

Mécanique quantique – SMC (2014 – 2015)

Série N° 4

Exercice N°1 : Base orthonormée de dimension 3

Soit $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ et $|e_3\rangle$ une base orthonormée d'un espace vectoriel E de dimension 3 dont le corps des scalaires est celui des nombres complexes. On considère deux scalaires α et β et deux vecteurs $|\psi\rangle = \alpha(i|e_1\rangle + |e_2\rangle - |e_3\rangle)$ et $|\phi\rangle = \beta(|e_2\rangle + |e_3\rangle)$.

1. Montrer que le produit scalaire $\langle\psi|\phi\rangle=0$ quels que soient α et β .
2. Déterminer α et β tels que $\langle\psi|\psi\rangle=\langle\phi|\phi\rangle=1$.
3. Trouver un vecteur $|\chi\rangle$ de manière à ce que la famille $\{|\chi\rangle, |\psi\rangle$ et $|\phi\rangle\}$ soit une base orthonormée de E .

Solution de l'exercice N°1 : Base orthonormée de dimension 3

1. Dans la base $\mathcal{B} = \{|e_1\rangle; |e_2\rangle; |e_3\rangle\}$ on nous dit que $|\Psi\rangle = \alpha \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ et que $|\Phi\rangle = \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ainsi $\langle\Psi| = \alpha^* (-i \ 1 \ -1)$ et donc $\langle\Psi|\Phi\rangle = \alpha^*\beta (-i \ 1 \ -1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$. Les deux kets $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ sont bien orthogonaux.

2. La norme de $|\Psi\rangle$ se calcule directement : $\langle\Psi|\Psi\rangle = \alpha^*\alpha (-i \ 1 \ -1) \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 3\alpha^*\alpha$. Si l'on veut que $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, il suffit de choisir $\alpha = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{3}}$ avec $\varphi \in \mathbb{R}$. De la même manière, $\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$ conduit à $\beta = \frac{e^{i\varphi'}}{\sqrt{2}}$ avec $\varphi' \in \mathbb{R}$.

3. Plaçons-nous dans $\mathcal{B}$ et écrivons $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$, et n'oublions pas que ces 3 composantes sont complexes. Pour que $\mathcal{B}' = \{|\Psi\rangle; |\Phi\rangle; |\chi\rangle\}$ soit une base orthonormée, et compte-tenu de ce que nous savons déjà sur $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ il suffit que :

$$(a) \text{ Les kets } |\Psi\rangle \text{ et } |\chi\rangle \text{ soient orthogonaux, i.e. } \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} (-i \ 1 \ -1) \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} (-ia + b - c) = 0,$$

la phase $e^{-i\varphi}$ étant non nulle on a donc $-ia + b - c = 0$;

(b) Les kets $|\Phi\rangle$ et $|\chi\rangle$ soient orthogonaux, qui s'écrit donc $b + c = 0$;

(c) Le ket $|\chi\rangle$ soit normé à l'unité ce qui s'écrit $aa^* + bb^* + cc^* = 1$.

En regroupant ces trois équations on obtient tout d'abord $b = -c$ que l'on injecte dans la première pour avoir devient $a = 2ic$. Il ne reste plus qu'à écrire la conditions sur la norme pour obtenir

$$6cc^* = 1 \text{ soit } c = \frac{e^{i\varphi''}}{\sqrt{6}} \text{ avec } \varphi'' \in \mathbb{R} \text{ et finalement } |\chi\rangle = \frac{e^{i\varphi''}}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2i \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \text{ On remarque que les trois}$$

vecteurs sont définis à une phase près.

