

T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Correction Série N°3

Solution 1: Opérateurs Linéaires

On considère trois opérateurs linéaires A , B et C .

1. Montrer les relations suivantes

a) Montrer que $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$:

On a

$$[A, B + C] = A(B + C) - (B + C)A = AB + AC - BA - CA = [A, B] + [A, C]$$

Généralisation :

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

b) Montrer que $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$:

développons le second membre de l'égalité :

$$\begin{aligned} [A, B]C + B[A, C] &= (AB - BA)C + B(AC - CA) \\ &= ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= ABC - BCA \\ &= A(BC) - (BC)A \\ &= [A, BC] \end{aligned}$$

c) Démontrons par récurrence la relation : $[A, B^n] = \sum_{i=0}^{n-1} B^i [A, B] B^{n-i-1}$:

On a : $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$. Si $B = C$, alors :

$$[A, B^2] = [A, B]B + B[A, B] = B^0 [A, B] B^1 + B^1 [A, B] B^0$$

Le développement est donc vérifié pour $n=1$ et $n=2$.

Supposons qu'il le soit pour $n-1$ ($n \geq 2$) :

$$[A, B^{n-1}] = \sum_{i=0}^{n-2} B^i [A, B] B^{n-i-2}$$

On a :

$$\begin{aligned} [A, B^n] &= [A, BB^{n-1}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] \\ &= [A, B]B^{n-1} + \sum_{i=0}^{n-2} B^{i+1} [A, B] B^{n-i-2} \\ &= [A, B]B^{n-1} + \sum_{j=1}^{n-1} B^j [A, B] B^{n-j-1} ; (j = i + 1) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} B^j [A, B] B^{n-j-1} \end{aligned}$$

(1)

d) Montrons que $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

On a :

$$\begin{aligned} [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= A, [B, C] - [B, C]A + B, [C, A] - [C, A]B \\ &+ C, [A, B] - [A, B]C \\ &= ABC - ACB - BCA + CBA + BCA - BAC \\ &- CAB + ACB + CAB - CBA - ABC + BAC \\ &= 0 \end{aligned}$$

C'est l'identité de Jacobi.

e) Montrons que $[A, B]^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger]$

On a

$$\begin{aligned} [A, B]^\dagger &= (AB - BA)^\dagger \\ &= (AB)^\dagger - (BA)^\dagger \\ &= B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger \\ &= [B^\dagger, A^\dagger] \end{aligned}$$

Si en plus A et B sont hermitiques : $\implies A^\dagger = A$ et $B^\dagger = B$ et donc $[A, B]^\dagger = [B, A]$.

2. Démontrons que si $[B, [A, B]] = 0$, alors $[A, G(B)] = [A, B] \frac{dG}{dB}$

Soit $G(B)$ un polynôme d'ordre quelconque en B qui s'écrit comme suit :

$$G(B) = g_0 B^0 + g_1 B^1 + g_2 B^2 + \dots = \sum_j g_j B^j$$

Alors

$$[A, G(B)] = [A, \sum_j g_j B^j] = \sum_j g_j [A, B^j] = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} B^s [A, B] B^{j-s-1} \right)$$

Le commutateur $[A, B]$ commute avec B , il commute aussi avec B^s qui est fonction de B :

$$B^s [A, B] = [A, B] B^s$$

D'où :

$$[A, G(B)] = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} [A, B] B^s B^{j-s-1} \right) = \sum_j g_j \left(\sum_{s=0}^{j-1} [A, B] B^{j-1} \right) = [A, B] \sum_j g_j B^{j-1}$$

or :

$$\sum_j g_j B^{j-1} = \sum_j g_j \frac{d(B^j)}{dB} = \frac{d}{dB} \left(\sum_j g_j B^j \right) = \frac{dG}{dB}$$

d'où :

$$[A, G(B)] = [A, B] \frac{dG}{dB}$$

Solution 2: Représentation matricielle d'un opérateur

Soit A un opérateur représenté dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ par la matrice :

$$\hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{où } a \text{ est un réel non nul}$$

