

TD2 : Opérateurs associés à x , p_x et L_z et état non stationnaire d'une particule.

2.1 Opérateurs associés à xp_x et L_z

1. On cherche à définir un opérateur associé à la grandeur physique $x \cdot p_x$. On propose les opérateurs suivants :

$$\hat{A} = \hat{x}\hat{p}_x, \hat{B} = \hat{p}_x\hat{x}, \text{ et } \hat{C} = (\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})/2$$

où \hat{x} et \hat{p}_x sont les opérateurs associés aux grandeurs x et p_x . Lesquels sont hermitiens ? Conclure.

Solution

La définition d'hermitien est que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ou bien $\langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \hat{A} \Phi | \Psi \rangle$. Cherchons donc l'adjoint de chaque opérateur :

i) Pour \hat{A} :

$$\langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{x} \hat{p}_x \Psi \rangle \quad (2.2)$$

Comme x est hermitien car il est une observable,

$$\langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \hat{x} \Phi | \hat{p}_x \Psi \rangle \quad (2.3)$$

\hat{p}_x est aussi hermitien,

$$\langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \hat{p}_x \hat{x} \Phi | \Psi \rangle \quad (2.4)$$

Par ailleurs, si l'opérateur \hat{A} agit d'abord sur le bra, nous avons

$$\langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Phi | \Psi \rangle \quad (2.5)$$

et si nous comparons les equations 2.4 et 2.5, nous observons que

$$\hat{A}^\dagger = \hat{p}_x \hat{x} = \hat{B} \quad (2.6)$$

c'est-à-dire, $\hat{A}^\dagger \neq \hat{A}$ car \hat{x} et \hat{p}_x ne commutent pas (nous savons que $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$). \hat{A} n'est donc pas hermitien.

ii) De même on obtient $\hat{B}^\dagger = \hat{A} \neq \hat{B}$.

iii) Enfin, si nous calculons l'opérateur $\hat{C} = (\hat{A} + \hat{B})/2$:

$$\hat{C}^\dagger = (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger)/2 = (\hat{B} + \hat{A})/2 = \hat{C} \quad (2.7)$$

\hat{C} est donc un opérateur hermitien. C'est celui que nous devons utiliser pour mesurer la grandeur physique $x \cdot p_x$.

2. On considère une particule astreinte à se déplacer dans un plan (x, y) .

Rappeler les opérateurs associés à la position \vec{r} et à la quantité de mouvement \vec{p} .

Solution

Les opérateurs associés à la position \vec{r} et à la quantité de mouvement \vec{p} sont respectivement :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

et

$$\begin{pmatrix} -i\hbar\partial_x \\ -i\hbar\partial_y \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Le moment cinétique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ de la particule est normal au plan et on écrit sa

composante $L_z = xp_y - yp_x$ à laquelle on associe l'opérateur $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$. Vérifier que \hat{L}_z est hermitien.

Solution

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (2.10)$$

et donc $\hat{L}_z^\dagger = \hat{p}_y\hat{x} - \hat{p}_x\hat{y}$. Comme \hat{x} et \hat{p}_y commutent, nous avons alors que $\hat{L}_z^\dagger = \hat{L}_z$. \hat{L}_z est donc hermitien.

Exprimer \hat{L}_z à l'aide des coordonnées polaires (r, θ) . Déterminer les états propres de \hat{L}_z .

Solution

Utilisant les coordonnées polaires (r, θ) et le système de repère $(\vec{u}, \vec{u}_\theta)$ (fig. 1), l'opérateur position est

$$\begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Par ailleurs, l'opérateur quantité de mouvement est $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, et à partir de l'expression du gradient en coordonnées polaires, nous avons

$$\begin{pmatrix} -i\hbar\partial_r \\ -i\hbar\frac{1}{r}\partial_\theta \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

et finalement $\hat{L}_z = \hat{r}\hat{p}_\theta = -i\hbar\partial_\theta$.