Exercice N°2 : Commutateurs

1- A, B et C sont des opérateurs, démontrez les relations

$$[A, A] = 0$$

$$[A, B] = -[B, A]$$

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

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

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

$$[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]$$

et

$$[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0.$$

2- Si A et B sont des opérateurs qui commutent avec leur commutateur, démontrez les relations

$$[A, B_n] = nB^{n-1}[A, B]$$

et

$$[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B].$$

3- Application

Soit une particule de masse m dont la fonction d'onde est régie par le hamiltonien à une dimension :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

1. Montrer que $[X, P] = i\hbar$

2. Montrer que $[X^n, P] = ni\hbar X^{n-1}$

3. Montrer que $[V(X), P] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial X}(X)$

4. Montrer que $[X, P^2] = 2i\hbar P$

5. Dédurre de ce qui précède les expressions de $[H, P]$, $[H, X]$ et $[H, XP]$ en fonction de X, P et V (X).

Exercice N°3

1. Utilisons la notation suivante des opérateurs qui, selon la convention définie précédemment, seront toujours représentés par des lettres majuscules en italique.

Soit le rayon vecteur : $\mathbf{r} = (x, y, z)$; notons X, Y, Z les opérateurs qui appliqués à une fonction f la multiplie par une variable, soit : $Xf = xf, Yf = yf, Zf = zf$. L'opérateur noté $\mathbf{R}$ est le vecteur ayant pour composantes les opérateurs X, Y, Z . Notons le vecteur $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla = (P_x, P_y, P_z)$.

Calculer le commutateur $[X, P_x^2]$. En déduire l'expression du commutateur $[\mathbf{R}, \mathbf{P}^2]$.

2. Montrer que le commutateur d'une somme d'opérateurs est égal à la somme des commutateurs, soit :

$$[\sum_i A_i, \sum_k B_k] = \sum_{i,k} [A_i, B_k] \quad (1)$$

Solution de l'exercice N°3

1. L'opérateur P_x^2 a pour expression :

$$P_x^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (2)$$

Faisons agir l'opérateur $[X, P_x^2] = (XP_x^2 - P_x^2X)$ sur une fonction $f(x, y, z)$. Le calcul des dérivées donne :

$$[X, P_x^2] = 2\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} = 2i\hbar P_x \quad (3)$$

Les autres composantes $[Y, P_y^2]$, $[Z, P_z^2]$ du commutateur $[\mathbf{R}, \mathbf{P}^2]$ ont des expressions analogues, d'où :

$$[\mathbf{R}, \mathbf{P}^2] = 2i\hbar \mathbf{P} \quad (4)$$

2. Le développement du commutateur nous donne :

$$\begin{aligned} \left[\sum_i A_i, \sum_k B_k \right] &= \sum_i A_i \sum_k B_k - \sum_k B_k \sum_i A_i \\ &= \sum_{i,k} A_i B_k - \sum_{k,i} B_k A_i = \sum_{i,k} (A_i B_k - B_k A_i) = \sum_{i,k} [A_i, B_k] \end{aligned} \quad (5)$$

Exercice N°4 : Opérateurs hermitiens

Sur l'espace vectoriel des fonctions de carré intégrable, à valeurs complexes $f(x)$ de la variable réelle x , on définit un produit scalaire :

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx$$

1. Calculer l'opérateur adjoint de l'opérateur X défini par : $Xf = xf$. Cet opérateur est-il hermitien ?
2. Calculer l'opérateur adjoint de d/dx . L'opérateur d/dx est-il hermitien ?
3. Montrer que l'opérateur laplacien est hermitien.

Solution de l'exercice N°4 : Opérateurs hermitiens

1. Pour l'opérateur $A = X$, la définition (2.1.16) s'écrit : $\langle Xf, g \rangle = \langle f, X^\dagger g \rangle$. Le produit scalaire $\langle Xf, g \rangle$ donne :

$$\langle Xf, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (xf(x))^* g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) x g(x) dx = \langle f, Xg \rangle \quad (2)$$

d'où : $\langle f, X^\dagger g \rangle = \langle f, Xg \rangle$. L'opérateur adjoint $X^\dagger$ de X est donc égal à X , soit : $X^\dagger = X$. L'opérateur x est donc hermitien. Il en sera de même pour tout opérateur multiplication par une fonction $V(x)$ à valeurs réelles.

