Mécanique Quantique I, Corrigé du partiel du 2.12.2014

Exercice 1 : Une marche au fond du puits

1. $0 < E < V_0$

   (a) Dans la région 1, on a $E - V(x) = E - V_0 = cste < 0$ donc les fonctions propres cherchées sont de la forme $\psi^I(x) = A'e^{\gamma x} + B'e^{-\gamma x}$ avec

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} > 0 \tag{1}$$

   ou, de façon équivalente,

$$\psi^I(x) = A\sinh(\gamma x) + B\cosh(\gamma x). \tag{2}$$

   Dans la région 2, on a $E - V(x) = E = cste > 0$ donc les fonctions propres propres cherchées sont de la forme $\psi^{II}(x) = C'e^{ikx} + D'e^{-ikx}$ avec

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \tag{3}$$

   ou, de façon équivalente,

$$\psi^{II}(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx). \tag{4}$$

   On cherche donc les solutions de la forme

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A\sinh(\gamma x) + B\cosh(\gamma x) & \text{si } -L/2 < x \leq 0 \text{ (région 1)} \\ C\sin(kx) + D\cos(kx) & \text{si } 0 < x \leq L/2 \text{ (région 2)} \end{cases}. \tag{5}$$

   (b) Conditions aux bords : ψ s'annule en $x = \pm L/2$, ce qui implique

$$-A\sinh\left(\frac{\gamma L}{2}\right) + B\cosh\left(\frac{\gamma L}{2}\right) = 0 \tag{6}$$

$$C\sin\left(\frac{kL}{2}\right) + D\cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0, \tag{7}$$

   c'est-à-dire

$$B = A\tanh\left(\frac{\gamma L}{2}\right) \tag{8}$$

$$D = -C\tan\left(\frac{kL}{2}\right) \quad \text{ou bien} \quad \left[C = 0 \text{ et } \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \right]. \tag{9}$$

   Conditions de raccordement : la continuité de ψ et de sa dérivée impliquent

$$B = D \tag{10}$$

$$\gamma A = kC. \tag{11}$$

   Par les Eqs. (11), (8) et (10), respectivement, on voit que si C est nul, alors A, B et D le sont aussi. Par ces mêmes équations, on montre que si A est nul, alors B, C et D le sont aussi. En combinant les Eqs. (8) à (11) on trouve donc que les solutions non indentiquement nulles satisfont

$$A\tanh\left(\frac{\gamma L}{2}\right) = B = D = -C\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = -A\frac{\gamma}{k}\tan\left(\frac{kL}{2}\right) \quad [A \neq 0], \tag{12}$$

ce qui avec

$$\frac{kL}{2} = \sqrt{\frac{mEL^2}{2\hbar^2}} \equiv \rho \in]0, \alpha[\tag{13}$$

$$\frac{\gamma L}{2} = \sqrt{\frac{m(V_0 - E)L^2}{2\hbar^2}} = \sqrt{\alpha^2 - \rho^2} \tag{14}$$

s'écrit

$$f(\rho) = g_\alpha(\rho) \tag{15}$$

où

$$f(\rho) = \frac{\tan\rho}{\rho} \tag{16}$$

$$g_\alpha(\rho) = -\frac{\tanh\sqrt{\alpha^2 - \rho^2}}{\sqrt{\alpha^2 - \rho^2}}. \tag{17}$$

(c) Pour représenter g_α, on se sert des observations suivantes (cf rappel de l'énoncé) :

— $\tanh(y) \sim y$ $[y \to 0]$, d'où $\lim_{y\to 0} \frac{\tanh y}{y} = 1$ et donc

$$\lim_{\rho\to\alpha^-} g_\alpha(\rho) = -1; \tag{18}$$

— $y \mapsto -\tanh(y)/y$ est une fonction négative et croissante sur $\mathbb{R}^+$ [y croît plus rapidement que $\tanh(y)$], donc g_α est négative et décroissante sur $I_\alpha =]0, \alpha[$ puisque $\rho \mapsto \sqrt{\alpha^2 - \rho^2}$ est décroissante sur I_α.

On obtient donc les allures suivantes pour $\alpha = \frac{\pi}{4}$ et $\alpha = \pi$:

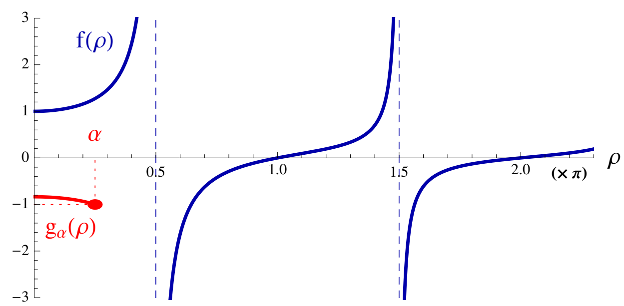

FIGURE 1 – Solution graphique de l'Eq. (15) pour $\alpha = \pi/4$: aucune intersection pour $\rho \in]0, \alpha[$.