Pour déterminer les états propres, nous écrivons l'équation aux valeurs propres

$$\hat{L}_z\phi = \lambda\phi \quad (2.13)$$

avec ϕ une fonction propre de \hat{L}_z . En substituant l'expression de l'opérateur, nous avons

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}\phi = \lambda\phi \quad (2.14)$$

et donc

$$\phi(\theta) = N \exp\left(i\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right) \quad (2.15)$$

Comme nécessairement $\phi(\theta + 2\pi) = \phi(\theta)$, cela donne une quantification des valeurs propres :

$$\phi(\theta + 2\pi) = N \exp\left(i\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right) \exp\left(i\frac{\lambda}{\hbar}2\pi\right) \quad (2.16)$$

Pour satisfaire $\phi(\theta + 2\pi) = \phi(\theta)$ nous devons donc avoir $\lambda = m\hbar$ avec $m \in \mathbb{Z}$.

Enfin, les états propres sont

$$\phi_m(\theta) = N \exp(im\theta) \quad (2.17)$$

2.2 État non stationnaire d'une particule confinée sur un segment

On considère une particule placée dans le puits infini unidimensionnel décrit dans la PC 1. On suppose qu'à un instant t donné, la particule est dans un état physique quelconque représenté par la fonction d'onde réelle $\Phi(x)$.

1. Quelles conditions doit vérifier la fonction d'onde $\Phi(x)$?

2.2. ÉTAT NON STATIONNAIRE D'UNE PARTICULE CONFINÉE SUR UN SEGMENT 15

Solution

La particule est à l'intérieur d'un puits de potentiel infini. La probabilité de retrouver la particule à l'extérieur du segment est alors nulle. Par continuité, $\Phi(x)$ doit aussi être nulle aux extrémités du segment (en 0 et en a) :

$$\Phi(0) = 0 \quad (2.18)$$

$$\Phi(a) = 0 \quad (2.19)$$

Remarque : la dérivée $\phi'(x)$ n'est pas continue en 0 et a du fait de la discontinuité *infinie* de potentiel.

Par ailleurs, la fonction d'onde $\Phi(x)$ doit vérifier que la probabilité de trouver la particule à l'intérieur du puits est égale à 1 :

$$\int_0^a \Phi^*(x)\Phi(x)dx = 1 \quad (2.20)$$

2. Déterminer la quantité de mouvement moyenne de la particule. Commenter le résultat obtenu.

Solution

La valeur moyenne de la quantité de mouvement est donnée par la quantité

$$\langle \Phi | p_x | \Phi \rangle = \int_0^a \Phi^*(x)(\hat{p}_x \Phi(x))dx \quad (2.21)$$

où $\hat{p}_x = -i\hbar \partial_x$ est l'opérateur associé à p_x . On a alors

$$\langle \Phi | p_x | \Phi \rangle = -i\hbar \int_0^a \Phi^*(x)(\partial_x \Phi(x))dx = -i\hbar \left[\frac{1}{2} \Phi^2(x) \right]_0^a \quad (2.22)$$

et en tenant compte du fait que la fonction d'onde s'annule aux extrémités du puits,

$$\langle \Phi | p_x | \Phi \rangle = -i\hbar \left[\frac{1}{2} \Phi^2(x) \right]_0^a = 0 \quad (2.23)$$

Nous obtenons numériquement que la moyenne de la quantité de mouvement est nulle. Ceci est normal car la particule est localisée. En effet, en mécanique classique on obtient le même résultat : une particule qui oscille a une vitesse moyenne nulle à cause des réflexions successives sur les parois.

3. On considère maintenant l'état décrit par $\Phi(x) = Nx(a - x)$

Calculer la position moyenne de la particule.

