Université de Strasbourg

TD2 - Opérateurs x et p

Jean-Pascal Lavoine

Transcrit par

Pierre Guichard

L3 Semestre 5 2020

Exercice 1 - Opérateurs

Soient $\hat{A}$ et $\hat{B}$ deux opérateurs linéaires agissant dans un espace de Hilbert $\mathscr{H}$.

1. Montrer que le produit $\hat{A}\hat{B}$ est un opérateur linéaire.

Soit deux applications u et v, et a et b deux scalaires, alors

$$\hat{A}\hat{B}(au + bv) = \hat{A}(a\hat{B}u + b\hat{B}v) = a\hat{A}\hat{B}u + b\hat{A}\hat{B}v$$

On sait que le produit de deux opérateurs peut-être vu comme un opérateur, $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, alors

$$\hat{C}(au + bv) = a\hat{C}u + b\hat{C}v$$

Ce qui est bien la définition d'un opérateur linéaire.

2. $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\
&= -\left(-\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}\right) \\
&= -\left(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\right) \\
&= \boxed{-[\hat{B}, \hat{A}]}
\end{aligned}$$

3. $\forall \lambda \in \hat{\mathbb{C}}, \quad [\hat{A}, \lambda] = 0$

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \lambda] &= \hat{A}\lambda - \lambda\hat{A} \\
&= \lambda\hat{A} - \lambda\hat{A} \\
&= \lambda\left(\hat{A} - \hat{A}\right) \\
&= \boxed{0}
\end{aligned}$$

4. $\forall \lambda \in \hat{\mathbb{C}}, \quad [\lambda\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}]$

$$\begin{aligned}
[\lambda\hat{A}, \hat{B}] &= (\lambda\hat{A})\hat{B} - \hat{B}(\lambda\hat{A}) \\
&= \hat{A}(\lambda\hat{B}) - (\lambda\hat{B})\hat{A} \\
&= \lambda\hat{A}\hat{B} - \lambda\hat{B}\hat{A} \\
&= \lambda\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) \\
&= \boxed{\lambda[\hat{A}, \hat{B}]}
\end{aligned}$$

5. $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}]$ **où** $\hat{C}$ **est également un opérateur de** $\mathscr{H}$**.**

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

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

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

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

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

8. On définit les fonctions d'opérateurs par leur développement en série. On a par exemple :

$$\exp^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

(a) Montrer que $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\exp^{t\hat{A}}\right) = \hat{A}\exp^{t\hat{A}}$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\exp^{t\hat{A}}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t\hat{A}^n}{n!}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} n\frac{t^{n-1}\hat{A}^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{t^{n-1}\hat{A}^n}{(n-1)!} &= \hat{A}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{t^{n-1}\hat{A}^{n-1}}{(n-1)!} \\
&= \hat{A}\sum_{\mu=0}^{\infty}\frac{t^{\mu}\hat{A}^{\mu}}{\mu!} \\
&= \boxed{\hat{A}\exp^{t\hat{A}}}
\end{aligned}$$

(b) **Démontrer que** $\exp\left(\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P}\right) = \hat{P}^{-1}\exp\left(\hat{A}\right)\hat{P}$ **où** $\hat{P}$ **est un opérateur inversible.**

$$\hat{P}^{-1}\hat{P} = \hat{P}\hat{P}^{-1} = \mathbb{I}$$

$$\exp^{\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P})^n}{n!}$$

Or, pour tout $n \in \mathbb{N}$ $(\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P})^n = \hat{P}^{-1}\hat{A}^n\hat{P}$
Par récurrence sur $n \in \mathbb{N}$

- $n = 0$ trivial
- Soit $n \in \mathbb{N}$, supposons la propriété vraie au rang n

$$\begin{aligned}(\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P})^{n+1} &= (\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P})^n\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P} \\ &= \hat{P}^{-1}\hat{A}^n\hat{P}\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P} \\ &= \hat{P}^{-1}\hat{A}^n\hat{P}\end{aligned}$$

D'où,

$$\boxed{\exp\left(\hat{P}^{-1}\hat{A}\hat{P}\right) = \hat{P}^{-1}\exp\left(\hat{A}\right)\hat{P}}$$

9. **On suppose que** $\hat{A}$ **et** $\hat{B}$ **vérifient les relations**

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

(a) **Montrer que** $[\hat{B}, \hat{A}^n] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}]$

On veux montrer que les propriétés ci-dessus sont aussi valide pour $\hat{A}^n$:

$$[\hat{A}^n, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

Récurrence

- $n = 0$ trivial
- On suppose que $[\hat{B}, \hat{A}^n] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}]$ est vrai, alors on vérifie pour $n + 1$

$$\begin{aligned}[B, \hat{A}^{n+1}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{A}^n] + [\hat{B}, \hat{A}]\hat{A}^n \\ &= n\hat{A}\hat{A}^{n-1}[\hat{B}, \hat{A}] + \hat{A}^n[\hat{B}, \hat{A}] \\ &= \boxed{(n+1)\hat{A}^n[\hat{B}, \hat{A}]}\end{aligned}$$

