

Mécanique Quantique 1 — CORRIGÉ

Séance d'exercices 3 : états, opérateurs et commutateurs

Exercice 1

a)

$$\begin{aligned}
[\lambda\hat{A} + \mu\hat{B}, \hat{C}] &= (\lambda\hat{A} + \mu\hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\lambda\hat{A} + \mu\hat{B}) \\
&= \lambda\hat{A}\hat{C} + \mu\hat{B}\hat{C} - \lambda\hat{C}\hat{A} - \mu\hat{C}\hat{B} \\
&= \lambda(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + \mu(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) \\
&= \lambda[\hat{A}, \hat{C}] + \mu[\hat{B}, \hat{C}]
\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\
&= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} \\
&= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}
\end{aligned}$$

c)

$$\begin{aligned}
[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= -[\hat{C}, \hat{A}\hat{B}] \\
&= -\hat{A}[\hat{C}, \hat{B}] - [\hat{C}, \hat{A}]\hat{B} \\
&= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}
\end{aligned}$$

d)

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} + \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \\
&\quad \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Exercice 2

D'après l'équation de l'exercice 1.d), on a

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

Alors, si $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$, on obtient $[\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0$. Toutefois, rien ne nous permet de conclure que $[\hat{C}, \hat{A}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{C}] = 0$. Ce qu'on sait, à partir de là, c'est que l'opérateur \hat{B} commute avec $[\hat{A}, \hat{C}]$.

D'un autre côté, on sait que si deux opérateurs commutent, ils ont les mêmes vecteurs propres. Ainsi, puisque $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, \hat{A} et \hat{B} ont les mêmes vecteurs propres. De même, puisque $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$, \hat{B} et \hat{C} ont les mêmes vecteurs propres. On est donc tenté de dire que \hat{A} et \hat{C} ont également les mêmes vecteurs propres. Ceci est vrai sauf si ces opérateurs ont des valeurs propres dégénérées. Dans ce dernier cas, rien ne permet de conclure que \hat{A} et \hat{C} commutent, car en cas de dégénérescence la base de vecteurs propres d'un opérateur n'est pas unique et par conséquent, le raisonnement ci-dessus ne s'applique pas. Un exemple de cette situation serait de prendre les trois opérateurs $\{L^2, L_x, L_y\}$. En effet, $[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = 0$, mais $[L_x, L_y] \neq 0$.

Exercice 3

a)

$$|\phi_1\rangle = a|v_1\rangle + ib|v_2\rangle \quad |\phi_2\rangle = a|v_1\rangle - ib|v_2\rangle$$

On peut calculer les normes :

$$\begin{aligned} \|\phi_1\|^2 &= \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= (a^*\langle v_1| - ib^*\langle v_2|)(a|v_1\rangle + ib|v_2\rangle) \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 + 0 - 0 + |b|^2\|v_2\|^2 \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 + |b|^2\|v_2\|^2 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \|\phi_2\|^2 &= \langle\phi_2|\phi_2\rangle \\ &= (a^*\langle v_1| + ib^*\langle v_2|)(a|v_1\rangle - ib|v_2\rangle) \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 - 0 + 0 + |b|^2\|v_2\|^2 \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 + |b|^2\|v_2\|^2 \\ &= \|\phi_1\|^2 \end{aligned}$$

où on utilise le fait que $|v_1\rangle$ et $|v_2\rangle$ sont des vecteurs non-normés et orthogonaux, c'est-à-dire que $\langle v_1|v_1\rangle = \|v_1\|^2$, $\langle v_2|v_2\rangle = \|v_2\|^2$ et $\langle v_1|v_2\rangle = \langle v_2|v_1\rangle = 0$.

Le produit scalaire vaut :

$$\begin{aligned} \langle\phi_1|\phi_2\rangle &= (a^*\langle v_1| - ib^*\langle v_2|)(a|v_1\rangle - ib|v_2\rangle) \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 - 0 - 0 - |b|^2\|v_2\|^2 \\ &= |a|^2\|v_1\|^2 - |b|^2\|v_2\|^2 \end{aligned}$$

Et les vecteurs normalisés deviennent donc :

$$\begin{aligned} |\tilde{\phi}_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}}|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{|a|^2\|v_1\|^2 + |b|^2\|v_2\|^2}}|\phi_1\rangle \\ |\tilde{\phi}_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\langle\phi_2|\phi_2\rangle}}|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{|a|^2\|v_1\|^2 + |b|^2\|v_2\|^2}}|\phi_2\rangle \end{aligned}$$

b)

Cette fois-ci on a des vecteurs continus :

$$|\phi_1\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_a^{a+\pi} dp |v_p\rangle \cos p \quad |\phi_2\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_a^{a+\pi} dp |v_p\rangle \sin p$$

On peut calculer les normes :

$$\begin{aligned}
\|\phi_1\|^2 &= \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} \int_a^{a+\pi} dpdq \underbrace{\langle v_q | v_p \rangle}_{\delta(p-q)} \cos p \cos q \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} dp \cos^2 p \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} \frac{1 + \cos 2p}{2} dp \\
&= \frac{1}{\pi} \left(p \Big|_a^{a+\pi} - \frac{\sin 2p}{2} \Big|_a^{a+\pi} \right) \\
&= \frac{1}{\pi} \left(a + \pi - a - \frac{1}{2} \underbrace{(\sin 2(a + \pi) - \sin 2a)}_{=0} \right) \\
&= 1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\|\phi_2\|^2 &= \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} \int_a^{a+\pi} dpdq \underbrace{\langle v_q | v_p \rangle}_{\delta(p-q)} \sin p \sin q \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} dp \sin^2 p \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} \frac{1 - \cos 2p}{2} dp \\
&= \dots \\
&= 1
\end{aligned}$$

Les vecteurs sont donc déjà normalisés.