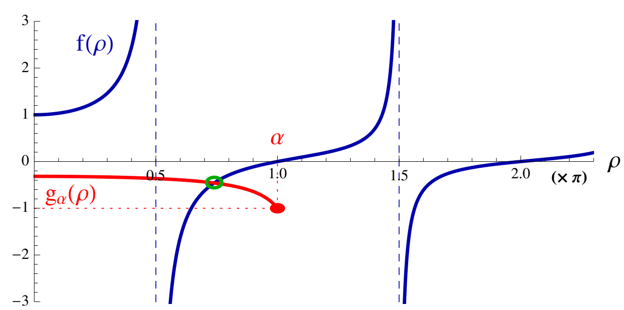

FIGURE 2 – Solution graphique pour $\alpha = \pi$: une unique intersection, marquée d'un cercle vert.

Pour $\alpha = \pi/4$, l'Eq. (15) n'admet aucune solution dans I_α, puisque f et g_α sont respectivement strictement positive et strictement négative sur cet intervalle. Pour $\alpha = \pi$, on n'a pas de solution sur $]0, \pi/2]$ (pour la même raison), et une unique intersection sur $]\pi/2, \alpha[$ (justification : sur cet intervalle $\Delta_\alpha = f - g_\alpha$ est continue et strictement croissante, avec $\lim_{\rho \to (\pi/2)^+} \Delta_\alpha(\rho) = -\infty$ et $\lim_{\rho \to \alpha^-} \Delta_\alpha(\rho) = 1 > 0$).

(d) Sur la base de l'étude graphique précédente, on voit que le nombre d'intersections (c'est-à-dire d'états propres tels que $0 < E < V_0$) croît par paliers avec la valeur de α et que ce nombre augmente précisément d'une unité lorsque α dépasse un u_i, où les u_i ($i = 1, 2, \ldots$, avec $u_1 < u_2 < \cdots$) sont les solutions strictement positives de l'équation $\tan(u)/u = -1$. Cette situation est illustrée ci-dessous pour le cas $\alpha = u_2$; on notera que l'intersection à $\rho = \alpha = u_2$ n'est pas comptabilisée car elle correspond à une énergie propre $E = V_0$, et la forme générale (2) doit être réexaminée dans ce cas (c'est pourquoi on cherche les solutions $0 < E < V_0$) ; mais dès que α dépasse u_2^+ d'une quantité infinitésimale, on a apparition d'une nouvelle solution $E < V_0$.

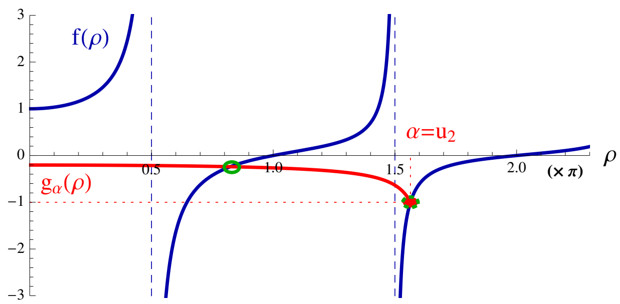

FIGURE 3 – Solution graphique pour $\alpha = u_2$: une intersection dans $]\pi/2, \pi[$, en vert, et une intersection sur le point d'émerger dans $]3\pi/3, 2\pi[$, en pointillé vert.

Pour $\alpha \le u_1$, on n'a aucun état propre d'énergie $E < V_0$ (situation illustrée par le cas particulier $\alpha = \pi/4 < u_1$). Pour $u_i < \alpha \le u_{i+1}$, on a i états propres, et les énergies $E_j^{(\alpha)}$ correspondantes ($j = 1, \ldots, i$) découlent des intersections $\rho_j^{(\alpha)}$ de l'étude graphique, que l'on peut localiser chacune dans un intervalle $]u_j, j\pi[\subset](j - \frac{1}{2})\pi, j\pi[$.

