L3 - Physique-Chimie 26 novembre 2015
Mécanique quantique

TD n°5 : Formalisme de Dirac (2) et évolution temporelle

1 Fonction d'onde et équation de Schrödinger

A. Préliminaire : distribution δ de Dirac.– La distribution $\delta(x)$ peut être vue physiquement comme la limite d'une fonction $\delta^\epsilon(x)$, régulière, centrée sur l'origine et de largeur $\epsilon \to 0$, telle que $\int \mathrm{d}x\, \delta^\epsilon(x) = 1$.

1/ Donner deux exemples de fonction $\delta^\epsilon(x)$.

2/ Soit $\varphi(x)$ une fonction régulière. La propriété fondamentale de la distribution de Dirac est

$$\boxed{\int \mathrm{d}x\, \delta(x)\, \varphi(x) = \varphi(0)} \tag{1}$$

ou plus simplement $\delta(x)\,\varphi(x) = \delta(x)\,\varphi(0)$.
Que vaut $\int \mathrm{d}x\, \delta(x-a)\, \varphi(x)$?

3/ En faisant « agir » $\delta(\lambda x)$ sur une fonction test, montrer que $\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|}\delta(x)$. Déduire quelle est la dimension de $\delta(x)$.

4/ Que vaut la transformée de Fourier de la distribution de Dirac ? Déduire la relation très utile

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \delta(x)\ . \tag{2}$$

B. Opérateurs position et impulsion.– On considère une particule de masse m dans la situation dimensionnelle pour simplifier. On introduit $\hat{x}$ et $\hat{p}$ les opérateurs position et impulsion de la particule.

1/ On note $|\,x\,\rangle$ l'état quantique où la particule est en x. Puisque cet état est caractérisé par une unique valeur de la position, c'est un vecteur propre de l'opérateur position :

$$\hat{x}|\,x\,\rangle = x|\,x\,\rangle\ . \tag{3}$$

D'après la définition du produit scalaire, justifier que la fonction d'onde caractérisant un état quantique $|\,\psi\,\rangle$ est $\psi(x) = \langle\,x\,|\,\psi\,\rangle$.

2/ On a $\langle\,x\,|\,x_0\,\rangle = \delta(x-x_0)$ (normalisation des états $|\,x\,\rangle$). Que vaut $\int \mathrm{d}x_0\, \langle\,x\,|\,x_0\,\rangle\langle\,x_0\,|\,\psi\,\rangle$? Et $\int \mathrm{d}x_0\, |\,x_0\,\rangle\langle\,x_0\,|$?

3/ On note $|\,p\,\rangle$ l'état quantique où la particule a une impulsion p, autrement dit

$$\hat{p}|\,p\,\rangle = p|\,p\,\rangle\ . \tag{4}$$

Sachant que la condition de normalisation est $\langle\,p\,|\,p'\,\rangle = \delta(p-p')$, justifier que

$$\langle\,x\,|\,p\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\ . \tag{5}$$

4/ Justifier que la transformation de Fourier et la transformation inverse

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar} \quad \text{et} \quad \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}p}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \tag{6}$$

s'interprètent comme des changements de base.

5/ Retrouver et interpréter l'égalité de Parseval-Plancherel, pour deux fonctions ψ et φ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi^*(x)\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\, \tilde{\psi}^*(p)\tilde{\varphi}(p)$$

C. Équation de Schrödinger.– L'hamiltonien (l'opérateur « énergie ») de la particule est

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$$

1/ Quelle est l'action de $\hat{x}^n$ sur la fonction d'onde $\psi(x) = \langle\, x \,|\, \psi \,\rangle$? Et celle de $V(\hat{x})$?

2/ Quelle est l'action de $\hat{p}$ sur la fonction d'onde ?

3/ L'équation d'évolution temporelle du vecteur d'état $|\, \psi(t) \,\rangle$ est

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\, \psi(t) \,\rangle = \hat{H} |\, \psi(t) \,\rangle} \tag{7}$$

Retrouver l'équation d'onde de Schrödinger en multipliant cette équation par $\langle\, x \,|$.