2. On a le produit scalaire suivant qu'on intègre par parties :

$$\left\langle \frac{d}{dx} f, g \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) dx = [f^*(x) g(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{d}{dx} g(x) dx \quad (3)$$

Les fonctions $f(x)$ et $g(x)$ étant de carré intégrable, deviennent nulles à l'infini et le terme intégré disparaît, d'où :

$$\left\langle \frac{d}{dx} f, g \right\rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{d}{dx} g(x) dx = \left\langle f, -\frac{d}{dx} g(x) \right\rangle \quad (4)$$

Puisque $\left\langle \frac{d}{dx} f, g \right\rangle = \left\langle f, \left(\frac{d}{dx} \right)^\dagger g \right\rangle$, l'opérateur adjoint de d/dx est :

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^\dagger = -\frac{d}{dx} \quad (5)$$

Selon (2.1.22), on a $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$, d'où :

$$\left(i \frac{d}{dx} \right)^\dagger = i^* \left(\frac{d}{dx} \right)^\dagger = i \frac{d}{dx} \quad (6)$$

L'opérateur id/dx est donc un opérateur hermitien.

L'opérateur id/dx est donc un opérateur hermitien.

3. Le produit de deux opérateurs hermitiens qui commutent est un opérateur hermitien puisqu'on a : $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB$. Le produit d'un opérateur hermitien par lui-même est donc hermitien et, par suite, l'opérateur $(i\partial/\partial x)^2 = -\partial^2/\partial x^2$ est hermitien, de même que $\partial^2/\partial x^2$. Il en est de même pour $\partial^2/\partial y^2$ et $\partial^2/\partial z^2$. En conséquence l'opérateur laplacien Δ est hermitien.

Exercice N°5

Soit un opérateur linéaire A ayant un vecteur propre $|\phi\rangle$ avec la valeur propre a .

Soit un deuxième opérateur linéaire B tel que $[A, B] = B + 2BA^2$.

Montrer que $(B|\phi\rangle)$ est vecteur propre de A avec la valeur propre qu'on déterminera.

Solution de l'exercice N°5

$$\begin{aligned} [A, B]|\phi\rangle &= (B + 2BA^2)|\phi\rangle \\ AB|\phi\rangle - BA|\phi\rangle &= B|\phi\rangle + 2BA^2|\phi\rangle \\ A(B|\phi\rangle) - Ba|\phi\rangle &= B|\phi\rangle + 2BA^2|\phi\rangle \quad A|\phi\rangle = a|\phi\rangle \\ A(B|\phi\rangle) - a(B|\phi\rangle) &= B|\phi\rangle + 2a^2(B|\phi\rangle) \\ A(B|\phi\rangle) &= (a + 1 + 2a^2)(B|\phi\rangle) \end{aligned}$$

$B|\phi\rangle$ est bien vecteur propre de A avec la valeur propre $(1 + a + 2a^2)$

Exercice N°7

1- Calculer l'adjoint de l'opérateur correspondant à la matrice :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 1 & 0 & i \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

2- Un opérateur A est dit hermitien (ou auto-adjoint) lorsqu'il vérifie $A = A^+$. Lesquelles des matrices suivantes correspondent à des opérateurs hermitiens ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 1 & 0 & 2 \\ 3 & 2 & i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix}$$

Montrer que le produit de deux opérateurs hermitiens n'est hermitien que si ces deux opérateurs commutent. Donner des exemples.

Exercice de l'exercice N°8 : Commutation d'opérateurs

On considère un système physique représenté par un vecteur dans un espace des états à 3 dimensions.

Dans la base $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$, et $|e_3\rangle$ de cet espace on définit les deux opérateurs H et B sont représentés par les matrices :

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

où ω et b sont des constantes réelles.

1. H et B sont-ils hermitiques ?
2. Montrer que H et B commutent. Donner une base de vecteurs propres communs à H et B.
3. Parmi les ensembles d'opérateurs : $\{H\}$, $\{B\}$, $\{H, B\}$ et $\{H^2, B\}$ lesquels forment un E.C.O.C. (Ensemble Complet des Observables qui Commutent).

