# Mécanique Quantique

## TD n°5 : Un peu de formalisme

## Exercice 1: Opérateurs adjoints et opérateurs hermitiens[1]

Soit $\hat{A}$ un opérateur agissant sur un ket quelconque $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert étudié, on définit son adjoint $\hat{A}^\dagger$ par[2]

$$|\psi'\rangle = \hat{A}\,|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

1. Montrer que l'on a $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}$ et $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

2. Montrer qu'un opérateur hermitien ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$) ne possède que des valeurs propres réelles et que lorsque $\hat{A}$ est un opérateur quelconque, ($\hat{A}^\dagger\hat{A}$) ne possède que des valeurs propres positives.

3. Soit $\hat{L}$ un opérateur quelconque, que peut-on dire des opérateurs $\hat{L} + \hat{L}^\dagger$ et $i(\hat{L} - \hat{L}^\dagger)$ ?

## Exercice 2: Propriétés de commutation

1. Soient $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ trois opérateurs, montrer les identités suivantes

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} \quad ; \quad \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$$
$$\left[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]$$
$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^\dagger = \left[\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger\right]$$

2. Dans l'hypothèse où $\left[\hat{A}, \hat{C}\right] = 0$ et $\left[\hat{B}, \hat{C}\right] = 0$ a-t-on toujours $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ ?

3. Soient $\hat{A}, \hat{B}$ deux opérateurs commutants avec leur commutateur:

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

   (b) Soit $f(z)$ une fonction de la variable complexe $z$ définie par la série entière $f(z) = \sum_{i=1}^{\infty} a_n z^n$. On définit l'opérateur $f(\hat{A})$ par la série $f(\hat{A}) = \sum_{i=1}^{\infty} a_n \hat{A}^n$. Montrer que

$$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right] = f'(\hat{B})\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \quad .$$

[1] Les opérateurs hermitiens sont aussi appelés opérateurs auto-adjoints ou encore opérateurs hermitiques

[2] $\hat{A}^\dagger$ est aussi appelé le conjugué hermitique de $\hat{A}$.

# Exercice 3: Opérateurs et transformations unitaires

Un opérateur $\hat{U}$ est unitaire si il vérifie $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbf{1}$. On définit une transformation unitaire par l'action de $\hat{U}$ sur un ket quelconque: $|\psi'\rangle = \hat{U}\,|\psi\rangle$ .

1. Montrer qu'une transformation unitaire préserve le produit scalaire.
2. Soit $\hat{A}$ un opérateur hermitien, montrer que l'opérateur $\exp(i\hat{A})$ est unitaire.
3. On définit la transformation d'un opérateur $\hat{A}$ par
$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \Longleftrightarrow |\phi'\rangle = \hat{A}'\,|\psi'\rangle$$
Comment s'exprime $\hat{A}'$ en terme de $\hat{A}$ ?
4. Montrer que deux vecteurs propres d'un opérateur unitaire ayant des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Quelles sont les valeurs propres d'un opérateur à la fois unitaire et hermitien ?

# Exercice 4: Représentations $x$ et $p$

1. Rappeler la relation de commutation entre les observables $\hat{X}$ et $\hat{P}$. En calculant la trace de ce commutateur, montrer que l'espace de Hilbert dans lequel agit ces opérateurs est de dimension infinie.
2. Soient $(|x\rangle, |p\rangle)$ les kets définis par $\hat{X}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$ et $\hat{P}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$, on appelle représentation en $x$ du vecteur d'état $|\psi\rangle$ appartenant à $\mathcal{L}^2$, la fonction d'onde $\psi(x)$ obtenue avec le produit scalaire: $\langle\, x|\psi\rangle = \psi(x)$. De même en représentation $p$, $\tilde{\psi}(p) = \langle p\,|\psi\rangle$.
   (a) On définit le produit scalaire entre deux vecteurs d'état appartenant à $\mathcal{L}^2$, $\langle\phi|\psi\rangle$ par:
   $$\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*(x)\psi(x)dx = \int \tilde{\phi}^*(p)\tilde{\psi}(p)dp \quad .$$
   En déduire les relations de fermeture associées aux bases $\{|x\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$.
   (b) Calculer $\langle x\,|x'\rangle$ et $\langle p\,|p'\rangle$.
   (c) Calculer $\langle x\,|\left[\hat{X},\hat{P}\right]|x'\rangle$, en déduire que l'action de l'opérateur $\hat{P}$ en représentation $x$ s'écrit d'une manière générale :
   $$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\langle x|\psi\rangle}{\partial x} + f(x)\langle x|\psi\rangle \quad ,$$
   où $f(x)$ est une fonction réelle. Chercher l'expression de la transformation unitaire $U$ telle que
   $$\hat{X}' = U\hat{X}U^\dagger \quad \text{et} \quad \hat{P}' = U\hat{P}U^\dagger = \hat{P} - f(\hat{X})$$
   On se placera dans la suite dans cette représentation (représentation de Schrödinger).
   (d) On considère la fonction $f_p(x) = \langle p\,|x\rangle$. A partir des deux expressions possibles de $\langle p\,|\hat{P}\,|x\rangle$, former l'équation différentielle vérifiée par $f_p$. Résoudre l'équation en choisissant la constante d'intégration $f_p(0) = \mathcal{N}$. Calculer la constante $\mathcal{N}$ que l'on choisit réelle et positive, en utilisant deux expressions possibles pour $\int dp\,\langle x'|p\rangle\langle p\,|x\rangle$ et sachant que l'on peut représenter la distribution de Dirac avec l'intégrale:
   $$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp(ikx) \quad .$$

