Université My ISMAIL
F.S.T. d'Errachidia
Département de Physique

Parcours M.I.P. S4
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:

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

Serie 4

I) opérations sur les operateurs linéaires

1) trace d'un opérateur :

Données : $Tr(A) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i | A | u_i \rangle$ dans la base $\{|u_i\rangle\}$

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

Questions : Mq $Tr(AB) = Tr(BA)$?

Deduisons que $Tr(ABC) = Tr(BCA) = Tr(CAB)$?

RD

$$tr(AB) = \sum_{i=1}^{n} \langle u_i | AB | u_i \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \langle u_i | A \mathbb{1} B | u_i \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \langle u_i | A \sum_j |u_j\rangle\langle u_j | B | u_i \rangle$$

$$= \sum_i \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | B | u_i \rangle$$

$$= \sum_i \sum_j \langle u_j | B | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle$$

$$= \sum_j \langle u_j | B \underbrace{\sum_{i=1}^{n} |u_i\rangle\langle u_i|}_{\mathbb{1}} A | u_j \rangle$$

$$= \sum_j \langle u_j | B A | u_j \rangle$$

$$= tr(BA)$$

Dans la base continue on retrouve le même resultat en remplaçant Σ par $\int$ et $|u_i\rangle$ par $|\alpha\rangle$

Déduction

$$tr(ABC) = tr((AB)C) = tr(CAB)$$
$$= tr((CA)B) = tr(BCA)$$

2)- A et B sont deux opérateurs adjoints l'un de l'autre si $A^+ = B$

et $\langle u_i | B | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^*$ ⊛

dans une autre représentation $\{|w_i\rangle\}$ on a

$$\langle w_i | B | w_j \rangle = \langle w_i | \mathbb{1} \, B \, \mathbb{1} | w_j \rangle$$
$$= \langle w_i | \sum_k |u_k\rangle\langle u_k| \, B \sum_l |u_l\rangle\langle u_l| w_j \rangle$$
$$= \sum_{kl} \langle w_i | u_k \rangle \langle u_k | B | u_l \rangle \langle u_l | w_j \rangle$$
⊛
$$= \sum_{kl} \langle w_i | u_k \rangle \langle u_l | A | u_k \rangle^* \langle u_l | w_j \rangle$$
$$= \sum_{kl} \langle u_k | w_i \rangle^* \langle u_l | A | u_k \rangle^* \langle w_j | u_l \rangle^*$$
$$= \left[\sum_{kl} \langle u_k | w_i \rangle \langle u_l | A | u_k \rangle \langle w_j | u_l \rangle \right]^*$$
$$= \left[\sum_{kl} \langle w_j | u_l \rangle \langle u_l | A | u_k \rangle \langle u_k | w_i \rangle \right]^*$$
$$= \left[\langle w_j | \underbrace{\sum_l |u_l\rangle\langle u_l|}_{\mathbb{1}} \, A \underbrace{\sum_k |u_k\rangle\langle u_k|}_{\mathbb{1}} w_i \rangle \right]^*$$
$$= \langle w_j | A | w_i \rangle^*$$

d'où A et B sont adjoints l'un de l'autre dans la base $\{|w_i\rangle\}$.

3) opérateur hermitique - observable:

Données H opérateur Hermitique

E_K, $K=1,\dots,n$ les v.p non dégénérés de H

$|\varphi_K\rangle$, $K=1,\dots,n$ les v.p normés de H

$H|\varphi_K\rangle = E_K|\varphi_K\rangle$

$n = \dim E$: espace des états

Soit $U(K,\ell) = |\varphi_K\rangle\langle\varphi_\ell|$

a) Calculons l'adjoint de $U(K,\ell)$:

$$(U(K,\ell))^+ = (|\varphi_K\rangle\langle\varphi_\ell|)^+$$
$$= |\varphi_\ell\rangle\langle\varphi_K|$$
$$= U(\ell,K)$$