Solution de l'exercice N°8: Commutation d'opérateurs

1. Les matrices étant réelles, elles sont donc évidemment hermitiennes.
2. Un simple calcul permet de vérifier que

$$\hat{H} \hat{B} = \hbar b \omega \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \hbar b \omega \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \hat{B} \hat{H}$$

puisque $[\hat{H}, \hat{B}] = 0$ on peut diagonaliser $\hat{H}$ et $\hat{B}$ dans une même base. Les éléments propres de $\hat{B}$ sont les suivants : la valeur propre double $\lambda = b$ est associée aux deux vecteurs propres $|b, 1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $|b, 2\rangle = \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ et la valeur propre $\lambda = -b$ est associée au vecteur propre $|-1\rangle = \gamma \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Les kets de la base propres orthonormée qui diagonalise $\hat{B}$ sont donc $|b, 1\rangle = |e_1\rangle$, $|b, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle + |e_3\rangle)$ et $|-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle - |e_3\rangle)$. Notons φ l'application linéaire dont la matrice est $\hat{H}$ dans $\mathcal{B}$. On peut donc écrire que $\varphi(|e_1\rangle) = \hbar\omega |e_1\rangle$, $\varphi(|e_2\rangle) = -\hbar\omega |e_2\rangle$ et $\varphi(|e_3\rangle) = -\hbar\omega |e_3\rangle$ et

en déduire que

$$\begin{aligned}
 \varphi(|b, 1\rangle) &= \varphi(|e_1\rangle) = \hbar\omega |e_1\rangle = \hbar\omega |b, 1\rangle \\
 \varphi(|b, 2\rangle) &= \varphi\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle + |e_3\rangle)\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi(|e_2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi(|e_3\rangle) \\
 &= -\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}|e_2\rangle - \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}|e_3\rangle = -\hbar\omega\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle + |e_3\rangle) \\
 &= -\hbar\omega |b, 2\rangle \\
 \varphi(|-1\rangle) &= \varphi\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle - |e_3\rangle)\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi(|e_2\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi(|e_3\rangle) \\
 &= -\hbar\omega\frac{1}{\sqrt{2}}|e_2\rangle + \hbar\omega\frac{1}{\sqrt{2}}|e_3\rangle = -\hbar\omega\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle - |e_3\rangle) \\
 &= -\hbar\omega |-1\rangle
 \end{aligned}$$

et donc que la matrice représentative de φ dans la base propre s'écrit

$$\hat{H}' = \hbar\omega \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \hat{H}$$

Dans la base propre orthonormée $\mathcal{D} = \{|b, 1\rangle, |b, 2\rangle, |-1\rangle\}$ les opérateurs $\hat{H}$ et $\hat{B}$ sont donc diagonaux. Il s'agit donc d'une base de vecteurs propres communs à $\hat{H}$ et $\hat{B}$.

3. Un ensemble complet $K = \{\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n, \dots\}$ d'observable qui commutent vérifie deux conditions :

- (a) tous ses éléments commutent deux à deux (commutation) ;
- (b) il existe une *unique* base orthonormée de kets propres communs à toutes les observables (complétude).

Pour résumer la situation :

- Si une observable ne possède aucune valeur propre dégénérée, à un facteur multiplicatif près, chaque valeur propre permet de déterminer un vecteur propre unique. Le singleton constitué par cette observable est donc un ECOC car une matrice commute avec elle-même !
- Si une observable possède au moins une valeur propre dégénérée, le sous-espace propre correspondant est de dimension plus grande que 1, on peut choisir une autre base que la base propre pour caractériser cet espace sans pour autant que la matrice perde son caractère diagonal dans cette nouvelle base. Le singleton constitué par cette observable n'est donc plus un ECOC.
- Considérons à présent un couple d'observables qui commutent, ces dernières possèdent donc les mêmes valeurs propres. Si les valeurs propres sont non dégénérées, elles forment un ECOC. S'il existe des valeurs propres dégénérées, il est nécessaire de pouvoir identifier de façon unique autant de vecteurs propres que la dimension de chaque sous espace propre pour que le couple d'observable forme un ECOC.