Ce qui démontre la propriété

(b) Déduire du résultat précédent que $[\hat{B}, \exp^{-\hat{A}x}] = -x \exp^{-\hat{A}x}[\hat{B}, \hat{A}]$ où x est un paramètre.

$$
\begin{aligned}
[\hat{B}, \exp^{-\hat{A}x}] = [\hat{B}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\hat{A}x)^n}{n!}] &= \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{B}, \frac{(-\hat{A}x)^n}{n!}] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} n(-\hat{A}x)^{n-1}[\hat{B}, (-\hat{A}x)] \\
&= -x \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-\hat{A}x)^{\mu}}{\mu!}[\hat{B}, \hat{A}] \\
&= \boxed{-x \exp^{-\hat{A}x}[\hat{B}, \hat{A}]}
\end{aligned}
$$

(c) On pose

$$f(x) = \exp^{\hat{A}x} \exp^{\hat{B}x}$$

Montrer que $\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ se met sous la forme :

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \left\{ \hat{A} + \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]x \right\} f(x)$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} &= \hat{A} \exp^{\hat{A}x} \exp^{\hat{B}x} + \exp^{\hat{A}x} \hat{B} \exp^{\hat{B}x} \\
&= \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) + [\exp^{\hat{A}x}, \hat{B}] \exp^{\hat{B}x} \\
&= \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) - [\hat{B}, \exp^{\hat{A}x}] \exp^{\hat{B}x} \\
&= \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) - x \exp^{\hat{A}x}[\hat{B}, \hat{A}] \exp^{\hat{B}x} \\
&= \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) + x[\hat{A}, \hat{B}]f(x) \\
&= \left\{ \hat{A} + \hat{B} + x[\hat{A}, \hat{B}] \right\} f(x) \\
&= \boxed{\left\{ \hat{A} + \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]x \right\} f(x)}
\end{aligned}
$$

(d) En intégrant l'équation différentielle obtenue à la question précédente, établir la relation

$$\exp^{\hat{A}+\hat{B}} = \exp^{\hat{A}} \exp^{\hat{B}} \exp^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

$$\exp^{\hat{A}x}\exp^{\hat{B}x} = \exp^{(\hat{A}+\hat{B})x+[\hat{A},\hat{B}]\frac{x^2}{2}}$$

On considère le cas particulier où $x = 1$,

$$\exp^{\hat{A}}\exp^{\hat{B}} = \exp^{(\hat{A}+\hat{B})+[\hat{A},\hat{B}]\frac{1}{2}}$$

$(\hat{A}+\hat{B})$ commutent avec $[\hat{A},\hat{B}]$, donc

$$\exp^{(\hat{A}+\hat{B})+[\hat{A},\hat{B}]\frac{1}{2}} = \exp^{(\hat{A}+\hat{B})}\exp^{[\hat{A},\hat{B}]\frac{1}{2}}$$

D'où,

$$\boxed{\exp^{(\hat{A}+\hat{B})-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} = \exp^{(\hat{A}+\hat{B})}}$$

Cette relation s'appelle relation de Baker-Campbell-Hausdorff (parfois aussi relation de Glauber).

Exercice 2 - Opérateurs adjoints

Soit $\mathscr{H}$ un $\mathbb{C}$-espace vectoriel muni d'un produit scalaire hermitien défini par

$$\begin{aligned} \mathscr{H} \times \mathscr{H} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (\varphi, \psi) &\longmapsto \Phi(\varphi, \psi) = \langle \varphi | \psi \rangle \end{aligned}$$

Soit $\hat{A}$ un opérateur de $\mathscr{H}$. On note $\hat{A}^\dagger$ l'opérateur adjoint de $\hat{A}$ défini par

$$\forall (\varphi, \psi) \in \mathscr{H}^2 \ , \ \left\langle \varphi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle = \left\langle \hat{A}^\dagger \varphi \middle| \psi \right\rangle$$

1. **Calculer $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger$ et $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger$**

$$\left\langle \varphi \middle| \left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger \psi \right\rangle = \left\langle \varphi \hat{A}^\dagger \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle$$

Ainsi,

$$\boxed{\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}}$$

$$\left\langle \varphi \middle| \left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger \psi \right\rangle = \left\langle \varphi \hat{A}\hat{B} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \varphi \hat{B} \middle| \hat{A}^\dagger \psi \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \psi \right\rangle$$

Ainsi,

$$\boxed{\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger}$$

2. **Soient $\hat{A}$ et $\hat{B}$, deux opérateurs hermitiques. À quelle condition l'opérateur $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ est-il hermitique ?**

$$\begin{aligned} \hat{C} &= \hat{A}\hat{B} \\ \hat{C}^\dagger = \left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger &= \hat{B}\hat{A} \end{aligned}$$

Un opérateur est dit hermitique si $\hat{C}^\dagger = \hat{C}$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

Donc, $\hat{C}$ est hermitique si $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent.

3. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermitique $\hat{A}$ sont réelles et que les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.

$$\left\langle \varphi \middle| \hat{A}\varphi \right\rangle = \langle \varphi | \lambda\varphi \rangle = \lambda \langle \varphi | \varphi \rangle$$
$$\left\langle \varphi \middle| \hat{A}^{\dagger}\varphi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\varphi \middle| \varphi \right\rangle = \langle \lambda\varphi | \varphi \rangle = \lambda^{*} \langle \varphi | \varphi \rangle$$

Ce qui implique

$$\lambda = \lambda^{*}$$

Ce qui est vrai quand $\lambda \in \mathbb{R}$.

Exercice 3 - Transformations unitaires

Un opérateur $\hat{U}$ est unitaire s'il vérifie $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathbb{I}}_{d\mathscr{H}}$ où $\hat{\mathbb{I}}_{d\mathscr{H}}$ est l'opérateur identité dans $\mathscr{H}$.

1. **Montrer qu'une transformation unitaire conserve le produit scalaire.**

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \left\langle\varphi\middle|\hat{U}^\dagger\hat{U}\psi\right\rangle \\ &= \left\langle\hat{U}\varphi\middle|\hat{U}\psi\right\rangle\end{aligned}$$

2. **Soit $\hat{A}$ un opérateur hermitique, montrer que l'opérateur $\exp\left(i\hat{A}\right)$ est unitaire.**

$$\exp^{i\hat{A}} = \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\left(i\hat{A}\right)^n}{n!}$$

Si $\hat{A}$ est hermitique, alors $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$:

$$\left(\exp^{i\hat{A}}\right)^\dagger = \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\left(-i\hat{A}\right)^n}{n!}$$

$$\Rightarrow \left(\exp^{i\hat{A}}\right)\left(\exp^{i\hat{A}}\right)^\dagger = \left(\exp^{i\hat{A}}\right)^\dagger\left(\exp^{i\hat{A}}\right) = \exp^0 = \hat{\mathbb{I}}_{d\mathscr{H}}$$

Ce qui est bien la définition d'un opérateur unitaire.

3. **Soit $\hat{U}$ un opérateur unitaire, montrer que ses valeurs propres sont de normes unité et que deux vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.**

Soit λ la valeur propre associée au vecteur propre $|\varphi\rangle$ et μ la valeur propre associée au vecteur propre $|\psi\rangle$. On impose que $\lambda \neq \mu$.

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left\langle\hat{U}\psi\middle|\hat{U}\psi\right\rangle = |\mu|^2\|\psi\|^2$$

Ce qui impose que $|\mu|^2 = 1$.

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \|\varphi\|^2$$

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \left\langle \hat{U}\varphi \middle| \hat{U}\varphi \right\rangle = |\lambda|^2 \|\varphi\|^2$$

Ce qui impose que $|\lambda|^2 = 1$.

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \left\langle \hat{U}\varphi \middle| \hat{U}\psi \right\rangle \\ &= \lambda^\star \mu \langle \varphi | \psi \rangle \qquad (1) \\ &= \mu^\star \lambda \langle \varphi | \psi \rangle \qquad (2) \end{aligned}$$

$$(1) - (2) = [\lambda^\star \mu - \mu^\star \lambda] \langle \varphi | \psi \rangle = 0$$

Ce qui implique que $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$ donc ce sont deux vecteurs orthogonaux !

Exercice 4 - Valeurs moyennes

On note $\Psi(x,t)$ la fonction d'onde normalisée d'un système physique à l'instant t et soit $\hat{A}$ une observable du système. On rappelle que $\langle\hat{A}\rangle(t)$, la valeur moyenne de l'observable $\hat{A}$ à l'instant t, est définie par

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x,t)^\star \hat{A}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

1. Montrer que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle(t) = \left\langle \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

   où $\hat{H}$ est l'hamiltonien du système.

2. On veut appliqué le résultat précédent aux observables $\hat{x}$ et $\hat{p}$ d'une particule sans spin plongée dans un potentiel scalaire et stationnaire et de hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{V}(\hat{x})$. Établir les équations d'évolution des valeurs moyennes $\langle\hat{x}\rangle(t)$ et $\langle\hat{p}\rangle(t)$ et comparer le résultat obtenu aux équations classique de Hamilton.