1) **A est-il hermitique ?**

On constate que A est une matrice réelle et symétrique, et le $A^\dagger = (A^*)^t = A \implies A$ est hermitique

valeurs propres de \hat{A}

elles sont déterminées en calculant le déterminant de \hat{A} comme suite :

$$\det(\hat{A} - \lambda \mathbb{I}_{3 \times 3}) = \begin{vmatrix} a - \lambda & a & a \\ a & a - \lambda & a \\ a & a & a - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\iff (a - \lambda) \begin{vmatrix} a - \lambda & a \\ a & a - \lambda \end{vmatrix} - a \begin{vmatrix} a & a \\ a & a - \lambda \end{vmatrix} + a \begin{vmatrix} a & a \\ a - \lambda & a \end{vmatrix} = 0$$

Les valeurs propres de \hat{A} sont $\lambda = 0$ ($g_{\lambda=0} = 2$ ou bien deux fois dégénérée) et $\lambda = 3a$ (non dégénérée ou bien simple)

vecteurs propres de \hat{A}

Soient

- $|\phi_1\rangle = \sum_i x_i |u_i\rangle$ et $|\phi_2\rangle = \sum_i y_i |u_i\rangle$ les deux vecteurs propres associés à $\lambda = 0$.
- $|\phi_3\rangle = \sum_i z_i |u_i\rangle$ le vecteur propre associé à $\lambda = 3a$.

Alors

- $\hat{A}|\phi_1\rangle = 0 \implies x_1 + x_2 + x_3 = 0$, avec $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \sum_i |x_i|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$. On obtient alors le système :

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1 \end{cases}$$

en prenant $x_3 = 0$, et donc $x_2 = -x_1$ il s'en suit que $|\phi_1\rangle = (|u_1\rangle - |u_2\rangle)/\sqrt{2}$.

- $\hat{A}|\phi_2\rangle = 0 \implies y_1 + y_2 + y_3 = 0$, avec $\langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = \sum_i |y_i|^2 = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = 1$ ET $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$ (puisque se sont deux vecteurs de la base et sont orthogonaux). On obtient alors le système :

$$\begin{cases} y_1 + y_2 + y_3 = 0 \\ y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = 1 \\ y_1/\sqrt{2} - y_2/\sqrt{2} + 0 \times y_3 = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} y_1 = y_2 \\ y_3 = -(y_1 + y_2) \end{cases} \implies \begin{cases} y_1 = 1/\sqrt{6} = y_2 \\ y_3 = -2/\sqrt{6} \end{cases}$$

il s'en suit que $|\phi_2\rangle = (|u_1\rangle + |u_2\rangle - 2|u_3\rangle)/\sqrt{6}$.

- $\hat{A}|\phi_3\rangle = 3a|\phi_3\rangle \implies$

$$\begin{cases} -2z_1 + z_2 + z_3 = 0 \\ z_1 - 2z_2 + z_3 = 0 \\ z_1 + z_2 - 2z_3 = 0 \end{cases}$$

avec $\langle \phi_1 | \phi_3 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_3 \rangle = 0$ (puisque se sont deux vecteurs de la base et sont orthogonaux) ET $\langle \phi_3 | \phi_3 \rangle = \sum_i |z_i|^2 = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = 1$. On obtient après calcul $z_1 = z_2 = z_3$ ce qui donne

$$|\phi_3\rangle = (|u_1\rangle + |u_2\rangle + |u_3\rangle)/\sqrt{3}$$

2) **A est-elle une observable ?**

On a l'ensemble $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1,2,3}$ est formé de kets linéairement indépendants $\implies \{|\phi_i\rangle\}$ vérifie les relations d'orthonormalisation et de fermeture $\implies \{|\phi_i\rangle\}$ forme une base. Il s'en suit alors que A est un observable.

3) **La matrice de A et celle de $F(A)$ dans la base propre de \hat{A} .**

Dans ce qui suit on représente l'opérateur A dans les deux bases

dans la base $\{ u_i\rangle\}$	dans la base propre de \mathbf{A} $\{ \phi_i\rangle\}$
$\hat{A} = \begin{matrix} \langle u_1 \\ \langle u_2 \\ \langle u_3 \end{matrix} \begin{pmatrix} u_1\rangle & u_2\rangle & u_3\rangle \\ a & a & a \\ a & a & a \\ a & a & a \end{pmatrix}$	$\hat{A} = \begin{matrix} \langle \phi_1 \\ \langle \phi_2 \\ \langle \phi_3 \end{matrix} \begin{pmatrix} \phi_1\rangle & \phi_2\rangle & \phi_3\rangle \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3a \end{pmatrix}$

Application pour $e^{\mathbf{A}}$ et $\sqrt{\mathbf{A}}$.