Solution

Nous devons calculer la position moyenne de la particule :

$$\bar{x} = \langle \Phi | x | \Phi \rangle = \int_0^a \Phi(x)(x\Phi(x))dx \quad (2.24)$$

Mais avant tout, il faut normer la fonction $\Phi(x) = Nx(a-x)$:

$$\int_0^a N^2 x^2 (a-x)^2 dx = 1 \quad (2.25)$$

Avec le changement de variable $u = x/a$,

$$N^2 a^5 \int_0^1 u^2 (u-1)^2 du = 1 \quad (2.26)$$

et l'énoncé nous donne le résultat de cette intégrale. Nous avons donc

$$N = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \quad (2.27)$$

et finalement la fonction d'onde est

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{30}{a}} \frac{x}{a} \left(1 - \frac{x}{a}\right) \quad (2.28)$$

En reprenant l'expression de la position moyenne :

$$\bar{x} = \langle \Phi | x | \Phi \rangle = \int_0^a \Phi(x)(x\Phi(x))dx \quad (2.29)$$

en substituant la fonction d'onde

$$\bar{x} = \frac{30}{a} \int_0^a \frac{x^3}{a^2} \left(1 - \frac{x}{a}\right)^2 dx \quad (2.30)$$

et à nouveau avec le changement de variable $u = x/a$,

$$\bar{x} = 30a \int_0^1 u^3 (1-u)^2 du \quad (2.31)$$

Finalement

$$\bar{x} = a/2 \quad (2.32)$$

On remarque que la courbe de la densité de probabilité de présence de la particule possède un axe de symétrie ($x = a/2$) (fig. 2). On pouvait en déduire immédiatement que la position moyenne de la particule est égale à $a/2$.

Calculer l'énergie moyenne de la particule.

Solution

L'énergie moyenne de la particule est donnée par

$$\overline{E} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \int_0^a \Phi(x) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} (\Phi(x)) \right) dx = \int_0^a \Phi(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Phi''(x) dx \quad (2.33)$$

$$\overline{E} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{30}{a^5} \int_0^a x(a-x)(-2) dx \quad (2.34)$$

et encore

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{60}{a^2} \int_0^1 u(1-u) du = 10 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (2.35)$$

4. On considère maintenant l'état décrit par $\Phi(x) = N \sin^3(\frac{\pi x}{a})$

Vérifier que la fonction d'onde peut s'écrire sous forme d'une combinaison linéaire de deux états propres du Hamiltonien que l'on précisera.

Solution

Les états propres du Hamiltonien sont (Cf. PC1)

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (2.36)$$

avec

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (2.37)$$

Il faut donc essayer d'exprimer la fonction d'onde $\Phi(x) = N \sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ comme une somme de sinus. A partir de la relation de linéarisation $\sin^3 u = 3/4 \sin u - 1/4 \sin(3u)$, on peut écrire la fonction d'onde sous la forme suivante :

$$\Phi(x) = N \sqrt{\frac{a}{2}} \left[\frac{3}{4} \phi_1(x) - \frac{1}{4} \phi_3(x) \right] \quad (2.38)$$

ou, en utilisant la notation de Dirac

$$|\Phi\rangle = N \sqrt{\frac{a}{2}} \left[\frac{3}{4} |\phi_1\rangle - \frac{1}{4} |\phi_3\rangle \right] \quad (2.39)$$

Cependant, comme d'habitude, nous devons déterminer la constante N à partir de la condition de normalisation $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$. En utilisant le fait que la base constituée par les vecteurs propres $|\phi_n\rangle$ est orthonormée on obtient :

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = N^2 \frac{a}{2} \left[\frac{9}{16} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle + \frac{1}{16} \langle \phi_3 | \phi_3 \rangle \right] \quad (2.40)$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = N^2 \frac{a}{2} \left[\frac{5}{8} \right] = 1 \quad (2.41)$$

et donc

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} [3|\phi_1\rangle - |\phi_3\rangle] \quad (2.42)$$

En déduire la position moyenne ainsi que l'énergie moyenne de la particule.