L'utilité de former des ECOC en mécanique quantique apparaîtra par la suite, mais on voit déjà que la base unique définie par la propriété de complétude permet de fabriquer un cadre privilégié pour étudier le problème considéré.

Passons en revue les divers cas proposés.

- Le singleton $\{H\}$ n'est pas un ECOC : en effet, nous avons vu que les bases D et B sont deux bases orthonormées distinctes qui toutes les deux sont bases propres de H . Plus simplement H possède la valeur propre double $\lambda = -\hbar\omega$ qui l'empêche donc de former un ECOC;
- Le singleton $\{B\}$ n'est pas un ECOC à cause de sa valeur propre double $\lambda = b$: Par exemple, le résultat d'une mesure de B qui fournirait b ne permet pas de savoir si l'on se trouve dans l'état $|b, 1\rangle$ ou dans l'état $|b, 2\rangle$.

– Le couple $\{H, B\}$ est un ECOC : Les deux observables commutent et choix de la base D permet de lever l'ambiguïté mentionnée dans le point précédent. Si le résultat d'une mesure de B donne la valeur b deux états sont possibles $|b,1\rangle$ ou $|b,2\rangle$ mais comme H et B commutent il suffit de mesurer simultanément la valeur de H : si l'on trouve $\hbar\omega$! c'est que l'on est dans l'état $|b,1\rangle = |e_1\rangle$ et si l'on trouve $-\hbar\omega$! c'est que l'on est dans l'état $|b,2\rangle$. Ainsi, le résultat d'une mesure, éventuellement conjointe, permet d'identifier un état unique dans lequel se trouve le système.

– Le couple $\{H^2, B\}$ n'est pas un ECOC. Il est pourtant clair que H^2 et B commutent. On voit en effet immédiatement que $H^2 = \hbar^2\omega^2 I$ qui commute avec n'importe quelle autre matrice carrée d'ordre 3. La valeur propre $\hbar^2\omega^2$ est donc trois fois dégénérée : toutes les bases orthonormées de C^3 sont des bases propres de H^2 . Etant donné que B possède lui aussi une valeur propre dégénérée on ne peut pas rattraper l'affaire. Pour fabriquer un ECOC, on vérifie facilement qu'il suffit de rajouter une autre observable qui commute à la fois avec H^2 et B ...

Exercice N°9. Opérateur unitaire

1. Soit A un opérateur unitaire. Déterminer les valeurs propres de A .
2. Démontrer que deux vecteurs propres associées à deux valeurs propres de A différentes sont orthogonales entre elles.
3. Soit $A(\epsilon)$ un opérateur unitaire dépendant d'une quantité réelle infiniment petite ϵ . Par hypothèse $A(\epsilon) \rightarrow 1$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. Si l'on développe $A(\epsilon)$ en série de puissance de ϵ sous la forme : $A(\epsilon) \rightarrow 1 + \epsilon G + \dots$, montrer que l'opérateur G est antihermitien.
4. Écrire l'opérateur infinitésimal $A(\epsilon)$ au voisinage de l'opérateur unité en fonction d'un opérateur hermitien que l'on déterminera.

Solution de l'exercice N°9. Opérateur unitaire

1. Si λ est une valeur propre de A , les vecteurs propres ψ sont tels que : $A\psi = \lambda\psi$. L'opérateur A étant unitaire, on a :

$$\langle A\psi, A\psi \rangle = \langle \psi, A^\dagger A\psi \rangle = \langle \psi, \psi \rangle \quad (1)$$

D'autre part :

$$\langle A\psi, A\psi \rangle = \langle \lambda\psi, \lambda\psi \rangle = |\lambda|^2 \langle \psi, \psi \rangle \quad (2)$$

Les relations (1) et (2) donnent : $|\lambda|^2 = 1$. Les valeurs propres de A sont donc les nombres complexes $e^{i\alpha}$.

