Université du Québec à Trois-Rivières
Décanat des études

EXERCICE

Département de chimie, biochimie et physique

Gabriel Antonius
gabriel.antonius@uqtr.ca

PMO1008 **Exercice 1** **Automne 2022**

Problème 1 : Particule en 1D

Considérez deux fonctions d'onde réelles pour une particule en une dimension

$$\psi_1(x) = C_1 e^{-x^2} \tag{1}$$

$$\psi_2(x) = C_2 x e^{-x^2} \tag{2}$$

a) Sachant que ces fonctions d'onde doivent être normalisées, que valent les constantes C_1 et C_2?
b) Considérez maintenant l'opérateur

$$W = aX + bX^2 \tag{3}$$

Quelle est la représentation matricielle de W dans la base des ψ_1 et ψ_2 ? Autrement dit, construisez la matrice

$$W = \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\psi_1|W|\psi_1\rangle & \langle\psi_1|W|\psi_2\rangle \\ \langle\psi_2|W|\psi_1\rangle & \langle\psi_2|W|\psi_2\rangle \end{bmatrix} \tag{4}$$

Solution

Problème 2 : Vecteurs propres d'un opérateur

La représentation matricielle d'un opérateur A est

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 1 & 1 \\ i/\sqrt{2} & 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

a) Trouvez les valeurs propres λ_i et les vecteurs propres orthonormaux $|\phi_i\rangle$ de A.
b) À l'aide de la correspondance ket $\leftrightarrow$ matrice-colonne et bra $\leftrightarrow$ matrice-vecteur, vérifiez que

$$I = \sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| \tag{6}$$

et

$$A = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| \tag{7}$$

Solution

a) On trouve les valeurs propres en solutionnant

$$0 = \begin{vmatrix} -\lambda & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 1-\lambda & 1 \\ i/\sqrt{2} & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} \tag{8}$$

Donc

$$\begin{aligned} 0 &= -\lambda\big[(1-\lambda)^2 - 1\big] - \frac{i}{\sqrt{2}}\Big[-\frac{i}{\sqrt{2}}(1-\lambda) - \frac{i}{\sqrt{2}}\Big] - \frac{i}{\sqrt{2}}\Big[-\frac{i}{\sqrt{2}} - \frac{i}{\sqrt{2}}(1-\lambda)\Big] &(9)\\ &= \lambda(2\lambda - \lambda^2) - \big[2-\lambda\big] &(10)\\ &= (2-\lambda)(\lambda^2-1) &(11)\\ &= -(\lambda-2)(\lambda-1)(\lambda+1) &(12) \end{aligned}$$

Les valeurs propres sont donc -1, 1 et 2.
On trouve les vecteurs propres (x, y, z) en solutionnant

$$\begin{pmatrix} -\lambda & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 1-\lambda & 1 \\ i/\sqrt{2} & 1 & 1-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{13}$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 2-\lambda & 2-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{14}$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1-\lambda+\frac{1}{2\lambda} & 1-\frac{1}{2\lambda} \\ 0 & 2-\lambda & 2-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{15}$$

$$\begin{pmatrix} \lambda\sqrt{2}i & 1 & -1 \\ 0 & 2\lambda-2\lambda^2+1 & 2\lambda-1 \\ 0 & 2-\lambda & 2-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{16}$$

$$\tag{17}$$

Et on untilisera le fait que $|x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1$.
Pour $\lambda = -1$, on a

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2}i & 1 & -1 \\ 0 & -3 & -3 \\ 0 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{18}$$

$$\tag{19}$$

On a donc $z = -y$ et $y = xi/\sqrt{2}$. Le premier vecteur propre est donc de la forme

$$|\phi_1\rangle = x \begin{pmatrix} 1 \\ i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{20}$$

Et avec la condition de normalisation, on trouve

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/2 \\ -i/2 \end{pmatrix} \tag{21}$$

Pour $\lambda = 1$, on a

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2}i & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{22}$$

$$\tag{23}$$

On a donc $z = -y$ et $y = -xi/\sqrt{2}$. Le second vecteur propre est donc de la forme

$$|\phi_2\rangle = x \begin{pmatrix} 1 \\ -i/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{24}$$

Et avec la condition de normalisation, on trouve

$$|\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/2 \\ i/2 \end{pmatrix} \tag{25}$$

Pour $\lambda = 2$, on a

$$\begin{pmatrix} 2\sqrt{2}i & 1 & -1 \\ 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \tag{26}$$

$$\tag{27}$$

On a donc $z = y$ et $x = 0$. Donc,

$$|\phi_3\rangle = y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{28}$$

Et avec la condition de normalisation, on trouve

$$|\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \tag{29}$$

b)
Avec les vecteurs propres qu'on a trouvés, on peut former les matrices

$$|\phi_1\rangle\langle\phi_1| = \begin{pmatrix} 1/2 & -i/2\sqrt{2} & i/2\sqrt{2} \\ i/2\sqrt{2} & 1/4 & -1/4 \\ -i/2\sqrt{2} & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix} \tag{30}$$

$$|\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \begin{pmatrix} 1/2 & i/2\sqrt{2} & -i/2\sqrt{2} \\ -i/2\sqrt{2} & 1/4 & -1/4 \\ i/2\sqrt{2} & -1/4 & 1/4 \end{pmatrix} \tag{31}$$

$$|\phi_3\rangle\langle\phi_3| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{32}$$

On a donc bien

$$\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I \tag{33}$$

et

$$\sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \begin{pmatrix} 0 & i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 1 & 1 \\ i/\sqrt{2} & 1 & 1 \end{pmatrix} = A \tag{34}$$

Problème 3 : Mesure d'un opérateur

L'opérateur A du problème précédent est donné sous cette forme matricielle dans une certaine base $|u_i\rangle$. Supposons qu'à un certain moment, une particule se trouve dans l'état $|\psi\rangle = |u_3\rangle$.
a) Quels sont les résultats possibles d'une mesure de A et quelles sont les probabilités correspondantes?
b) Quelle est la valeur moyenne de A pour l'état $|\psi\rangle$ et quelle est la déviation standard ΔA dans cet état?

Solution

a) Les résultats d'une mesure de A sont les valeurs propres λ_i avec probabilités $|\langle\phi_i|\psi\rangle|^2$. Pour l'état

$$|\psi\rangle = |u_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{35}$$

La probabilité de mesurer $\lambda_1 = -1$ est

$$|\langle\phi_1|u_3\rangle|^2 = |-i/2|^2 = 1/4 \tag{36}$$

La probabilité de mesurer $\lambda_2 = 1$ est

$$|\langle\phi_2|u_3\rangle|^2 = |i/2|^2 = 1/4 \tag{37}$$

La probabilité de mesurer $\lambda_3 = 2$ est

$$|\langle\phi_3|u_3\rangle|^2 = |1/\sqrt{2}|^2 = 1/2 \tag{38}$$

b) La valeur moyenne de A dans l'état $|\psi\rangle = |u_3\rangle$ est simplement $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle u_3|A|u_3\rangle = A_{33} = 1$.