

**Exercice 1** *Opérateur renversement du temps*

1. Comme on a une onde plane, on peut écrire la fonction d'onde sous la forme :

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t) &= e^{(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}-i\omega t)/\hbar} \\ \psi^*(\mathbf{x}, t) &= e^{(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}+i\omega t)/\hbar} \\ \psi^*(\mathbf{x}, -t) &= e^{(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}-i\omega t)/\hbar}\end{aligned}$$

Donc,  $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$  est la fonction d'onde avec l'impulsion opposée.

2. Soit une fonction propre non dégénérée du Hamiltonien :  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ . Comme  $H$  et  $\theta$  commutent, on peut écrire :

$$H\theta|\psi\rangle = E\theta|\psi\rangle = E|\psi^*\rangle.$$

Donc  $|\psi^*\rangle$  est aussi fonction propre de  $H$  et d'énergie  $E$ . Or on a spécifié que  $|\psi\rangle$  était non dégénérée, donc on peut écrire :  $|\psi\rangle = e^{i\varphi}|\psi^*\rangle$ , avec  $\varphi$  une phase quelconque. Si l'on multiplie cette égalité par  $e^{-i\varphi/2}$  on obtient un vecteur réel :

$$|\alpha\rangle = e^{-i\varphi/2}|\psi\rangle = e^{i\varphi/2}|\psi^*\rangle = |\alpha^*\rangle.$$

3. Prenons une fonction d'onde quelconque que l'on décompose sur une base de vecteur impulsion :

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p}.$$

On applique l'opérateur de renversement du temps :

$$\theta|\psi\rangle = \theta \int \psi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{p})\theta|\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{p})|-\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} = \int \psi^*(-\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p}.$$

**Exercice 2** *Méthode variationnelle*

On considère le problème d'un puits de potentiel infini en dimension un défini par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < a \\ +\infty & \text{si } |x| \geq a \end{cases}$$

On se propose de chercher une valeur approchée de l'énergie du fondamental par la méthode variationnelle. A cet effet, on considère les fonctions

$$\psi_\lambda(x) = a^\lambda - |x|^\lambda, \quad \lambda > 1$$

1. Calculer  $\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle$ .

$$\begin{aligned} \langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle &= \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(x)|^2 dx = \int_{-a}^a (a^\lambda - |x|^\lambda)^2 dx = 2 \int_0^a (a^\lambda - x^\lambda)^2 dx \\ &= 2 \left( a^{2\lambda+1} - 2a^\lambda \frac{a^{\lambda+1}}{\lambda+1} + \frac{a^{2\lambda+1}}{2\lambda+1} \right) = 4a^{2\lambda+1} \frac{\lambda^2}{(\lambda+1)(2\lambda+1)} \end{aligned} \quad (1)$$

2. Déterminer la valeur de  $\lambda$  qui minimise l'énergie et la comparer avec l'énergie exacte du fondamental, en déduire l'erreur relative. Calculons d'abord

$$\begin{aligned} \langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \psi_\lambda^*(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_\lambda(x) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} 2 \int_0^a (a^\lambda - x^\lambda) \frac{d^2}{dx^2} (a^\lambda - x^\lambda) dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2 \int_0^a (a^\lambda - x^\lambda) \lambda(\lambda-1) x^{\lambda-2} dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2 \left( a^\lambda \lambda(\lambda-1) \frac{a^{\lambda-1}}{\lambda-1} - \lambda(\lambda-1) \frac{a^{2\lambda-1}}{2\lambda-1} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{m} a^{2\lambda-1} \frac{\lambda^2}{2\lambda-1} \end{aligned} \quad (2)$$

Avec (1) et (2), on peut calculer la valeur moyenne de l'énergie pour l'état  $|\psi_\lambda\rangle$  qui est donnée par

$$E_{\text{var}}(\lambda) = \frac{\langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{4a^2} \frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{2\lambda-1} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{4a^2} \frac{2\lambda^2+3\lambda+1}{2\lambda-1} \quad (3)$$

L'énergie minimale est donc atteinte pour la valeur de  $\lambda$  qui minimise  $\frac{2\lambda^2+3\lambda+1}{2\lambda-1}$ . Pour calculer ce  $\lambda$ , on pose

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{2\lambda^2+3\lambda+1}{2\lambda-1} = \frac{(4\lambda+3)(2\lambda-1) - 2(2\lambda^2+3\lambda+1)}{(2\lambda-1)^2} = \frac{(4\lambda^2-4\lambda-5)}{(2\lambda-1)^2}$$

En exigeant que le numérateur s'annule, on trouve les racines  $\lambda_{+,-} = \frac{1 \pm \sqrt{6}}{2}$ , et puisqu'on veut  $\lambda > 1$ , on garde la racine positive

$$\lambda_+ = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \approx 1.72$$

Comme la fonction  $\frac{2\lambda^2+3\lambda+1}{2\lambda-1}$  diverge pour  $\lambda \rightarrow \infty$ , alors que sa dérivée est négative pour  $\lambda \rightarrow 1$ , on peut constater qu'elle atteint son minimum au point  $\lambda_+$ . En injectant  $\lambda_+$  dans (3), on trouve

$$E_{\text{var}}(\lambda_+) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a^2} (5 + 2\sqrt{6})$$

La comparaison avec l'énergie exacte du fondamental

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{4a^2}$$

donne une erreur relative de

$$\frac{E_{\text{var}}(\lambda_+)}{E_0} = \frac{5 + 2\sqrt{6}}{\pi^2} \approx 1.00298$$

On voit donc que notre fonction variationnelle – pourtant toute simple – donne une énergie remarquablement proche de l'énergie exacte du fondamental. On s'attend donc à ce que  $|\psi_{\lambda+}\rangle$  décrive de manière précise la physique du fondamental.