En utilisant la règle :

$$\mathbf{A} |\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle \implies F(\mathbf{A}) |\phi\rangle = F(\lambda) |\phi\rangle$$

on écrit

$$(F(\hat{A})) = \begin{pmatrix} F(0) & 0 & 0 \\ 0 & F(0) & 0 \\ 0 & 0 & F(3a) \end{pmatrix}$$

Donc

$$(e^{\mathbf{A}}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{3a} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (\sqrt{\mathbf{A}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3a} \end{pmatrix}$$

dans l'ordre $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$.

Solution 3: E.C.O.C

On considère un système physique dont l'espace des états ξ est de dimension 3 et soit $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ une base orthonormée de ξ . Les opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{B} (indépendants du temps) se décomposent dans cette base comme suit :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & -b & 0 \\ 0 & 0 & -b \end{pmatrix}$$

où a et b sont des constantes réelles non nulles.

1) \mathbf{A} et \mathbf{B} sont-ils des observables

- Les éléments des deux matrices sont réels $\implies \mathbf{A}$ et \mathbf{B} sont hermitiques
- Les vecteurs propres sont $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle \equiv$ kets de la base

$\implies \mathbf{A}$ et \mathbf{B} sont des observables.

2) Les E.C.O.C possibles dans ξ

$$\begin{array}{ll} \text{Les } V_p (\vec{V}_p) \text{ de } \hat{A} & \begin{array}{l} \bullet \lambda = a \rightarrow |1\rangle \\ \bullet \lambda = a \rightarrow |2\rangle \\ \bullet \lambda = 0 \rightarrow |3\rangle \end{array} \\ \text{Les } V_p (\vec{V}_p) \text{ de } \hat{B} & \begin{array}{l} \bullet \mu = b \rightarrow |1\rangle \\ \bullet \mu = -b \rightarrow |2\rangle \\ \bullet \mu = -b \rightarrow |3\rangle \end{array} \end{array}$$

On constate que la valeur propre $\lambda = a$ est deux fois dégénérée, c-à-d qu'il \exists deux \vec{V}_p associés à cette valeurs qui sont : $|1\rangle$ et $|2\rangle \implies \{\mathbf{A}\}$ ne forme pas un E.C.O.C.

De même, on constate que la valeur propre $\mu = -b$ est deux fois dégénérée, c-à-d qu'il \exists deux \vec{V}_p associés à cette valeurs qui sont : $|2\rangle$ et $|3\rangle \implies \{\mathbf{B}\}$ ne forme pas un E.C.O.C.

Maintenant on regarde l'ensemble $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$

i) on vérifie aisément que $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} = 0$

ii) le tableau suivant regroupe les différentes V_p et \vec{V}_p

\vec{V}_p communs	V_p de \hat{A}	V_p de \hat{B}
$ 1\rangle$	a	b
$ 2\rangle$	a	-b
$ 3\rangle$	0	-b

À chaque couple de valeurs propres de \hat{A} et \hat{B} correspond un seul vecteur propre commun : $\{a, b\} \leftrightarrow |1\rangle$, $\{a, -b\} \leftrightarrow |2\rangle$ et $\{0, -b\} \leftrightarrow |3\rangle$.

On vérifie que l'ensemble $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, vérifie les deux relations fondamentales de fermeture et d'orthonormalisation :

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad ; \quad \sum_{i=1}^3 |i\rangle \langle i| = \mathbb{I}$$

Par conséquent, l'ensemble $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ forme une base de l'espace des états. Et les deux observables A et B commutent et admettent une base de \vec{V}_p communs, par conséquent ils forment un E. C. O. C.

3) la matrice représentant H dans la base $\{|i\rangle\}$, $i=1,2,3$

Elle s'écrit

$$\hat{H} = E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

les valeurs propres

elles sont déterminées en calculant le déterminant de \hat{H} comme suite :

$$\begin{aligned} \det(\hat{H} - \lambda \mathbb{I}_{3 \times 3}) &= \begin{vmatrix} E - \lambda & \sqrt{3}E & 0 \\ \sqrt{3}E & -E - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & E - \lambda \end{vmatrix} = (E - \lambda) \begin{vmatrix} E - \lambda & \sqrt{3}E \\ \sqrt{3}E & -E - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ &= (E - \lambda)(\lambda + 2E)(\lambda - 2E) = 0 \end{aligned}$$

Les valeurs propres de \hat{H} sont : $\lambda = -2E$ (simple), $\lambda = E$ (simple) et $\lambda = 2E$ (simple).

les vecteurs propres de H .

