Université Moulay Ismaïl

F.S.T.E.

Département de physique

Année Universitaire 2014/2015

Parcours : MIP S4 (Section 2)

Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 1

I- Opérations sur les opérateurs linéaires

1/- Trace d'un opérateur: on définit la trace d'un opérateur linéaire A par

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} \langle U_i | A | U_i \rangle \text{ dans la base } (|U_i\rangle)$$

$$\mathrm{Tr}(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \alpha | A | \alpha \rangle d\alpha \text{ dans la base } (|\alpha\rangle)$$

Montrer que Tr(AB)=Tr(BA). En déduire que la trace est invariante par pérmutation circulaire: Tr(ABC)=Tr(CAB)=Tr(BCA).

2/- Opérateurs adjoints: montrer que si deux opérateurs A et B sont adjoints l'un de l'autre dans une représentation donnée $\{U_i\}$, alors ils le sont dans n'importe quelle autre représentation $\{W_i\}$

3/- Opérateurs Hermitiques - Observables: soit H un opérateur Hermitique et soient $|\varphi_k\rangle$ ses vecteurs propres normés correspondant à ses valeurs propres E_k toutes non dégénérées: $H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$, k=1,2....n=dimension de l'espace des états. Considérons l'opérateur $U(k,l) = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$, on demande de:

a)- calculer l'adjoint de U(k,l). Conclusion.

b)- établir la relation $U(k,l)U^+(k',l') = \delta_{ll'}U(k,k')$

c)- calculer le commutateur [H,U(k,l)].

4/- Fonctions d'opérateurs: par analogie avec les fonctions d'une variable réelle x, développables en séries entières: $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k x^k$, nous définissons une fonction F de l'opérateur linéaire A par le développement en séries entières: $F(A) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k A^k$.

Il est facile de vérifier que [A,F(A)]=0 quelque soient A et F(A).

- démontrer le théorème suivant: si B commute avec [A,B] alors quelque soit F(B) l'on a $[A,F(B)] = [A,B]\dfrac{\partial F(B)}{\partial B}$ (on montrera que $[A,B^k] = [A,B]kB^{k-1}$

- montrer que si $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ alors $F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle$

II- Les observables X et P:

1/- En calculant $\langle x|[X,P]|\psi\rangle$ et $\langle p|[X,P]|\psi\rangle$ montrer de deux façons différentes que l'on a $[X,P] = i\hbar\mathbb{1}$.

2/- En déduire que pour toute fonction V de l'observable X et pour toute fonction E_c de l'observable P, l'on a $[P, V(X)] = -i\hbar\frac{\partial V(X)}{\partial X}$ et $[X, E_c(P)] = i\hbar\frac{\partial E_c(P)}{\partial P}$.

Cas particuliers: $V(X) = \frac{1}{2}mw^2X^2$ et $E_c(P) = \frac{P^2}{2m}$

3/- Dans un problème à une dimension, on considère une particule dont l'Hamiltonien H s'écrit $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ tel que $H|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$. En considérant le commutateur [X,H], montrer que $\langle\varphi_k|P|\varphi_l\rangle = \alpha\langle\varphi_k|X|\varphi_l\rangle$ où α est un coefficient scalaire que l'on déterminera.

En déduire, en introduisant la relation de fermeture relative à la base $\{|\varphi_k\rangle\}$ l'égalité:

$$\sum_l (E_k - E_l)^2 |\langle\varphi_k|X|\varphi_l\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle\varphi_k|P^2|\varphi_k\rangle$$

I - Opérations sur les opérateurs:

Exercice n° 1 : Trace d'un opérateur

* Montrons que $tr(AB) = tr(BA)$

– Cas discret: $tr(A) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A|u_i\rangle$

$$\Rightarrow tr(AB) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|\underset{RF}{A \wedge B}|u_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A \mathbb{1}_n B|u_i\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|A\left(\sum_{j=1}^{n} |u_j\rangle\langle u_j|\right)B|u_i\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|B|u_i\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \langle u_j|B|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle = \sum_{j=1}^{n}\langle u_j|BA|u_j\rangle$$
$$= tr(BA)$$