### Exercice 3 Théorie des perturbations sur un système à 2 états

Dans un cas suffisamment simple pour pouvoir obtenir une résolution exacte, nous appliquons la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger et de Brillouin-Wigner et comparons les résultats approchés avec les résultats exacts. Dans cet exercice, nous supposons que  $\epsilon_1 < \epsilon_2$  et nous définissons  $\Delta \equiv \epsilon_2 - \epsilon_1$ .

1. Nous écrivons explicitement la matrice associée à l'hamiltonien  $H$ .

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & \epsilon_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

2. Comme l'opérateur  $V$  est réel et hermitien, il est donc symétrique

$$V^\dagger = V \Rightarrow V_{12} = V_{21}^* = V_{21} = V$$

3. Nous calculons de manière exacte le spectre de  $H$  ainsi que les états propres associés. L'équation caractéristique

$$\det(H - E\mathbf{1}) = (\epsilon_1 - E)(\epsilon_2 - E) - \lambda^2 V^2 = 0$$

conduit aux valeurs propres

$$E_\pm^e = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{2}\right)^2 + \lambda^2 V^2},$$

c'est-à-dire

$$E_\pm^e = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2}(\epsilon_2 - \epsilon_1) \sqrt{1 + \left(\frac{2\lambda V}{\Delta}\right)^2}, \quad (4)$$

puisque nous avons supposé  $\epsilon_1 < \epsilon_2$ . Par définition, les états propres  $|\Psi_\pm^e\rangle = \alpha_\pm|1\rangle + \beta_\pm|2\rangle$  vérifient

$$H|\Psi_\pm^e\rangle = E_\pm^e|\Psi_\pm^e\rangle, \quad (5)$$

ce qui conduit à l'équation

$$(\epsilon_1 - E_\pm^e) \alpha_\pm + \lambda V \beta_\pm = 0$$

Comme nous l'avons vu dans la série 2, le système (5) fournit une seconde équation mais le fait que  $E_\pm^e$  soit valeur propre de la matrice implique que cette équation est équivalente à la première. Dans la base  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ , on trouve donc

$$|\Psi_\pm^e\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_\pm}} \begin{pmatrix} \lambda V \\ E_\pm^e - \epsilon_1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

avec  $N_\pm \equiv (\lambda V)^2 + (E_\pm^e - \epsilon_1)^2$ . On peut contrôler que pour  $\lambda \rightarrow 0$ , on a  $E_\mp^e \rightarrow \epsilon_{1,2}$  et  $|\Psi_\mp^e\rangle \rightarrow |1\rangle, |2\rangle$ .

4. En utilisant le développement  $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2)$ , on déduit de l'équation (4) qu'au deuxième ordre

$$E_{\pm}^e = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2}(\epsilon_2 - \epsilon_1) \left[ 1 + 2 \left( \frac{\lambda V}{\Delta} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(\lambda^4). \quad (7)$$

Autrement dit

$$E_2^e \equiv E_+^e = \epsilon_2 + \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad \text{et} \quad E_1^e \equiv E_-^e = \epsilon_1 - \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} + \mathcal{O}(\lambda^4)$$

Or la théorie de Rayleigh-Schrödinger étudiée en cours conduit aux valeurs propres

$$E_1^{\text{rs}} = \epsilon_1 + \lambda \langle 1|V|1 \rangle + \frac{|\lambda \langle 2|V|1 \rangle|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \quad \text{et} \quad E_2^{\text{rs}} = \epsilon_2 + \lambda \langle 2|V|2 \rangle + \frac{|\lambda \langle 1|V|2 \rangle|^2}{\epsilon_2 - \epsilon_1}$$

La perturbation au premier ordre étant nulle, on obtient

$$E_1^{\text{rs}} = \epsilon_1 - \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta} \quad \text{et} \quad E_2^{\text{rs}} = \epsilon_2 + \frac{\lambda^2 V^2}{\Delta}$$

Ainsi, on voit que la théorie de Rayleigh-Schrödinger au deuxième ordre est ici équivalente à un développement de Taylor des valeurs propres exactes au même ordre.

5. Nous voulons maintenant trouver les vecteurs propres de l'hamiltonien perturbé. Au premier ordre, la théorie de Rayleigh-Schrödinger donne

$$|\Psi_1^{\text{rs}}\rangle = |1\rangle + \frac{1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \langle 2|\lambda V|1\rangle |2\rangle \quad \text{et} \quad |\Psi_2^{\text{rs}}\rangle = |2\rangle + \frac{1}{\epsilon_2 - \epsilon_1} \langle 1|\lambda V|2\rangle |1\rangle$$

c'est-à-dire

$$|\Psi_1^{\text{rs}}\rangle = |1\rangle - \frac{\lambda V}{\Delta} |2\rangle \quad \text{et} \quad |\Psi_2^{\text{rs}}\rangle = |2\rangle + \frac{\lambda V}{\Delta} |1\rangle$$

Ces vecteurs correspondent à un développement au premier ordre des vecteurs propres exacts donnés par l'équation (6).