Questions de cours

- Opérateur projection $P_i = |u_i\rangle\langle u_i|$.
- Termes diagonaux $A_{ii} = \langle u_i|\ A\ |u_i\rangle$.
- Equation de Schrödinger dépendante du temps : $H\Psi(x, t) = i\hbar\, d\Psi(x, t)/dt$; résolution : $\Psi(x, t) = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar)$.
- Elément de volume en coordonnées sphériques : $dV = r^2 dr \sin(\theta) d\theta d\varphi$.
- $\hat{H} = a^+a + ½$.

Exercice : calculs généraux

1.

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

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 :

$$|\widetilde{\phi}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}}|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{|a|^2||v_1||^2 + |b|^2||v_2||^2}}|\phi_1\rangle$$

$$|\widetilde{\phi}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\phi_2|\phi_2\rangle}}|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{|a|^2||v_1||^2 + |b|^2||v_2||^2}}|\phi_2\rangle$$

2.

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 $\hat{C}$.

3.

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 : moments cinétiques

1.

On se rappelle que les relations de commutations des moments cinétiques sont les suivantes :

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \qquad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Calculons maintenant le produit vectoriel de **L** avec lui-même. Notez bien que puisque les vecteurs ne commutent pas, il faut respecter l'ordre dans la multiplication. Ainsi, quand vous calculer le déterminant des sous-matrices, il faut toujours multiplier d'abord l'élément de la deuxième ligne et ensuite celui de la troisième ligne :

$$\begin{aligned}
\mathbf{L} \times \mathbf{L} &= \begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ L_x & L_y & L_z \\ L_x & L_y & L_z \end{vmatrix} \\
&= \hat{\imath}(L_y L_z - L_z L_y) - \hat{\jmath}(L_x L_z - L_z L_x) + \hat{k}(L_x L_y - L_y L_x) \\
&= \hat{\imath}[L_y, L_z] - \hat{\jmath}[L_x, L_z] + \hat{k}[L_x, L_y] \\
&= \hat{\imath} i\hbar L_x - \hat{\jmath}(-i\hbar L_y) + \hat{k} i\hbar L_z \\
&= i\hbar \mathbf{L}
\end{aligned}$$

2.

Pour calculer le commutateur $[S^2, S_i]$, pour $i = x, y, z$, on se souvient que $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. De plus, puisque le spin est un moment cinétique, on peut utiliser les commutateurs calculés à la section précédente. Commençons par calculer $[S^2, S_x]$:

$$\begin{aligned}
[S^2, S_x] &= [S_x^2 + S_y^2 + S_z^2, S_x] \\
&= [S_x^2, S_x] + [S_y^2, S_x] + [S_z^2, S_x] \\
&= S_x[S_x, S_x] + [S_x, S_x]S_x + S_y[S_y, S_x] + [S_y, S_x]S_y + S_z[S_z, S_x] + [S_z, S_x]S_z \\
&= 0 + 0 + S_y(-i\hbar S_z) + (-i\hbar S_z)S_y + S_z(i\hbar S_y) + (i\hbar S_y)S_z \\
&= 0
\end{aligned}$$

Par symétrie, on trouve également que $[S^2, S_y] = 0$ et $[S^2, S_z] = 0$. Cela signifie donc que S^2 commute avec chacune des composante de S et donc avec S lui-même.