– Cas continue: $tr(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle\alpha|A|\alpha\rangle d\alpha$

$$tr(AB) = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\alpha|AB|\alpha\rangle d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \langle\alpha|A\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|\beta\rangle\langle\beta|d\beta\right)B|\alpha\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta \left(\langle\alpha|A|\beta\rangle\langle\beta|B|\alpha\rangle\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta \, \langle\beta|B|\alpha\rangle\langle\alpha|A|\beta\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta \, \langle\beta|BA|\beta\rangle = tr(BA)$$

$$\Rightarrow \boxed{\forall \text{ la base} \quad Tr(AB) = Tr(BA)}$$

* Montrons que $Tr(ABC) = Tr(BCA) = tr(CAB)$

$$Tr(ABC) = tr[(AB)C] = tr[C(AB)] = tr[(CA)B] = tr(BCA)$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{La trace reste invariante par permutation circulaires de trois opérateurs}}$

Exercice n° 2 : Opérateurs adjoints :

Rappel A et A^+ sont dits adjoints l'un de l'autre si
$$\langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

Montrons que si A et B (A^+) sont adjoints l'un de l'autre dans la base $\{u_i\}$ ils le sont dans toute autre base $\{w_i\}$.

on a: $\langle u_i|B|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$ dans $\{u_i\}$

$$\langle w_i|\underset{RF}{\wedge B \wedge}|w_j\rangle = \langle w_i|\mathbb{1}_n B \mathbb{1}_n|w_j\rangle = \langle w_i|\left(\sum_k |u_k\rangle\langle u_k|\right)B\left(\sum_l |u_l\rangle\langle u_l|\right)|w_j\rangle$$
$$= \sum_{l,k}\langle w_i|u_k\rangle\underbrace{\langle u_k|B|u_l\rangle}_{=\langle u_l|A|u_k\rangle^*}\langle u_l|w_j\rangle = \sum_{l,k}\langle w_i|u_k\rangle\left(\langle u_l|A|u_k\rangle\right)^*\langle u_l|w_j\rangle$$

$$<w_i|B|w_j> = \sum_{l,k} (<u_k|w_i>)^* (<u_l|A|u_k>)^* (<w_j|u_l>)^*$$
$$= \sum_{l,k} \left[<u_k|w_i><u_l|A|u_k><w_j|u_l>\right]^*$$
$$= \sum_{l,k} \left[<w_j|u_l><u_l|A|u_k><u_k|w_i>\right]^*$$
$$= (<w_j|A|w_i>)^*$$

ainsi $\boxed{<w_i|B|w_j> = (<w_j|A|w_i>)^* \Leftrightarrow \text{B et A sont adjoints l'un de l'autre dans la base } \{w_i\}}$

<u>Exercice n° 3</u> : Opérateurs hermitiques - Observables.

H est hermitique $\Leftrightarrow H = H^+$

$|\varphi_k>$ $\vec{v}_p$ de H avec v_p $|\varphi_k> \Leftrightarrow H|\varphi_k> = E_k|\varphi_k>$ $k = 1, \dots n.$

on a : $U(k,l) = |\varphi_k><\varphi_l|$

a) l'adjoint de $U(k,l)$: $U^+(k,l) = (<\varphi_l|)^+ (|\varphi_k>)^+ = |\varphi_l><\varphi_k|$
$$= U(l,k) \neq U(k,l)$$

$\boxed{U(k,l) \text{ n'est donc pas hermitique.}}$

Si $k = l$ $U(k,l) = U(l,l) = U(k,k) = |\varphi_k><\varphi_k|$ c'est l'opérateur projecteur puisque les $|\varphi_k>$ sont normés $(<\varphi_k|\varphi_k> = 1)$; il est donc hermitique.

b) $U(k,l)\, U^+(k',l') \overset{?}{=} \delta_{ll'}\, U(k,k')$

$$U(k,l)\, U^+(k',l') = |\varphi_k><\varphi_l|\varphi_{l'}><\varphi_{k'}| = <\varphi_l|\varphi_{l'}>\, |\varphi_k><\varphi_{k'}|$$
$$= \delta_{ll'}\, U(k,k')$$ d'après la relation d'orthonormalisation dans $\{|\varphi_k>\}$.