Solution

(i) Position moyenne :

La fig. 3 montre les courbes ϕ_1^2 et ϕ_3^2 . Elles sont symétriques par rapport à $x = a/2$. Nous en déduisons que la position moyenne calculée pour chacun de ses états est égale à $a/2$:

$$\langle \phi_1 | x | \phi_1 \rangle = a/2 \quad (2.43)$$

$$\langle \phi_3 | x | \phi_3 \rangle = a/2 \quad (2.44)$$

La position moyenne dans l'état $|\Phi\rangle$ sera aussi égale à $a/2$. Nous pouvons le calculer :

$$\langle \Phi | x | \Phi \rangle = \frac{1}{10} [9\langle \phi_1 | x | \phi_1 \rangle + \langle \phi_3 | x | \phi_3 \rangle - 6\langle \phi_1 | x | \phi_3 \rangle] \quad (2.45)$$

car $\langle \phi_1 | x | \phi_3 \rangle = \langle \phi_3 | x | \phi_1 \rangle$ puisque ϕ_i est réelle. Comme $\langle \phi_1 | x | \phi_3 \rangle = 0$, nous avons le résultat déjà avancé :

$$\langle \Phi | x | \Phi \rangle = a/2 \quad (2.46)$$

(ii) Énergie moyenne :

L'énergie moyenne dans l'état $|\Phi\rangle$ est

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \frac{1}{10} [9\langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle + \langle \phi_3 | H | \phi_3 \rangle] \quad (2.47)$$

Par ailleurs, l'énergie moyenne pour un état propre correspond à la valeur propre du Hamiltonien : $\langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle = E_1$, $\langle \phi_3 | H | \phi_3 \rangle = E_3$ ou de manière générale $\langle \phi_i | H | \phi_j \rangle = E_j \delta_{ij}$. Nous pouvons donc écrire

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \frac{1}{10} [9E_1 + E_3] \quad (2.48)$$

et finalement

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \frac{9}{5} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (2.49)$$

On donne :

$$\int_0^1 u^2 (1-u)^2 du = \frac{1}{30} \quad \int_0^1 u^3 (1-u)^2 du = \frac{1}{60} \quad \sin^3 u = \frac{3}{4} \sin(u) - \frac{1}{4} \sin(3u)$$

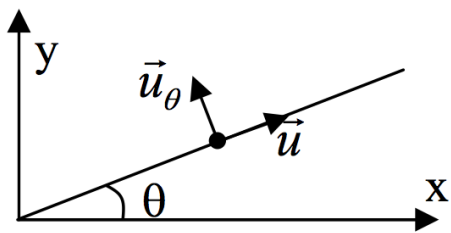


FIGURE 2.2 –

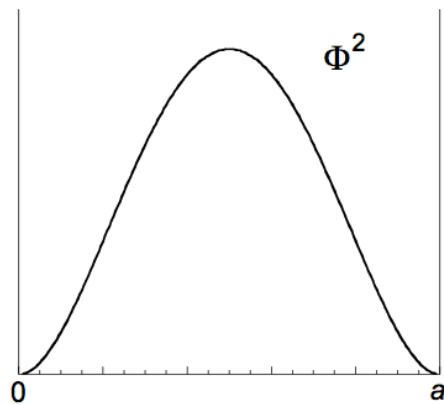


FIGURE 2.3 –

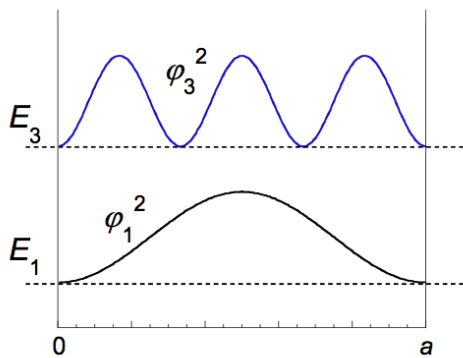


FIGURE 2.4 –