2. Par hypothèse, $A\psi_1 = \lambda_1\psi_1$, $A\psi_2 = \lambda_2\psi_2$ avec $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Effectuons le produit scalaire :

$$\langle A\psi_1, A\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \lambda_1\psi_1, \lambda_2\psi_2 \rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \quad (3)$$

Pour que l'égalité (3) soit vérifiée entre le deuxième et le dernier terme, il faut que $\lambda_1^* \lambda_2 = 1$ ou $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$. Les valeurs propres étant de la forme $e^{i\alpha}$, on a $\lambda_1 = \exp(i\alpha_1)$, $\lambda_2 = \exp(i\alpha_2)$, et la relation (3) nous donne :

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \exp(i(\alpha_2 - \alpha_1)) \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \quad (4)$$

Dans le cas général, la quantité $(\alpha_2 - \alpha_1)$ est quelconque, et l'on a $\lambda_1^* \lambda_2 \neq 1$, d'où : $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$. Par contre, lorsque $(\alpha_2 - \alpha_1) = 2n\pi$, où n est un entier, on a : $\lambda_1^* \lambda_2 = 1$. Dans ce cas, les valeurs propres sont nécessairement égales, soit $\lambda_1 = \lambda_2$, ce qui est contraire à l'hypothèse, et par suite : $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$. Les vecteurs propres ψ_1 et ψ_2 sont bien orthogonaux entre eux.

3. L'adjoint $A^\dagger(\varepsilon)$ a pour développement au voisinage de l'opérateur unité :

$$A^\dagger(\varepsilon) = \mathbb{I} + \varepsilon G^\dagger + \dots \quad (5)$$

Utilisons la propriété (2.1.33) d'unitarité de $A(\varepsilon)$ en formant les produits :

$$A(\varepsilon)A^\dagger(\varepsilon) = A^\dagger(\varepsilon)A(\varepsilon) = \mathbb{I} + \varepsilon(G + G^\dagger) + \dots = \mathbb{I} \quad (6)$$

Il en résulte que : $(G + G^\dagger) = 0$. L'opérateur G est donc antihermitien.

4. Posons : $F = iG$; on obtient ainsi : $F - F^\dagger = 0$, ce qui montre que F est hermitien. L'opérateur unitaire infinitésimal $A(\varepsilon)$ peut donc être écrit sous la forme :

$$A(\varepsilon) = \mathbb{I} - i\varepsilon F \quad (7)$$

Exercice N°10 Fonction $\exp(A)$ d'une matrice carrée A

Soit A une matrice carrée d'ordre n et d'éléments a_{ij} ; on notera $a_{ij}^{(k)}$ les éléments de la matrice A^k .

1. De la majoration évidente $|a_{ij}| \leq M$, quels que soient i et j , déduire une majoration pour $a_{ij}^{(2)}$, $a_{ij}^{(3)}$, puis pour $a_{ij}^{(k)}$.

2. Si les n^2 séries numériques : $S_{ij} = \delta_{ij} + \frac{a_{ij}}{1!} + \frac{a_{ij}^{(2)}}{2!} + \dots + \frac{a_{ij}^{(k)}}{k!} + \dots$

convergent, on dira que la série matricielle :

$$\exp(A) = \mathbb{I} + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \dots + \frac{A^k}{k!} + \dots$$

converge et on notera $\exp(A)$ la matrice formée par la somme de cette série. En utilisant la majoration des $a_{ij}^{(k)}$ montrer que la série notée $\exp(A)$ converge pour toute matrice A d'ordre fini.

3. Montrer qu'une condition suffisante pour que les matrices A et B commutent est :

$$\exp(A) \exp(B) = \exp(A + B)$$

Solution de l'exercice N° 10 Fonction $\exp(A)$ d'une matrice carrée A

1. Les éléments de A^2 sont donnés par : $a_{ij}^{(2)} = \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{kj}$. La majoration $|a_{ij}| \leq M$ entraîne :