c) <u>N.B</u> Comme H est hermitique et ses vecteurs propres forment une base orthonormée <u>Complète</u> c'est une <u>Observable</u>.

$$[H, U(k,l)] = H\,U(k,l) - U(k,l)\,H$$
$$= H|\varphi_k><\varphi_l| - |\varphi_k><\varphi_l|H$$
$$= E_k|\varphi_k><\varphi_l| - |\varphi_k><\varphi_l|E_l^*$$

or les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles $\Rightarrow E_l^* = E_l$

$$\Rightarrow [H, U(k,l)] = (E_k - E_l)\, |\varphi_k><\varphi_l|$$

$$\Leftrightarrow \boxed{[H, U(k,l)] = (E_k - E_l)\, U(k,l)}$$

Série n°4 (2)

Exercice n°4 fonctions d'opérateurs :

Soit A un opérateur linéaire et f une fonction associée telle que :

$$F(A) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k A^k$$

* Montrons que si B commute avec $[A,B]$ alors $\forall F(B)$ on a :

$$[A, F(B)] = [A,B] \frac{\partial F(B)}{\partial B}$$

pour cela montrons d'abord que : $[A,B^k] = [A,B] k B^{k-1}$

et cela par récurrence :

* pour $k=0$ $\quad [A, \mathbb{1}] = 0 = [A,B] \times 0 \times B^{-1}$

* pour $k=1$ $\quad [A,B] = [A,B]$

* pour $k=2$ $\quad [A,B^2] = AB^2 - B^2 A$

or $[A,BC] = B[A,C] + [A,B]C$

$\Rightarrow [A,B^2] = B[A,B] + [A,B]B$

mais comme B commute avec $[A,B]$ $\Big\} \Rightarrow [A,B^2] = [A,B]\, 2B$

* on suppose que la relation est vraie pour $(k-1)$

$$[A,B^{k-1}] = [A,B](k-1) B^{k-2}$$

* montrons qu'elle reste vraie à l'ordre k :

$$[A,B^k] = [A, B B^{k-1}] = B[A,B^{k-1}] + [A,B]B^{k-1}$$

$$= B[A,B](k-1)B^{k-2} + [A,B]B^{k-1}$$

B commute avec $[A,B]$ $\Rightarrow [A,B^k] = [A,B](k-1) B B^{k-2} + [A,B]B^{k-1}$

$$= [A,B](k) B^{k-1}$$

donc pour le théorème : on pose : $F(B) = \sum_k f_k B^k$

$$[A, F(B)] = [A, \sum_k f_k B^k] = A \sum_k f_k B^k - \sum_k f_k B^k A$$

$$= \sum_k f_k AB^k - \sum_k f_k B^k A = \sum_k f_k [A, B^k]$$

$$= \sum_k f_k [A,B] k B^{k-1} = \underbrace{[A,B]}_{\text{ne dépend pas de } k} \underbrace{\sum_k f_k k B^{k-1}}_{\frac{\partial F(B)}{\partial B}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\forall F(B) : \quad [A, F(B)] = [A,B] \frac{\partial F(B)}{\partial B}}$$

* Montrons que si $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ alors $F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle$

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$$

$$F(A)|\varphi\rangle = \sum_k f_k A^k|\varphi\rangle = \sum_k f_k A^{k-1}(A|\varphi\rangle) = \sum_k f_k a A^{k-1}|\varphi\rangle$$

$$= \dots = \sum_k f_k a^k|\varphi\rangle \Longrightarrow \boxed{F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle}$$

