Exercice 1 *Opérateur renversement du temps*

1. Soit une fonction d'onde de spin nul $\psi(\mathbf{x}, t)$, correspondant à une onde plane à trois dimensions. Montrer que $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ est la fonction d'onde avec l'impulsion opposée.
2. On considère un Hamiltonien invariant par renversement du temps. Prouver que toute fonction d'onde propre non dégénérée de spin nul peut être choisie réelle.
3. Soit $\psi(\mathbf{p})$, une fonction d'onde de spin nul dans l'espace des impulsions de l'état $|\psi\rangle$, c'est-à-dire $\langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{p})$. Est-ce que la fonction d'onde dans l'espace des impulsions ayant subi une inversion du temps est donnée par $\psi(\mathbf{p})$, $\psi^*(\mathbf{p})$, $\psi(-\mathbf{p})$ ou $\psi^*(-\mathbf{p})$? Justifier.

Exercice 2 *Méthode variationnelle*

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

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

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

$$\psi_\lambda(x) = \begin{cases} a^\lambda - |x|^\lambda & \text{si} \quad |x| < a \\ 0 & \text{si} \quad |x| \geq a \end{cases}$$

On rappelle que la condition $\lambda > 1$ est imposée du fait que la dérivée d'une fonction d'onde est de manière générale continue en tous points où le potentiel est continu (ou n'a qu'un saut fini).

1. Calculer $\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle$.
2. Déterminer la valeur de λ qui minimise l'énergie. Comparer avec l'énergie exacte du fondamental, et en déduire l'erreur relative.
   Rappel : L'énergie exacte du fondamental est donnée par $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{4a^2}$

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

Dans cet exercice, nous allons pouvoir juger, dans le cas exactement soluble ci-dessous, de l'efficacité de la méthode des perturbations. Mais c'est bien entendu dans le cas où l'on ne peut pas résoudre l'équation de Schrödinger exactement que cette méthode sera du plus grand secours. Dans ces situations, comme exemple lorsque l'on considère des systèmes de taille macroscopique telle que l'on ne peut pas diagonaliser directement l'hamiltonien, la méthode des perturbations peut fournir un hamiltonien effectif plus simple et qui donne néanmoins accès à la physique du système.

Supposons un hamiltonien de la forme:

$$H = H_0 + \lambda V$$

avec

$$H_0 = \epsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \epsilon_2 |2\rangle\langle 2| \quad \text{et} \quad V = V_{12}|1\rangle\langle 2| + V_{21}|2\rangle\langle 1|$$

où $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont les kets propres de H_0 associés respectivement aux valeurs propres ϵ_1 et ϵ_2. On suppose que $\Delta \equiv \epsilon_2 - \epsilon_1 > 0$ et que V_{12} et V_{21} sont réels.

1. Dans la base des kets propres non perturbés, écrire explicitement la matrice associée à l'hamiltonien H.

2. Pour des raisons d'hermiticité, trouver la relation entre les éléments de la matrice V, V_{12} et V_{21}.

3. Calculer exactement le spectre de l'hamiltonien ainsi que ses états propres.

4. En supposant que la perturbation $\lambda|V_{12}|$ est faible devant les échelles d'énergies du problème non perturbé, développer les énergies obtenues plus haut à l'ordre 2 en λ. Reconnaître l'expression de la théorie des perturbations type Rayleigh–Schrödinger.

5. En utilisant la théorie des perturbations au premier ordre, trouver les états propres et comparer avec le résultat exact.