Il reste à calculer le produit scalaire :

$$\begin{aligned}
\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle &= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} \int_a^{a+\pi} dpdq \underbrace{\langle v_q | v_p \rangle}_{\delta(p-q)} \sin p \cos q \\
&= \frac{2}{\pi} \int_a^{a+\pi} dp \cos p \sin p \\
&= \frac{2}{\pi} \int_{u=\sin a}^{u=\sin(a+\pi)} u du \quad \text{en posant } u = \sin p \\
&= \frac{2}{\pi} \frac{u^2}{2} \Big|_{\sin a}^{\sin(a+\pi)=-\sin a} \\
&= \frac{1}{\pi} (\sin^2 a - \sin^2 a) \\
&= 0
\end{aligned}$$

Les vecteurs sont donc orthogonaux.

Exercice 4

a)

Un opérateur est hermitien si $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{A}$$

$$\hat{B}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{B}$$

$$\hat{C}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -i & -i & -i \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \neq \hat{C}$$

Donc \hat{A} et \hat{B} sont hermitiens, mais pas \hat{C} .

b)

On voit tout de suite qu'une des valeurs propres de \hat{A} est $\lambda = 1$. Pour trouver les autres valeurs propres λ de \hat{A} , on résout l'équation $\det(\hat{A} - \lambda I) = 0$.

$$\det(\hat{A} - \lambda I) = 0 \Rightarrow (1 - \lambda)^2 + 1 = 0 \Rightarrow \lambda = 0 \text{ et } \lambda = 2$$

Pour $\lambda = 1$ on calcule les vecteurs propres :

$$\hat{A}\phi = \phi \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x + iy = x \\ -ix + y = y \\ z = z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = 0 \\ y = 0 \\ z \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_1 = z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Même chose pour $\lambda = 0$:

$$\hat{A}\phi = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} x + iy = 0 \\ -ix + y = 0 \\ z = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = -iy \\ z = 0 \\ y \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_0 = y \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Et pour $\lambda = 2$:

$$\hat{A}\phi = 2\phi \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x + iy = 2x \\ -ix + y = 2y \\ z = 2z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = y \\ z = 0 \\ y \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_2 = y \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Puisqu'en général, on demande des vecteurs normalisés, on choisira les vecteurs propres ainsi :

$$v_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Faisons la même chose pour la matrice \hat{B} . On voit qu'une des valeurs propres est $\lambda = 0$, les autres sont :

$$\det(\hat{B} - \lambda I) = 0 \Rightarrow (-\lambda)^2 - 4 = 0 \Rightarrow \lambda = 2 \text{ et } \lambda = -2$$

On calcule les vecteurs propres. Pour $\lambda = 0$:

$$\hat{B}\phi = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} -2iy = 0 \\ 2ix = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = 0 \\ y = 0 \\ z \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pour $\lambda = 2$:

$$\hat{B}\phi = 2\phi \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -2iy = 2x \\ 2ix = 2y \\ 0 = 2z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = -iy \\ z = 0 \\ y \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Et pour $\lambda = -2$:

$$\hat{B}\phi = -2\phi \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -2iy = -2x \\ 2ix = -2y \\ 0 = -2z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = iy \\ z = 0 \\ y \text{ indéterminé} \end{cases} \Rightarrow v_{-2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Exactement de la même façon, on trouve que les valeurs propres de \hat{C} sont $\lambda = 0$, $\lambda = i$ et $\lambda = 2$, et les vecteurs propres associés sont

$$v_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_i = \frac{1}{\sqrt{7}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i + 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Il est intéressant de remarquer que les matrices \hat{A} et \hat{B} ont les mêmes vecteurs propres. Cela signifie donc que \hat{A} et \hat{B} commutent $\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

c)

Puisque \hat{A} est hermitien, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Alors,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | \psi \rangle &\Rightarrow \langle \psi | \alpha \psi \rangle = \langle \alpha^* \psi | \psi \rangle \\ &\Rightarrow \alpha \langle \psi | \psi \rangle = \alpha^* \langle \psi | \psi \rangle \\ &\Rightarrow \alpha = \alpha^* \\ &\Rightarrow \alpha \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Montrons maintenant que des vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes seront orthogonaux si l'opérateur est hermitien. Soit $\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$ et $\hat{A}|\phi\rangle = \beta|\phi\rangle$ avec bien sûr \hat{A} hermitien. Alors,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} \phi \rangle = \langle \hat{A} \psi | \phi \rangle &\Rightarrow \beta \langle \psi | \phi \rangle = \alpha \langle \psi | \phi \rangle \\ &\Rightarrow (\beta - \alpha) \langle \psi | \phi \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \langle \psi | \phi \rangle = 0 \quad \text{car } \alpha \neq \beta \\ &\Rightarrow \text{Les vecteurs sont orthogonaux} \end{aligned}$$

Exercice 5

Pour commencer le calcul, il faut d'abord écrire $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Pour faciliter le calcul du commutateur, appliquons-le à une fonction quelconque $f(x)$:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}]f(x) &= (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})f(x) \\ &= x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(x) \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (xf(x)) \\ &= -xi\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(x) + i\hbar f(x) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} f(x) \\ &= i\hbar f(x). \end{aligned}$$

Ainsi, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.