a = a \, .$$

2. Soit $|E\rangle$ un état propre de H, c'est-à-dire

   $$H|E\rangle = E|E\rangle \, .$$

   Par le point précédent,

   $$Ha|E\rangle = [H, a]|E\rangle + aH|E\rangle = -a|E\rangle + Ea|E\rangle = (E - 1)\, a|E\rangle \, ,$$

   ce qui veut dire que $a|E\rangle$ est un vecteur propre de H avec valeur propre $E-1$, *i.e.* $a|E\rangle = |E-1\rangle$.

3. L'Hamiltonien H est positif car

   $$\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle a\psi|a\psi\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \, ,$$

   et donc ses valeurs propres sont positives. S'il n'existe pas d'état fondamental $|0\rangle$ pour lequel $a|0\rangle = 0$, alors en agissant avec a il est possible de construire un vecteur propre de H avec valeur propre strictement négative, ce qui est une contradiction. L'énergie est l'état fondamental est

   $$\langle 0|H|0\rangle = \langle 0|a^\dagger a|0\rangle + \frac{1}{2}\langle 0|0\rangle = \frac{1}{2} \, .$$

5 Barrière de potentiel

L'Hamiltonien d'une particule de masse m dans une barrière de potentiel est

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\,,$$

avec V la barrière de potentiel suivante :

$$V(x) = \begin{cases} V_0\,, & |x| < a\,,\\ 0\,, & |x| > a\,. \end{cases}$$

1. L'équation de Schrödinger stationnaire

   $$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,,$$

   est pour ce problème donnée explicitement par

   $$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + (E - V(x))\,\psi(x) = 0\,.$$

   Dans la région $|x| > a$, $V(x) = 0$ et donc la solution générale est de la forme

   $$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\,, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,,$$

   avec $A, B \in \mathbb{C}$. Dans la région $|x| < a$, $V(x) = V_0$ et puisque $E < V_0$, la solution générale est

   $$\psi(x) = Ce^{\lambda x} + De^{-\lambda x}\,, \qquad \lambda = \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}}\,,$$

   avec $C, D \in \mathbb{C}$.
2. S'il y a uniquement une onde plane Ae^{ikx} provenant de la région $x < -a$, la solution générale sur $\mathbb{R}$ est de la forme

   $$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\,, & x < -a\,,\\ Ce^{\lambda x} + De^{-\lambda x}\,, & -a < x < a\,,\\ Ee^{ikx}\,, & x > a\,, \end{cases}$$

   avec $B, C, D, E \in \mathbb{C}$ déterminés de manière à ce que $\psi \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. L'onde réfléchie correspond à l'onde dont l'amplitude est B et l'onde transmise celle dont l'amplitude est E.