• Soit $|\phi_1\rangle = \sum_i x_i |i\rangle$ le vecteur propre associé à $\lambda = E$. Alors

$$\hat{H} |\phi_1\rangle = E |\phi_1\rangle \iff E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \implies x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 \text{ quelconque, avec}$$

$\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \sum_i |x_i|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x_3^2 = 1 \implies x_3 = 1e^{i\theta}$. En prenant la phase $\theta = 0$, on obtient alors

$$|\phi_1\rangle = |3\rangle$$

• Soit $|\phi_2\rangle = \sum_i y_i |i\rangle$ le vecteur propre associé à $\lambda = 2E$. Alors

$$\hat{H} |\phi_2\rangle = 2E |\phi_2\rangle \iff E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = 2E \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \implies y_1 = \sqrt{3}y_2, y_3 = 0, \text{ avec}$$

$\langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = \sum_i |y_i|^2 = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = y_1^2 + y_2^2 = 3y_2^2 + y_2^2 = 1 \implies y_2 = \frac{1}{2}e^{i\theta}$. En prenant la phase $\theta = 0$, on obtient alors

$$|\phi_2\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} |1\rangle + \frac{1}{2} |2\rangle$$

• Soit $|\phi_3\rangle = \sum_i z_i |i\rangle$ le vecteur propre associé à $\lambda = -2E$. Alors

$$\hat{H} |\phi_3\rangle = -2E |\phi_3\rangle \iff E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = -2E \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} \implies z_2 = -\sqrt{3}z_1, z_3 = 0, \text{ avec}$$

$\langle \phi_3 | \phi_3 \rangle = \sum_i |z_i|^2 = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = z_1^2 + z_2^2 = z_1^2 + 3z_1^2 = 1 \implies z_1 = \frac{1}{2}e^{i\theta}$. En prenant la phase $\theta = 0$, on obtient alors

$$|\phi_3\rangle = \frac{1}{2} |1\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} |2\rangle$$

4) Vérifions que H commutent avec A

On a

$$\mathbf{AH} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = aE \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

et

$$\mathbf{HA} = E \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = aE \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donc $\mathbf{AH} - \mathbf{HA} = 0 \implies [\mathbf{A}, \mathbf{H}] = 0$ et donc H commute avec A.

La base formée de vecteurs propres communs à H et A.

On procède en générale par la vérification si les \vec{V}_p de l'un des observable le sont aussi pour l'autre. Alors

- Si on commence par les \vec{V}_p de A, qui ne sont que les vecteurs de la base : $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, ces vecteurs ne sont pas des \vec{V}_p de H, et la meilleure illustration en est que :

$$\hat{H}|1\rangle = E|1\rangle + \sqrt{3}E|2\rangle \neq \text{cst}|1\rangle$$

donc ces vecteurs ne peuvent pas constituer une base commune pour H et A.

- Dans l'autre sens, on sait que $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$ sont des \vec{V}_p de H. Il nous reste à vérifier seulement si ces vecteurs le sont aussi pour A. En fait :

$$- \hat{A}|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0|\phi_1\rangle \text{ et donc } |\phi_1\rangle \text{ est un } \vec{V}_p \rightarrow V_p = 0.$$

$$- \hat{A}|\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = a|\phi_2\rangle \text{ et donc } |\phi_2\rangle \text{ est un } \vec{V}_p \rightarrow V_p = a.$$

$$- \hat{A}|\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix} = a|\phi_3\rangle \text{ et donc } |\phi_3\rangle \text{ est un } \vec{V}_p \rightarrow V_p = a.$$

\vec{V}_p communs	V_p de \hat{H}	V_p de \hat{A}
$ \phi_1\rangle$	E	0
$ \phi_2\rangle$	2E	a
$ \phi_3\rangle$	-2E	a

alors à chaque couple de valeurs propres est associé un seul ket. donc

- $\{\mathbf{H}\}$ forme à elle seule un E.C.O.C
- $\{\mathbf{H}, \mathbf{A}\}$ forme à elle seule un E.C.O.C