On a $U(K,\ell)^+ = U(\ell,K) \neq U(K,\ell)$

$\Rightarrow$ l'opérateur $U(K,\ell)$ n'est pas hermitique

Cas particulier: si $K=\ell$

$U(K,K) = |\varphi_K\rangle\langle\varphi_K| = P_\varphi$: c'est l'opérateur projecteur car $\langle\varphi_K|\varphi_K\rangle = 1$ ($|\varphi_K\rangle$: normés)

b) Montrons que: $U(K,\ell)\,U^+(K',\ell') = \delta_{\ell\ell'}\,U(K,K')$:

$$U(K,\ell)\,U^+(K',\ell') = |\varphi_K\rangle\langle\varphi_\ell|(|\varphi_{K'}\rangle\langle\varphi_{\ell'}|)^+$$
$$= |\varphi_K\rangle\underbrace{\langle\varphi_\ell|\varphi_{\ell'}\rangle}_{\delta_{\ell\ell'}}\langle\varphi_{K'}|$$
$$= \delta_{\ell\ell'}\,|\varphi_K\rangle\langle\varphi_{K'}|$$

$$\boxed{U(K,\ell)\,U^+(K',\ell') = \delta_{\ell\ell'}\,U(K,K')}$$

c) Calculons le commutateur : $[H ; \mathcal{U}(k,l)]$:

$$[H ; \mathcal{U}(k,l)] = H.\mathcal{U}(k,l) - \mathcal{U}(k,l).H$$
$$= H.|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|.H$$
$$= E_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|.H^+ \quad (\text{car } H^+ = H)$$
$$= E_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle (H|\varphi_l\rangle)^+$$
$$= E_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle (E_l |\varphi_l\rangle)^+$$
$$= E_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| E_l^*$$

puisque H est hermitique donc $E_l \in \mathbb{R}$ ie $E_l^* = E_l$

$$\Rightarrow \quad [H ; \mathcal{U}(k,l)] = (E_k - E_l) |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l|$$

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

4) Fonction d'opérateurs :

F : fonction d'opérateur linéaire A : $F(A) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k A^k$

Mq $[A ; F(B)] = [A ; B] \dfrac{\partial F(B)}{\partial B}$:

$$[A ; F(B)] = [A ; \sum f_k B^k]$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty} f_k \underbrace{[A ; B^k]}_{?}$$

a) Montrons par récurrence que : $[A ; B^k] = [A , B]\, k\, B^{k-1}$; $k \in \mathbb{N}^*$

- $k = 1$: $[A ; B^1] = [A ; B] = [A ; B] \times 1 \times B^0$ vrai
- On suppose que $[A ; B^k] = [A , B]\, k\, B^{k-1}$ et

on mq : $[A , B^{k+1}] = [A , B] (k+1) B^k$?

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

Or $[A , B^k] = AB^k - B^k A = [A , B]\, k\, B^{k-1} \Longrightarrow$

$$B^K A = A B^K - (A,B)\, K\, B^{K-1}$$

$$\Rightarrow [A; B^{K+1}] = A \cdot B \cdot B^K - B\left(A \cdot B^K - [A,B] K \cdot B^{K-1}\right)$$

$$= A \cdot B\, B^K - B A \cdot B^K + B [A,B] K B^{K-1}$$

$$= (AB - BA) B^K + [A,B] B K B^{K-1}$$

(car B commute avec $[A,B]$)

$$= [A,B]\, B^K + [A,B] K B^K$$

$$= [A,B] (K+1) B^K$$

<u>Conclusion</u>

$$\forall K \geq 1 \quad [A; B^K] = [A,B] \cdot K\, B^{K-1}$$

Revenons au commutateur $[A; F(B)]$:

$$[A, F(B)] = \sum_K f_K\, [A,B] \cdot K\, B^{K-1}$$

$$= [A,B] \sum_{K=0}^{\infty} f_K\, K\, B^{K-1}$$

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

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

$$F(A)|\varphi\rangle = \sum_{K=0}^{\infty} f_K A^K |\varphi\rangle$$

$$= \sum_K f_K\, A^{K-1} A |\varphi\rangle$$

$$= \sum_K f_K\, A^{K-1} a |\varphi\rangle$$

$$= a \sum_K f_K\, A^{K-2} A |\varphi\rangle$$

$$= a \sum_K f_K\, A^{K-2} a |\varphi\rangle$$

$$= a^2 \sum f_K\, A^{K-2} |\varphi\rangle$$

$$= \dots = \sum_K a^K f_K\, |\varphi\rangle$$

$$\boxed{F(A)|\varphi\rangle = F(a)|\varphi\rangle}$$

II) Les observables X et P

1) Mq $[X;P] = i\hbar \mathbb{1}$?

