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**.

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. Déduire 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 : **r = (x, y, z)** ; notons **X**, **Y**, **Z** les opérateurs qui appliqués à une fonction **f** la multiplie par une variable, soit : **X f = x f , Y f = y f , Z f = z f** . L'opérateur noté **R** est le vecteur ayant pour composantes les opérateurs **X, Y, Z**. Notons le vecteur **P** = $-i\hbar\nabla$ = (Px, Py, Pz).
Calculer le commutateur $[X, P_x^2]$. En déduire l'expression du commutateur [**R**, **P**^{2}].

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

$$[\sum_i A_i , \sum_k B_k] = \sum_{i,k}[A_i, B_k]$$

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 : X f = x f. Cet opérateur est-il hermitien ?

2. Calculer l'opérateur adjoint de d/dx. L'opérateur id/dx est-il hermitien ?

3. Montrer que l'opérateur laplacien 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.

Exercice N°6

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 ?

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

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

Exercice N°7: 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 :

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

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).

Exercice N°8. 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(**ε**) un opérateur unitaire dépendant d'une quantité réelle infiniment petite **ε**. Par hypothèse A(**ε**) → 1 lorsque **ε** → 0. Si l'on développe A(**ε**) en série de puissance de ´ sous la forme : A(**ε**) → 1 + **ε**G+· , montrer que l'opérateur G est antihermitien.

4. Écrire l'opérateur infinitésimal A(ε) au voisinage de l'opérateur unité en fonction d'un opérateur hermitien que l'on déterminera.

Exercice N°9. 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 : $S_{ij}=\delta_{ij}+\frac{a_{ij}}{1!}+\frac{a_{ij}^{(2)}}{2!}+\ldots+\frac{a_{ij}^{(k)}}{k!}+\ldots$

convergent, on dira que la série matricielle :

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

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 :

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

Exercice N°10 : 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.

Exercice N°11:

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-t-ils ? Vérifier les relations suivantes

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

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 $\hat{\vec{S}}$ *sera* $\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$, avec $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$ *les composantes de* $\hat{\vec{\sigma}}$.