Solution 4: Opérateurs Linéaires (facultatif)

1) Soit L un opérateur linéaire arbitraire. On sait que : $A^\dagger = (A^*)^T$, $(A^*)^* = A$, $(A^\dagger)^\dagger = A$ et $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$. Donc

a) On a :

$$(L^\dagger)^\dagger = ((L^*)^T)^\dagger = (((L^*)^T)^*)^T = L$$

b) $(L^\dagger L)^\dagger = L^\dagger (L^\dagger)^\dagger = L^\dagger L \implies L^\dagger L$ est hermitique
 $(LL^\dagger)^\dagger = (L^\dagger)^\dagger L^\dagger = LL^\dagger \implies LL^\dagger$ est hermitique

c) $(L + L^\dagger)^\dagger = (L)^\dagger + (L^\dagger)^\dagger = L + L^\dagger$ et donc $L + L^\dagger$ hermitique,
 $[i(L - L^\dagger)]^\dagger = -i[(L)^\dagger - (L^\dagger)^\dagger] = -i[L^\dagger - L] = i(L - L^\dagger)$ et donc $i(L - L^\dagger)$ hermitique.

2) Soit l'opérateur hermitique C, on a donc

$$G^\dagger = (ACA^\dagger)^\dagger = \underbrace{(A^\dagger)^\dagger}_{=A} \underbrace{(C)^\dagger}_{=C} (A)^\dagger = ACA^\dagger = G$$

donc G est également hermitique.

3) Soit un opérateur F qui s'écrit en fonction de deux autres A et B comme suit :

$$F = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = F(\lambda)$$

où λ est une constante.

Dérivons par rapport à λ cet opérateur :

$$\frac{dF}{d\lambda} = A e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B A e^{-\lambda A}$$

comme $A e^{\lambda A} = e^{\lambda A} A$ puisque il s'agit de même opérateur, on écrit alors :

$$\frac{dF}{d\lambda} = e^{\lambda A} A B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} (AB - BA) e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A}$$

de la même façon, on obtient la dérivée seconde :

$$\frac{d^2 F}{d\lambda^2} = A e^{\lambda A} (AB - BA) e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} (AB - BA) A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, [AB - BA]] e^{-\lambda A}$$

et etc pour les ordres supérieurs. Finalement :

$$F(\lambda = 1) = e^A B e^{-A} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n F}{d\lambda^n} \right) \Big|_{\lambda=0} = B + \frac{1}{1!} [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots$$

Solution 5: Equation aux valeurs propres (facultatif)

Soit $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ une base orthonormée de l'espace des des états à deux dimensions, et soit le ket $|\Psi\rangle$ défini par :

$$|\Psi\rangle = |u_1\rangle + i|u_2\rangle$$

1) a) Montrons que $|\Psi\rangle$ n'est pas normé à l'unité

On a

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= (\langle u_1 | - i \langle u_2 |) (|u_1\rangle + i |u_2\rangle) \\ &= \underbrace{\langle u_1 | u_1 \rangle}_{=1} + i \underbrace{\langle u_1 | u_2 \rangle}_{=0} - i \underbrace{\langle u_2 | u_1 \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle u_2 | u_2 \rangle}_{=1} \\ &= 1 + 1 = 2 \neq 1 \end{aligned}$$

b) Définition à partir de $|\Psi\rangle$ un ket normé à l'unité que l'on note $|\Phi\rangle$

Soit

$$|\Phi\rangle = \frac{|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle + i |u_2\rangle]$$

2) La matrice représentant l'opérateur projecteur, noté K, sur le ket $|\Phi\rangle$,

Soit $K = P_\Phi = |\Phi\rangle \langle \Phi|$. Calculons les entrées de la matrice qui représente K. En fait :

$$\bullet K |u_1\rangle = |\Phi\rangle \langle \Phi | u_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi\rangle = \frac{1}{2} [|u_1\rangle + i |u_2\rangle]$$

$$\bullet K |u_2\rangle = |\Phi\rangle \langle \Phi | u_2 \rangle = -i \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi\rangle = -\frac{1}{2} [i |u_1\rangle + |u_2\rangle]$$

finalemet

$$\hat{K} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

Les éléments diagonaux de cette matrice sont réels tandis que ceux off-diagonaux sont symétriques conjugués, donc : $\mathbf{K}^\dagger = (\mathbf{K}^T)^* = \mathbf{K} \implies \mathbf{K}$ est hermitique

3) Calcul des valeurs propres de \mathbf{K} on calcul

$$\det(\hat{K} - \lambda \mathbb{I}_{2 \times 2}) = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} - \lambda & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} - \lambda \end{vmatrix} = \left(\frac{1}{2} - \lambda\right)^2 - \frac{1}{4} = \left(\frac{1}{2} - \lambda - \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \lambda + \frac{1}{2}\right) = 0$$

donc les valeurs propres sont $\lambda = 0$ (simple) et $\lambda = 1$ (simple).