4/ Quelle équation différentielle obtient-on si on multiplie l'équation (7) par $\langle\, p \,|$? Donner deux exemples de potentiels pour lesquels la résolution de cette équation serait simple.

2 Dynamique de spin pour une particule de spin 1/2

Certaines particules possèdent un degré de liberté interne de spin en sus de leurs degrés de liberté de translation (classiquement cela correspondrait au degré de liberté de rotation sur lui même d'un corps solide). Une particule est caractérisée par sa masse, sa charge électrique,... et un nombre quantique de spin S, entier ou demi entier. Nous étudions la dynamique de l'état de spin en présence d'un champ magnétique pour une particule électriquement neutre de spin $S = 1/2$ (par exemple un neutron).

A. Espace de Hilbert et Hamiltonien.– L'espace des états quantiques est de dimension deux. On note $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ les états propres de $\hat{S}_z$ formant une base possible. Tout vecteur d'état de spin se décompose sous la forme $|\, \psi \,\rangle = c_\uparrow |\uparrow\rangle + c_\downarrow |\downarrow\rangle$.

1/ Pourquoi doit-on avoir $|c_\uparrow|^2 + |c_\downarrow|^2 = 1$?

2/ Dans les notations de Dirac, l'équation de Schrödinger prend la forme (7), où $\hat{H}$ est l'opérateur Hamiltonien (« l'énergie »). Justifier pourquoi l'hamiltonien $\hat{H}$ doit être hermitique, c'est-à-dire que $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.

Indication : considérer $\langle\, \psi(t) \,|\, \psi(t) \,\rangle$.

3/ Les composantes $c_\uparrow(t)$ et $c_\downarrow(t)$ de l'état de spin $|\,\psi(t)\,\rangle$ portent la dépendance temporelle. Rappeler la forme générale que prend l'équation de Schrödinger dans la base des états de spin, i.e. écrire les équations différentielles pour les deux composantes $c_\uparrow(t)$ et $c_\downarrow(t)$. On notera H la matrice 2×2 qui représente l'hamiltonien dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. De combien de paramètres *réels* indépendants dépend la matrice H ?

4/ En principe l'état quantique de la particule doit également caractériser son état orbital (i.e. la densité de probabilité dans l'espace physique). L'espace de Hilbert d'une particule est donc $\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\text{orbital}} \otimes \mathscr{H}_{\text{spin}}$. Une base possible est $\{|\,\vec{r}\,\rangle \otimes |\,\sigma\,\rangle\}$ où $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$. Justifier que l'équation de Schrödinger agit alors sur une fonction d'onde à deux composantes $\psi_\uparrow(\vec{r},t)$ et $\psi_\downarrow(\vec{r},t)$. Écrire explicitement le couple d'équations dans le cas où $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x}) - \gamma\,\mathcal{B}\,\hat{S}_z$.

B. Dynamique de l'état de spin.– On considère la situation où un champ magnétique uniforme pointe dans la direction $\vec{u}_z$. L'Hamiltonien magnétique est

$$\hat{H} = -\gamma\,\mathcal{B}\,\hat{S}_z \tag{8}$$

où $\hat{S}_z$ est la troisième composante de l'opérateur de spin. γ est le facteur gyromagnétique.

1/ Sachant que $\hat{S}_z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$ et $\hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$, écrire les matrices qui représentent $\hat{S}_z$ et $\hat{H}$ dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ On introduira la notation $\omega_{\mathcal{B}} = \gamma\,\mathcal{B}$.

2/ L'action de l'opérateur représentant la première composante de spin est $\hat{S}_x|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$ et $\hat{S}_x|\downarrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$. Donner la matrice qui représente $\hat{S}_x$.

3/ Quels sont les valeurs propres de $\hat{S}_x$, notées $\lambda_\pm$ et les vecteurs propres correspondants, notés $|\,\psi_+\,\rangle$ et $|\,\psi_-\,\rangle$?

4/ On suppose que l'état de spin est $|\,\psi_-\,\rangle$. Calculer $\langle\hat{H}\rangle_{\psi_-}$ et ΔH_{ψ_-} dans cet état.

5/ L'état quantique de spin est initialement $|\,\psi(t=0)\,\rangle = |\,\psi_-\,\rangle$. Quel est l'état $|\,\psi(t)\,\rangle$ à un instant t ultérieur ?