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

$$= \langle x|XP|\psi\rangle - \langle x|PX|\psi\rangle$$

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

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

(Ceci car $X|\psi\rangle = x|\psi\rangle$, prenons $\psi = x$

$\Rightarrow X|x\rangle = x|x\rangle$ introduisant l'adjoint :

$\Rightarrow (X|x\rangle)^{+} = (x|x\rangle)^{+} \Rightarrow \langle x|X = x\langle x|$ car $X^{+} = X$)

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

(Ceci car $\langle x|P|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle$)

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

$$= \cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle} - \frac{\hbar}{i}\left(\langle x|\psi\rangle + \cancel{x\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle}\right)$$

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

$$\Rightarrow \boxed{[X;P] = -\frac{\hbar}{i}\mathbb{1} = i\hbar\mathbb{1}}$$

b)- $\langle P|[X;P]|\psi\rangle = \langle P|XP|\psi\rangle - \langle P|PX|\psi\rangle$

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

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

(Ceci car $\langle p|X|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle$ et $P|p\rangle = p|p\rangle$)

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

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

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

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

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

2) $V = V(X)$ et $E_c = E_c(P)$ deux fct d'opérateurs

Mq $[P; V(X)] = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial X}$ et

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

d'aprés I) 4) on a

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

avec B commute avec $[A;B]$.

* Est-ce-que X commute avec $[P;X]$?

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

appliquons le Thm

$*\ [P ; V(X)] = [P ; X] \cdot \frac{\partial V(X)}{\partial X}$

$= -i\hbar \frac{\partial V(X)}{\partial X}$

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

applicons Thm

$$[X ; E_c(P)] = [X ; P] \cdot \frac{\partial E_c}{\partial P}$$

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

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

$$[P ; V(X)] = -i\hbar \frac{1}{\cancel{2}} m w^2 \cancel{2} X = -i\hbar m w^2 X$$

$$[X ; E_c(P)] = i\hbar \frac{\cancel{2} P}{\cancel{2} m} = i\hbar \frac{P}{m}$$

3) $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$, $H | \varphi_K \rangle = E_K | \varphi_K \rangle$

$$[X ; H] = [X ; \frac{P^2}{2m} + V(X)] = [X ; V(X)] + [X ; \frac{P^2}{2m}]$$

$$= \underbrace{[X ; X]}_{0} \cdot \frac{\partial V(X)}{\partial X} + [X ; P] \frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{P^2}{2m} \right)$$

$$= 0 + [X, P] \frac{P}{m}$$

$$\boxed{[X ; H] = i\hbar \frac{P}{m}}$$

$$\langle \varphi_k | [X; H] | \varphi_\ell \rangle = \langle \varphi_k | \frac{i\hbar}{m} P | \varphi_\ell \rangle$$

$$= \boxed{\frac{i\hbar}{m} \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle} \quad (1)$$

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

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

$(X^+ = X \Rightarrow E_k \in \mathbb{R})$

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

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

$$= \boxed{(E_\ell - E_k) \langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle} \quad (2)$$

d'aprés (1) et (2) : $\frac{i\hbar}{m} \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle = (E_\ell - E_k) \langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle = \frac{m(E_\ell - E_k)}{i\hbar} \langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle}$$

d'où la relation avec $\alpha = \frac{m(E_\ell - E_k)}{i\hbar}$

Déduction

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

$$= \langle \varphi_k | P \sum_\ell | \varphi_\ell \rangle \langle \varphi_\ell | P | \varphi_k \rangle$$

$$= \sum_\ell \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle \langle \varphi_\ell | P | \varphi_k \rangle$$

$$= \sum_\ell \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle \langle \varphi_\ell | P^+ | \varphi_k \rangle$$

$$= \sum_\ell \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle . \langle \varphi_k | P | \varphi_\ell \rangle^+$$

$$= \sum_\ell \alpha \langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle . \alpha^* \langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle^*$$

$$= \sum_\ell |\alpha|^2 \, |\langle \varphi_k | X | \varphi_\ell \rangle|^2$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_k | p^2 | \varphi_k \rangle = \sum_l |\alpha|^2 \, |\langle \varphi_k | x | \varphi_l \rangle|^2$$

$$\Rightarrow \sum_l |\langle \varphi_k | x | \varphi_l \rangle|^2 = \frac{1}{|\alpha|^2} \langle \varphi_k | p^2 | \varphi_k \rangle$$

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

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