2. Pour $E > V_0$, la forme générale de la fonction d'onde dans la région 2 demeure inchangée, tandis que la forme générale dans le région 1 devient

$$\psi^I(x) = A \sin(k'x) + B \cos(k'x), \tag{19}$$

avec

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} > 0. \tag{20}$$

Les équations (8), (9), (10) et (11) deviennent

$$-A \sin\left(\frac{k'L}{2}\right) + B \cos\left(\frac{k'L}{2}\right) = 0 \tag{21}$$

$$C \sin\left(\frac{kL}{2}\right) + D \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \tag{22}$$

$$B = D \tag{23}$$

$$k'A = kC, \tag{24}$$

Supposons que $\cos(kL/2)$ et $\cos(k'L/2)$ sont tous les deux non nuls. Sous cette hypothèse, les solutions sont données par

$$A \tan\left(\frac{k'L}{2}\right) = B = D = -C \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = -A\frac{k'}{k} \tan\left(\frac{kL}{2}\right), \tag{25}$$

où $kL/2 = \rho$ et $k'L/2 = \sqrt{\rho^2 - \alpha^2}$; comme $A = 0$ impliquerait une solution identiquement nulle, ceci s'écrit $f(\rho) = h_\alpha(\rho)$, avec

$$h_\alpha(\rho) = -\frac{\tan\sqrt{\rho^2 - \alpha^2}}{\sqrt{\rho^2 - \alpha^2}}, \tag{26}$$

qui est la fonction cherchée.

Remarque (discussion non demandée) : si $\cos(kL/2) = 0$, alors $C = 0$ [Eq. (22)], $A = 0$ [Eq. (24)], et donc $B = D = 0$ (solution identiquement nulle, à rejeter) ou $\cos(k'L/2) = 0$ [Eq. (21)] ; réciproquement, si $\cos(k'L/2) = 0$ alors $\cos(kL/2) = 0$. Ainsi, soit $\cos(kL/2)$ et $\cos(k'L/2)$ sont tous les deux nuls, soit tous les deux non nuls. Le second cas de figure a été discuté plus haut. Le premier cas de figure ne se produit que pour des valeurs bien particulières de α (par exemple $4\pi\sqrt{2}$, $4\pi\sqrt{6}$,...) et un des états $E > V_0$, qui correspondent à l'existence d'entiers $n > n' > 0$ tels que $(\rho/2\pi)^2 = (2n+1)^2$ et $(\rho/2\pi)^2 - (\alpha/2\pi)^2 = (2n'+1)^2$. Ce sont des événements "accidentels" dans l'espace des paramètres, qui correspondent à des intersections d'ordonnée $\pm\infty$ (mal définie) dans l'étude graphique de l'équation $f(\rho) = h_\alpha(\rho)$. Cette discussion avancée n'était pas demandée.

Exercice 2 : Moment cinétique

1. Exprimant x, y et z en coordonnées sphériques, on trouve

$$\hat{L}_z\psi_x(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}[r\sin\theta\cos\phi f(r)] = i\hbar r\sin\theta\sin\phi f(r) = i\hbar\psi_y(x,y,z) \tag{27}$$

$$\hat{L}_z\psi_y(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}[r\sin\theta\sin\phi f(r)] = -i\hbar r\sin\theta\cos\phi f(r) = -i\hbar\psi_x(x,y,z) \tag{28}$$

$$\hat{L}_z\psi_z(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}[r\cos\theta f(r)] = 0, \tag{29}$$

ce qui en terme d'états s'écrit

$$\hat{L}_z|\psi_x\rangle = i\hbar|\psi_y\rangle \tag{30}$$

$$\hat{L}_z|\psi_y\rangle = -i\hbar|\psi_x\rangle \tag{31}$$

$$\hat{L}_z|\psi_z\rangle = 0. \tag{32}$$

On note en particulier que $|\psi_z\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{L}_z$ pour la valeur propre 0 et que le sous-espace engendré par $|\psi_x\rangle$ et $|\psi_y\rangle$ est stable sous l'action de $\hat{L}_z$.

2. Deux remarques sont de mise : d'une part la direction z ne joue aucun rôle particulier en coordonnées cartésiennes et, de même, $\hat{L}_z$ ne joue aucun rôle particulier dans la famille $\{\hat{L}_z, \hat{L}_y, \hat{L}_z\}$; d'autre part, l'action de $\hat{L}_z$ est orientée (il s'agit d'un moment cinétique) dans le sens où à un facteur $i\hbar$ près elle envoie $|\psi_x\rangle$ sur $|\psi_y\rangle$ et $|\psi_y\rangle$ sur $-|\psi_x\rangle$, avec un signe moins. On obtient donc l'action de $\hat{L}_x$ et $\hat{L}_y$ sur les états $|\psi_j\rangle$ $(j = x, y, z)$ par permutation cyclique $(x,y,z) \to (y,z,x) \to (z,y,x)$ des coordonnées dans les expressions (30) à (32), ce qui donne :

$$\begin{aligned} &\hat{L}_x|\psi_x\rangle = 0 && \hat{L}_y|\psi_x\rangle = -i\hbar|\psi_z\rangle \\ &\hat{L}_x|\psi_y\rangle = i\hbar|\psi_z\rangle && \hat{L}_y|\psi_y\rangle = 0 \\ &\hat{L}_x|\psi_z\rangle = -i\hbar|\psi_y\rangle && \hat{L}_y|\psi_z\rangle = i\hbar|\psi_x\rangle \end{aligned} \tag{33}$$