$|a_{ij}^{(2)}| \leq \sum_{k=1}^n |a_{ik}| |a_{kj}| \leq nM^2$. De même : $|a_{ij}^{(3)}| \leq n^2 M^3$, d'où par récurrence :

$$|a_{ij}^{(k)}| \leq n^{k-1} M^k \quad (3)$$

2. La série S_{ij} est majorée en module par la série :

$$1 + \frac{M}{1!} + \frac{nM^2}{2!} + \dots + \frac{n^{k-1} M^k}{k!} + \dots \quad (4)$$

qui peut aussi s'écrire : $\frac{n-1}{n} + \frac{1}{n} \left(1 + \frac{nM}{1!} + \frac{n^2 M^2}{2!} + \dots + \frac{n^k M^k}{k!} + \dots \right)$. Cette dernière série converge vers :

$$\frac{n-1}{n} + \frac{1}{n} e^{nM} \quad (5)$$

et la série S_{ij} converge absolument. Par conséquent, puisque pour toute matrice A d'ordre fini on peut trouver un majorant tel que $|a_{ij}| \leq M$, la matrice $\exp(A)$ est parfaitement définie pour toute matrice A d'ordre n .

3. Supposons que les matrices A et B commutent ; on en déduit :

$$(A + B)^2 = A^2 + 2AB + B^2 \text{ et par récurrence : } (A + B)^m = \sum_{k=0}^m C_m^k A^k B^{m-k}.$$

On a d'autre part pour les éléments matriciels :

$$(e^A e^B)_{ij} = \sum_{k=1}^n (e^A)_{ik} (e^B)_{kj} \quad (6)$$

Les deux quantités du second membre sont représentées par des séries de la forme S_{ij} , chacune étant absolument convergente ; on peut donc effectuer la multiplication de ces deux séries. Si l'on effectue directement le produit des matrices, on obtient :

$$e^A e^B = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{B^l}{l!} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^m C_m^k A^k B^{m-k} \right) \frac{1}{m!} \quad (7)$$

On voit apparaître le terme $(A + B)^m$ calculé précédemment, d'où :

$$e^A e^B = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(A + B)^m}{m!} = e^{A+B} \quad (8)$$

Exercice N°11. Vecteurs propres communs à deux opérateurs qui commutent

Deux opérateurs A et B ont pour matrices représentatives sur une base canonique $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ de l'espace vectoriel $\mathbf{E}_3$:

$$A = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{bmatrix} \quad ; \quad B = \begin{bmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{bmatrix}$$

où a et b sont des constantes réelles.

1. Calculer le commutateur $[A, B]$. Les opérateurs A et B sont-ils hermitiens ?
2. Calculer les valeurs et vecteurs propres de A et B.
3. Déterminer une base de $\mathbf{E}_3$ formée de vecteurs propres communs à A et B.

Solution de l'exercice N°11 Vecteurs propres communs à deux opérateurs qui commutent

1. On obtient : $[A, B] = 0$; les opérateurs A et B commutent. Les éléments matriciels a_{jk} de la matrice A vérifient la relation (2.3.13) : $a_{jk} = a_{kj}^*$; la matrice A est donc hermitienne et il en est de même pour B. Les opérateurs A et B sont donc hermitiens.
2. L'équation caractéristique de A s'écrit :

$$(a - \lambda)(a + \lambda)^2 = 0 \quad (2)$$

La valeur propre a est simple et $-a$ est double. Les vecteurs propres de A ont pour composantes :

$$- \text{ pour la valeur propre } a : |\phi_a\rangle = (\alpha, 0, 0) \quad (3)$$

$$- \text{ pour la valeur propre } -a : |\phi_{-a}\rangle = (0, \beta, \gamma) \quad ; \quad |\phi'_{-a}\rangle = (0, \beta', \gamma') \quad (4)$$

On vérifie aisément $\langle \phi_a | \phi_{-a} \rangle = \langle \phi_a | \phi'_{-a} \rangle = 0$.

Les valeurs propres de B sont égales à b et $-b$. La valeur b est double et $-b$ est simple. Les vecteurs propres de B ont pour composantes :

$$- \text{ pour la valeur propre } b : |\phi_b\rangle = (\lambda, \mu, \mu) \quad ; \quad |\phi'_b\rangle = (\lambda', \mu', \mu') \quad (5)$$

$$- \text{ pour la valeur propre } -b : |\phi_{-b}\rangle = (0, \nu, -\nu) \quad (6)$$

On vérifie également $\langle \phi_b | \phi_{-b} \rangle = \langle \phi'_b | \phi_{-b} \rangle = 0$.

