



FIGURE 1 – Structure de la molécule  $\text{NH}_3$  : L'état quantique  $|\psi_1\rangle$  correspond à la situation représentée, lorsque l'atome N est à gauche du plan. L'état  $|\psi_2\rangle$  correspond au cas où l'atome N est à droite du plan (position symétrique indiquée en gris).

**Université de Bourgogne**

Licence 3 de physique

CT Mécanique quantique 2021-2022

**Problème I (10 pts)**

On considère une molécule d'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) constituée de 3 atomes d'hydrogène formant un triangle équilatéral dans un plan ; l'axe perpendiculaire au plan et passant au centre du triangle porte l'atome d'azote. La molécule peut se trouver dans deux états quantiques possibles, notés  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , correspondant aux deux positions symétriques de l'atome d'azote de part et d'autre du plan des atomes d'hydrogène. On supposera que  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$  forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert décrivant l'état quantique de la molécule. Les deux états ne sont pas des états stationnaires car l'atome d'azote peut passer d'un côté à l'autre par effet tunnel. Dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ , l'Hamiltonien  $H_0$  du système peut s'écrire sous la forme suivante :

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix}$$

où  $(E_0, \Delta) \in \mathbb{R}^2$  et  $\Delta > 0$ .

1. Quelle est la dimension physique du paramètre  $\Delta$ .

2. On note  $R$  l'opérateur décrivant la réflexion par rapport au plan des atomes H. Donner la matrice  $2 \times 2$  représentant cet opérateur dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ . Quelles sont les propriétés de cette matrice ?
3. Quels sont les états propres et les valeurs propres de  $R$  ?
4. Quelle doit être la valeur du commutateur  $[R, H_0]$  ?
5. Donner les vecteurs propres, notés  $|S\rangle$  et  $|A\rangle$ , et les valeurs propres associées, notées  $E_S$  et  $E_A$ , de  $H_0$  ( $|S\rangle$  désigne l'état de plus basse énergie). On justifiera l'utilisation des lettres  $S$  et  $A$ . Justifier également le signe de  $\Delta$ .
6. Quelle est l'action de  $R$  sur  $|S\rangle$  et  $|A\rangle$  ? Ce résultat était-il attendu ?
7. Initialement la molécule se trouve dans l'état  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_1\rangle$ . Exprimer  $|\psi(t)\rangle$  dans la base  $\{|S\rangle, |A\rangle\}$  puis dans la base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ .
8. Quelle est la probabilité  $P_1(t)$  pour que l'atome d'azote se trouve à gauche du plan à l'instant  $t$  ? Décrire la dynamique du système.
9. La longueur d'onde du rayonnement émis par un maser à ammoniac est  $\lambda = 1.25$  cm. Calculer la fréquence correspondante et en déduire  $\Delta$  en eV (on rappelle que  $h = 6.64 \times 10^{-34}$  J.s).
10. Rappeler en quelle année le Maser a-t-il été inventé.

### Problème II (10 pts)

On considère un système dont l'espace des états, qui est à trois dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les trois kets  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ . Dans la base de ces trois vecteurs, l'opérateur hamiltonien  $H$  du système et deux observables  $A$  et  $B$  s'écrivent :

$$H = e \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}; \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad B = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1. Indiquer les valeurs propres et les sous-espaces propres associés de ces 3 opérateurs.
2. Qu'appelle-t-on un spectre d'opérateur dégénéré ?
3. Mesure de  $A$  puis  $B$ . Le système se trouve dans l'état  $|\phi\rangle = |1\rangle$ . On effectue une mesure de  $A$  puis une mesure de  $B$ . Quels sont les résultats de mesures possibles et l'état du système après mesure ?
4. A  $t = 0$  on place le système dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle.$$

Montrer que cet état a bien une norme égale à 1.

5. On mesure l'énergie du système à  $t = 0$ . Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

6. Calculer, toujours à  $t = 0$  la valeur moyenne  $\langle H \rangle$  de l'énergie ainsi que l'écart quadratique moyen  $\Delta H$ .
7. On mesure  $A$  à  $t = 0$ . Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?
8. Le système se trouve initialement dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ . Son état quantique évolue au cours du temps. Calculer le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$ .
9. Reprendre la question 6 en se plaçant à un instant  $t$  quelconque.
10. Calculer  $\langle A \rangle(t)$ .