Calcul des vecteurs propres, $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$, de \mathbf{K}

Soit, en général, $|\phi\rangle = \alpha |u_1\rangle + \beta |u_2\rangle$ un vecteur propre de \mathbf{K} associé à la valeur propre λ , cela vaut dire que

$$\hat{K}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle \iff \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \iff \begin{cases} \frac{1}{2}(\alpha - i\beta) = \lambda\alpha \\ \frac{1}{2}(i\alpha + \beta) = \lambda\beta \end{cases}$$

- pour $\lambda = 0$ on trouve $\alpha = i\beta$

$$\implies |\phi_1\rangle = i\beta |u_1\rangle + \beta |u_2\rangle$$

$|\phi_1\rangle$ est normé, cela donne : $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = 2|\beta|^2 = 1 \implies \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$ à un facteur près. Finalement, on écrit :

$$|\phi_1\rangle = i \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$$

- pour $\lambda = 1$ on trouve $\beta = i\alpha$

$$\implies |\phi_2\rangle = \alpha |u_1\rangle + i\alpha |u_2\rangle$$

$|\phi_2\rangle$ est normé, cela donne : $\langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 2|\alpha|^2 = 1 \implies \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ à un facteur près. Finalement, on écrit :

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$$

4) Relation d'orthonormalisation et de fermeture.

C'est facile de montrer que

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \left(-i \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_1 | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_2 | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |u_2\rangle \right) = 0$$

donc les deux vecteurs propres vérifient la relation d'orthogonalisation.
d'autre part on a :

$$|\phi_1\rangle \langle \phi_1 | = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{i}{2} \\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$|\phi_2\rangle \langle \phi_2 | = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

et donc

$$|\phi_1\rangle \langle \phi_1 | + |\phi_2\rangle \langle \phi_2 | = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{I}_{2 \times 2}$$

et c'est la relation de fermeture.

5) On considère un opérateur A représenté, dans la base $\{|u_i\rangle\}$, par la matrice : $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. comme précédemment pour le calcul des V_p et \vec{V}_p , on trouve pour cette matrice :

$$\begin{cases} \lambda = 1 \rightarrow |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_1\rangle - |u_2\rangle] \\ \lambda = 3 \rightarrow |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|u_1\rangle + |u_2\rangle] \end{cases} \iff \begin{cases} |u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle] \\ |u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_2\rangle - |\psi_1\rangle] \end{cases} \quad (*)$$

a) La matrice représentant l'opérateur \sqrt{A}

D'après le passage en haut, on peut représenter les opérateurs A et \sqrt{A} dans la base propre de A comme suit :

$$\hat{A} = \begin{matrix} & |\psi_1\rangle & |\psi_2\rangle \\ \begin{matrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \end{matrix} \implies (\sqrt{A}) = \begin{matrix} & |\psi_1\rangle & |\psi_2\rangle \\ \begin{matrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Alors que dans la base $\{|u_i\rangle\}$, il est indispensable de passer par la définition de $V_p \leftrightarrow \vec{V}_p$, c'est-à-dire : $\sqrt{A}|\psi_1\rangle = 1|\psi_1\rangle$ et $\sqrt{A}|\psi_2\rangle = \sqrt{3}|\psi_2\rangle$, en plus des relations de passage en (*). On trouve :

$$(\sqrt{A}) = \begin{matrix} & |u_1\rangle & |u_2\rangle \\ \begin{matrix} \langle u_1| \\ \langle u_2| \end{matrix} & \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}+1}{2} & \frac{\sqrt{3}-1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}-1}{2} & \frac{\sqrt{3}+1}{2} \end{pmatrix} \end{matrix}$$

On procède de la même manière pour l'opérateur $A^{3/2}$