II. Les observables X et P

Exercice n° 1

* $\langle x|[X,P]|\psi\rangle = \langle x|XP|\psi\rangle - \langle x|PX|\psi\rangle$

$$= \langle x|X|P\psi\rangle - \langle x|P|X\psi\rangle = x\langle x|P\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|X\psi\rangle$$

$$= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\langle x|\psi\rangle$$

or $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

$$\Rightarrow \langle x|[X,P]|\psi\rangle = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}[x\psi(x)]$$

$$= \cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}} - \cancel{\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}} - \frac{\hbar}{i}\psi(x)\times 1$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\psi(x) = -\frac{\hbar}{i}\langle x|\psi\rangle = i\hbar\langle x|\psi\rangle$$

$$= \langle x|i\hbar\mathbb{1}_n|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{[X,P] = i\hbar\mathbb{1}_n}$$

* $\langle p|[X,P]|\psi\rangle = \langle p|XP|\psi\rangle - \langle p|PX|\psi\rangle$

$$= \langle p|X|P\psi\rangle - \langle p|P|X\psi\rangle =$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|P|\psi\rangle - p\langle p|X|\psi\rangle$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}[p\langle p|\psi\rangle] - p\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle$$

$$= i\hbar\langle p|\psi\rangle + \cancel{ip\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle} - \cancel{p\,i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle}$$

$$= \langle p|i\hbar\mathbb{1}_n|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{[X,P] = i\hbar\mathbb{1}_n}$$

Exercice n°2

d'après le théorème $[A, F(B)] = [A, B]\dfrac{\partial F(B)}{\partial B}$

où B commute avec $[A, B]$

on a : $[P, V(X)] = [P, X]\dfrac{\partial V(X)}{\partial X}$

avec X qui commute avec $[P, X]$ puisque :

$[X, [P, X]] = [X, -i\hbar \mathbb{1}] = -i\hbar [X, \mathbb{1}] = 0$

$\mathbb{1}$ commute avec $\forall A$.

$$\Rightarrow \boxed{[P, V(X)] = -i\hbar \dfrac{\partial V(X)}{\partial X}}$$

on a aussi $[P, [X, P]] = 0 \Rightarrow$ d'après le théorème

$$\boxed{[X, E_c(P)] = [X, P]\dfrac{\partial E_c(P)}{\partial P} = i\hbar \dfrac{\partial E_c(P)}{\partial P}}$$

pour les cas particuliers :

$E_c(P) = \dfrac{P^2}{2m}$ et $V(X) = \dfrac{1}{2} m\omega^2 X^2$

on a : $[P, V(X)] = -i\hbar m\omega^2 X$

$[X, E_c(P)] = i\hbar \dfrac{P}{m}$.

Exercice n°3

Soit $H = \dfrac{P^2}{2m} + V(X)$ tel que $H|\varphi_\ell\rangle = E_\ell |\varphi_\ell\rangle$

$$[X, H] = \underbrace{[X, V(X)]}_{0} + \left[X, \dfrac{P^2}{2m}\right] = i\hbar \dfrac{P}{m} = XH - HX$$

$$\Rightarrow \langle\varphi_k|[X, H]|\varphi_\ell\rangle = \dfrac{i\hbar}{m}\langle\varphi_k|P|\varphi_\ell\rangle$$

$$= \langle\varphi_k|XH|\varphi_\ell\rangle - \langle\varphi_k|HX|\varphi_\ell\rangle$$

$$= E_\ell\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle - E_k\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle$$

(Vp réelle pour H qui est hermitique)

$$= (E_\ell - E_k)\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\varphi_k|P|\varphi_\ell\rangle = \alpha\langle\varphi_k|X|\varphi_\ell\rangle \quad \text{avec } \alpha = \dfrac{m}{i\hbar}(E_\ell - E_k)}$$

b) Montrons que $\sum_l (E_k - E_l)^2 |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle$

$$\langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle = \langle \varphi_k | P \, \mathbb{1}_n \, P | \varphi_k \rangle = \sum_l \langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle \langle \varphi_l | P | \varphi_k \rangle$$

$$= \sum_l \langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle (\langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle)^*$$

$$= \sum_l |\langle \varphi_k | P | \varphi_l \rangle|^2 = \sum_l |\alpha|^2 |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2$$

avec $\alpha = \frac{m}{i\hbar}(E_l - E_k)$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_l (E_k - E_l)^2 |\langle \varphi_k | X | \varphi_l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \varphi_k | P^2 | \varphi_k \rangle}$$