3. Les seules valeurs des constantes $\alpha, \beta, \beta', \gamma, \gamma', \lambda, \lambda', \mu, \mu', \nu$ permettant de spécifier trois vecteurs propres de A , dont la forme générale est donnée par les expressions (3) et (4), identiques à trois vecteurs propres de B et figurant dans les relations (5) et (6), sont :

$$\beta = \nu ; \gamma = -\nu ; \beta' = \gamma' = \mu' ; \lambda = \alpha ; \mu = 0 ; \lambda' = 0 \quad (7)$$

Puisque les vecteurs résultants doivent être normés à l'unité, on en déduit : $\alpha = \lambda = 1 ; \nu = 1/\sqrt{2} ; \mu' = 1/\sqrt{2}$. Il vient :

$$\begin{aligned} |\phi_a\rangle &= |\phi_b\rangle = (1, 0, 0) \\ |\phi_{-a}\rangle &= |\phi_{-b}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1) \\ |\phi'_{-a}\rangle &= |\phi'_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, 1) \end{aligned} \quad (8)$$

Par hypothèse la base initiale $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ est une base canonique, c'est-à-dire de la forme :

$$|\psi_1\rangle = (1, 0, 0) \quad ; \quad |\psi_2\rangle = (0, 1, 0) \quad ; \quad |\psi_3\rangle = (0, 0, 1) \quad (9)$$

La nouvelle base orthonormée constituée de vecteurs propres communs aux matrices A et B est alors :

$$|\Psi_1\rangle = |\psi_1\rangle \quad ; \quad |\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle) \quad ; \quad |\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle - |\psi_3\rangle) \quad (10)$$

Exercice N°12

Dans un espace vectoriel à deux dimensions, on considère l'opérateur A dont la matrice,

dans une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, s'écrit :

$$A = \begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix}$$

1- A est-il hermitique?

2- Calculer ses valeurs propres et ses vecteurs propres qu'on notera $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$.

(On donnera leur développement normalisé dans $\{|1\rangle, |2\rangle\}$)

3- Vérifier que A est une observable.

4- Exprimer A dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$

Exercice 13

On considère un système physique dont l'espace des états est à trois dimensions, rapporté à une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.

Dans la base de ces trois vecteurs, l'opérateur hamiltonien H du système et l'observable B s'écrivent :

$$H = 2\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Où ω et b sont des constantes réelles positives.

1- H et B sont-ils hermitiques?

2- Montrer que H et B commutent. Donner une base de vecteurs propres communs à H et B.

3- Parmi les ensembles d'opérateurs : $\{H\}$, $\{B\}$, $\{H,B\}$, $\{H^2,B\}$ lesquels forment un E.C.O.C. ?

Exercice N° 14

Les matrices de Pauli. On vous donne 3 opérateurs $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$. Ces 3 opérateurs sont représentés dans une base de vecteurs $|u_1\rangle, |u_2\rangle$ par les matrices 2×2

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

a) Ces opérateurs sont-ils hermitiques ?

b) Vérifier que ces 3 matrices ont les mêmes valeurs propres. Lesquelles ? Ceci est-il cohérent avec la question précédente ?

c) Quel est l'opérateur, parmi les 3, qui est représenté dans la base de ses vecteurs propres ? (ce qui signifie : quel est l'opérateur qui admet les 2 vecteurs $|u_1\rangle, |u_2\rangle$ comme vecteurs propres?)

d) Quels sont les vecteurs propres des 2 autres opérateurs, exprimés en fonction de $|u_1\rangle$ et de $|u_2\rangle$?

e) Ces opérateurs commutent-ils ? Vérifier les relations suivantes

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y$$

Ces matrices de Pauli interviennent pour décrire les composantes du spin (ou moment cinétique intrinsèque) de l'électron. L'opérateur associé au spin de l'électron $\hat{S}$ sera $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$, avec $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$ les composantes de $\hat{\sigma}$.