(e) Retrouver les relations liant les fonctions d'onde $\langle x\,|\psi\rangle$ et $\langle p\,|\psi\rangle$.

3. Montrer que $\left[\vec{R}, F(\vec{P})\right] = i\hbar\overrightarrow{\nabla}_{\vec{P}}(F)$ et $\left[\vec{P}, F(\vec{R})\right] = -i\hbar\overrightarrow{\nabla}_{\vec{R}}(F)$

# Exercice 5 : Quelques exemples d'opérateurs

1. Montrer que les opérateurs $\frac{1}{2}\left(\hat{X}^2\hat{P} + \hat{P}\hat{X}^2\right)$ et $\hat{X}\hat{P}\hat{X}$ sont égaux et hermitiques.

2. **Opérateur d'évolution**: on définit l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t,t_0)$ par
$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) \quad .$$
   (a) Pour quelle raison peut-on décrire l'évolution dans le temps d'un état à l'aide d'une transformation unitaire ?
   (b) Montrer que $\hat{U}$ est unitaire.
   (c) Soit $|\psi(t_0)\rangle$ l'état du système à l'instant $t_0$. Exprimer $|\psi(t)\rangle$ à l'aide de $\hat{U}(t,t_0)$ et $|\psi(t_0)\rangle$.

3. **Translation**: développer en série entière la fonction d'onde $\psi(x+a)$ autour du point $x$. En déduire que l'opérateur de translation de vecteur $\vec{a}$ s'écrit:
$$\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}} = \exp\left(\frac{i\hat{\overrightarrow{P}}.\vec{a}}{\hbar}\right) \quad .$$
   Calculer $\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}}\hat{\overrightarrow{R}}\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}}^\dagger$ et $\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}}\ \hat{\overrightarrow{P}}\mathcal{T}_{\vec{a}}^\dagger$.

4. **Parité**: on définit l'opérateur $\hat{\Pi}$ par son action sur les vecteurs de base $|x\rangle$ avec
$$\hat{\Pi}\,|x\rangle = |-x\rangle$$
   (a) Montrer que $\hat{\Pi}$ est hermitique et unitaire. Donner les valeurs propres et fonctions propres de $\hat{\Pi}$.
   (b) Chercher les expressions des opérateurs de projection $\hat{P}_\pm$ sur les états pairs et impairs en fonction de $\hat{\Pi}$.
   (c) Comment agit $\hat{\Pi}$ sur les fonctions d'onde en représentation $p$ ?
   (d) Calculer $\hat{\Pi}\hat{X}\hat{\Pi}^\dagger$ et $\hat{\Pi}\hat{P}\hat{\Pi}^\dagger$.
   (e) On considère un système décrit par l'Hamiltonien $\hat{H} = \dfrac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X})$. Montrer que si $V(x)$ est une fonction paire alors $\left[\hat{H}, \hat{\Pi}\right] = 0$. Conclusion.

5. **Projecteur**: on considère une base orthonormée $\{|u_i\rangle\}_{i=1\ldots N}$ et l'opérateur
$$\hat{\mathcal{P}}_q = \sum_{i=1}^{q} |u_i\rangle\langle u_i| \qquad \text{avec} \quad q < N.$$
   Montrer que $\hat{\mathcal{P}}_q^2 = \hat{\mathcal{P}}_q$ et que $\hat{\mathcal{P}}_q$ projette tout ket sur le sous espace défini par les vecteurs de base $\{|u_i\rangle\}_{i=1\ldots q}$.