Suggestion : il sera utile pour la suite d'exprimer $|\,\psi(t)\,\rangle$ dans la base $\{|\,\psi_+\,\rangle, |\,\psi_-\,\rangle\}$.

6/ Si le spin est dans l'état $|\,\psi(t)\,\rangle$ trouvé ci-dessus, quelle est la probabilité $\mathscr{P}_-(t)$ lors d'une mesure de $\hat{S}_x$ de trouver comme résultat la valeur propre λ_- ? Et $\mathscr{P}_+(t)$, la probabilité pour obtenir λ_+ ?

7/ Déduire la moyenne de l'observable $\hat{S}_x$ au temps t, $\langle\hat{S}_x\rangle_{\psi(t)}$.

8/ Que vaut $\langle\hat{S}_z\rangle_{\psi(t)}$ (sans calcul) ?

9/ Précession de Larmor.– On rappelle que, dans la base $\{|\,\psi_+\,\rangle, |\,\psi_-\,\rangle\}$, la troisième composante du spin $\hat{S}_y$ est représentée par la matrice

$$S_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

Calculer $\langle\hat{S}_y\rangle_{\psi(t)}$. Analyser le mouvement du vecteur $\langle\hat{\vec{S}}\rangle_{\psi(t)}$.

3 L'Hamiltonien magnétique pour une particule de spin $1/2$

On s'intéresse à l'état de spin d'une particule de spin $1/2$. L'espace des états quantiques est de dimension deux. On note $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ les états propres de $\hat{S}_z$ formant une base possible. Tout vecteur d'état de spin se décompose sous la forme $|\,\psi(t)\,\rangle = c_\uparrow(t)|\uparrow\rangle + c_\downarrow(t)|\downarrow\rangle$.

1. Pourquoi doit-on avoir $|c_\uparrow(t)|^2 + |c_\downarrow(t)|^2 = 1$?
2. Rappeler la forme générale que prend l'équation de Schrödinger pour ce système à deux niveaux, i.e. écrire les équations différentielles pour les deux composantes $c_\uparrow$ et $c_\downarrow$. On notera H la matrice qui représente l'hamiltonien dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$.
3. Montrer que l'hamiltonien H doit être hermitique, c'est-à-dire que $H^\dagger = H$.

4 Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

Soient $|\,\varphi_1\,\rangle$ et $|\,\varphi_2\,\rangle$ deux vecteurs propres normalisés d'un Hamiltonien $\hat{H}$ associés aux valeurs propres E_1 et E_2. On pose $\hbar\omega = E_2 - E_1$.

1. Écrire la matrice de $\hat{H}$ dans la base $\{|\,\varphi_1\,\rangle, |\,\varphi_2\,\rangle\}$.
2. Soit l'état $|\,\psi_-\,\rangle \propto |\,\varphi_1\,\rangle - |\,\varphi_2\,\rangle$. Normaliser $|\,\psi_-\,\rangle$ puis calculer $\langle\hat{H}\rangle_{\psi_-}$ et ΔH_{ψ_-} dans cet état.
3. On prend comme condition initiale $|\,\psi(t=0)\,\rangle = |\,\psi_-\,\rangle$. Quel est l'état $|\,\psi(t)\,\rangle$ à un instant t ultérieur ?
4. Soit l'observable $\hat{A}$ telle que $\hat{A}|\,\varphi_1\,\rangle = |\,\varphi_2\,\rangle$ et $\hat{A}|\,\varphi_2\,\rangle = |\,\varphi_1\,\rangle$. Écrire la matrice associée à $\hat{A}$ dans la base $\{|\,\varphi_1\,\rangle, |\,\varphi_2\,\rangle\}$.
5. Quels sont les vecteurs propres et valeurs propres, notées $a_\pm$, de $\hat{A}$?
6. Pour l'état $|\,\psi(t)\,\rangle$ trouvé ci-dessus, quelle est la probabilité lors d'une mesure de $\hat{A}$ de trouver comme résultat la valeur propre a_- en fonction de t ?
7. Calculer la moyenne de l'observable $\hat{A}$ au temps t, $\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)}$.