On en déduit l'action de $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ sur ces mêmes états :

$$\hat{L}^2|\psi_x\rangle = \hat{L}_y^2|\psi_x\rangle + \hat{L}_z^2|\psi_x\rangle = -i\hbar\hat{L}_y|\psi_z\rangle + i\hbar\hat{L}_z|\psi_y\rangle = 2\hbar^2|\psi_x\rangle, \tag{34}$$

et on montre par le même procédé que $|\psi_y\rangle$ et $|\psi_z\rangle$ sont des vecteurs propres de $\hat{L}^2$, de valeur propre associée $2\hbar^2$ [remarque non demandée : ceci correspond à un moment cinétique $l = 1$ en trois dimensions, caractérisé par la valeur propre $l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ de $\hat{L}^2$].

3. Considérons d'abord l'action sur $|\psi_z\rangle$:

$$\hat{U}(\alpha)|\psi_z\rangle = e^{-i\alpha\hat{L}_z/\hbar}|\psi_z\rangle = \left[\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\alpha\hat{L}_z}{\hbar}\right)^n\right]|\psi_z\rangle = |\psi_z\rangle, \tag{35}$$

puisque $\hat{L}_z|\psi_z\rangle = 0$. Pour calculer l'action de $\hat{U}(\alpha)$ sur $|\psi_x\rangle$, on remarque que les puissances paires (resp. impaires) de $\hat{L}_z$ envoient $|\psi_x\rangle$ sur $|\psi_x\rangle$ (resp. sur $|\psi_y\rangle$) à un facteur près :

$$\hat{L}_z^{2p}|\psi_x\rangle = (\hat{L}_z^2)^p|\psi_x\rangle = \hbar^{2p}|\psi_x\rangle \tag{36}$$

$$\hat{L}_z^{2p+1}|\psi_x\rangle = \hat{L}_z(\hat{L}_z^2)^p|\psi_x\rangle = i\hbar^{2p+1}|\psi_y\rangle, \tag{37}$$

ce qui nous amène à scinder la série de l'exponentielle en deux :

$$\begin{aligned}
\hat{U}(\alpha)|\psi_x\rangle &= \left[\sum_{p=0}^{\infty}\frac{1}{(2p)!}\left(\frac{-i\alpha\hat{L}_z}{\hbar}\right)^{2p} + \sum_{p=0}^{\infty}\frac{1}{(2p+1)!}\left(\frac{-i\alpha\hat{L}_z}{\hbar}\right)^{2p+1}\right]|\psi_x\rangle \\
&= \left[\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2p}}{(2p)!}\right]|\psi_x\rangle + \left[i\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2p+1}}{(2p+1)!}\right]|\psi_y\rangle \\
&= \left[\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p}{(2p)!}\alpha^{2p}\right]|\psi_x\rangle + \left[\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p}{(2p+1)!}\alpha^{2p+1}\right]|\psi_y\rangle \\
&= \cos\alpha|\psi_x\rangle + \sin\alpha|\psi_y\rangle,
\end{aligned} \tag{38}$$

où l'on a identifié les séries des cos et sin. Pour rappel, ces séries sont obtenues par exactement le même procédé comme parties réelle et imaginaire de

$$\cos\alpha + i\sin\alpha = e^{i\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!} = \sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p\alpha^{2p}}{(2p)!} + i\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p\alpha^{2p+1}}{(2p+1)!}. \tag{39}$$

L'action de $\hat{U}(\alpha)$ sur $|\psi_y\rangle$ se calcule de façon similaire, en observant que

$$\hat{L}_z^{2p}|\psi_y\rangle = \hbar^{2p}|\psi_y\rangle \tag{40}$$

$$\hat{L}_z^{2p+1}|\psi_y\rangle = \hbar^{2p}\hat{L}_z|\psi_y\rangle = -i\hbar^{2p+1}|\psi_x\rangle. \tag{41}$$

On aboutit finalement à

$$\hat{U}(\alpha)|\psi_y\rangle = \cos\alpha|\psi_y\rangle - \sin\alpha|\psi_x\rangle. \tag{42}$$

En résumé, on a donc

$$\hat{U}(\alpha)|\psi_j\rangle = \sum_k R_{j,k}|\psi_k\rangle \tag{43}$$

avec

$$R = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{44}$$

Remarque (non demandé) : on reconaît une matrice de rotation d'angle α autour de l'axe z dans $\mathbb{R}^3$ (en adéquation avec la notion que $\hat{L}_z$ est le générateur des rotations autour de l'axe z) et on constate que les états $|\psi_j\rangle$ se transforment comme les vecteurs unitaires $\boldsymbol{u}_j$ $(j = x, y, z)$ de $\mathbb{R}^3$.