TD de tutorat 6 : position et impulsion en MQ

Exercice 1 : opérateurs position et impulsion

1. On utilise la relation de fermeture $\int dx' |x'\rangle\langle x'| = \mathbb{1}$:

$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}'$ et $\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x) \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{C})$

on peut identifier $\mathcal{H}'$ et $\mathcal{H}$ car les 2 espaces de Hilbert sont isomorphes : $\mathcal{H}' \simeq \mathcal{H}$

Par abus de langage on note donc

$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\Psi(x) \in \mathcal{H}$

$\{|x\rangle\}$ est une base de $\mathcal{H}'$, par abus de langage, on dit que c'est une base de $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{C})$

$\hat{X}$ est un opérateur sur $\mathcal{H}'$, par abus de langage, on dit qu'il agit sur $\mathcal{H}$

⚠ " $\{|x\rangle\}$ est une base de $\mathcal{H}'$ " est aussi un abus de langage car les $|x\rangle$ ne sont pas normalisables, mais on peut repasser à la base $\{|\tilde{x}_m\rangle\}$ en discrétisant l'espace, qui est une base (cette fois vraie) de $\mathcal{H}$. Les calculs avec $\{|x_m\rangle\}$ ou $\{|x\rangle\}$ sont exactement les mêmes

• $\langle x|\hat{x}|\Psi\rangle = \langle x|\hat{x}\,\mathbb{1}|\Psi\rangle = \left(\langle x|\hat{x}\right)\left(\int dx'\,|x'\rangle\langle x'|\right)|\Psi\rangle$

$= \int dx'\,\langle x|\hat{x}|x'\rangle\,\langle x'|\Psi\rangle$ par linéarité de $\langle\cdot|\cdot\rangle$ sur $\int dx$ (somme continue)

$= \int dx'\,\langle x|\,x'|x'\rangle\,\langle x'|\Psi\rangle$

$= \int dx'\,x'\,\langle x|x'\rangle\langle x'|\Psi\rangle$

$= \int dx'\,x'\,\delta(x-x')\,\Psi(x')$

or $\int dx'\,\delta(x-x')\,f(x') = f(x)$

avec ici $f(x') = x'\Psi(x')$

donc $\langle x|\hat{x}|\Psi\rangle = x\,\Psi(x)$

• $\langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = \left(\langle x|\hat{p}\right)\left(\int dp\,|p\rangle\langle p|\right)|\Psi\rangle$

$= \int dp\,\langle x|\hat{p}|p\rangle\langle p|\Psi\rangle$

$= \int dp\,p\,\langle x|p\rangle\langle p|\Psi\rangle$

$= \int dp\,p\,\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\tilde{\Psi}(p)$

$= \int dp\,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(e^{ipx/\hbar}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\tilde{\Psi}(p)$

$= -i\hbar\frac{d}{dx}\left(\int dp\,\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\tilde{\Psi}(p)\right)$ par linéarité de $\frac{d}{dx}$

$= -i\hbar\frac{d}{dx}\underbrace{\int dp\,\langle x|p\rangle\,\langle p|\Psi\rangle}_{=\langle x|\left(\int dp\,|p\rangle\langle p|\right)|\Psi\rangle}$

$= -i\hbar\frac{d}{dx}\left(\langle x|\Psi\rangle\right) = -i\hbar\frac{d}{dx}\Psi(x)$

donc $\langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\Psi(x)$

2. • $\langle p | \hat{P} | \psi \rangle = \int dp' \, \langle p | \hat{P} | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle$

$$= \int dp' \, p' \, \langle p | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle$$

$$= \int dp' \, p' \, \delta(p - p') \, \tilde{\psi}(p')$$

$$= p \, \tilde{\psi}(p)$$

• $\langle p | \hat{X} | \psi \rangle = \int dx \, \langle p | \hat{X} | x \rangle \langle x | \psi \rangle$

$$= \int dx \, \langle p | x | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

$$= \int dx \, x \, \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

$$= \int dx \, x \, \overline{\langle x | p \rangle} \langle x | \psi \rangle$$

$$= \int dx \, x \, \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x)$$

$$= \int dx \left(\frac{\hbar}{-i} \frac{d}{dp} \left(\frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \psi(x) \right.$$

$$= i\hbar \frac{d}{dp} \left(\int dx \, \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) \right)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dp} \left(\int dx \, \overline{\langle x | p \rangle} \langle x | \psi \rangle \right)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dp} \left(\int dx \, \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle \right)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dp} \left(\langle p | \psi \rangle \right) = i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p)$$

donc $\langle p | \hat{x} | \psi \rangle = i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p)$

3. • $\langle x|\hat{X}x'\rangle = \langle x|x'|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle = x'\delta(x-x')$

• $\langle \hat{X}x|x'\rangle = \overline{\langle x'|\hat{X}x\rangle} = \overline{\langle x'|x|x\rangle} = \overline{x\langle x'|x\rangle} = \overline{x\,\delta(x'-x)}$

$= x\,\delta(x'-x)$ car x et δ sont réels

or $\int dx'\, x'\delta(x'-x) = \int dx'\, x'\delta(x'-x) = x = x\int dx'\delta(x'-x)$

$= \int dx'\, x\,\delta(x'-x)$

donc $x'\delta(x'-x) = x\,\delta(x'-x)$

de plus δ est symétrique donc $\delta(x'-x) = \delta(x-x')$

donc $\langle \hat{X}x|x'\rangle = x'\delta(x-x') = \langle \hat{X}x|x'\rangle$

• Donc $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$

• En dimension infinie, il faut aussi définir les domaines de définition.

$\hat{X}$ est définie sur fonctions telles ques $\hat{X}|\Psi\rangle \in L^2(\mathbb{C})$ i.e. $\|\hat{X}|\Psi\rangle\|^2 = \int dx\; x^2|\Psi(x)|^2 < \infty$.

$\hat{X}^\dagger$ a le même domaine de définition, donc $\hat{X}$ est auto-adjoint, donc une observable.

• pour $\vec{P}$, on choisit de travailler sur la base $\{|p\rangle\}$

On a les mêmes relations $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ que pour x $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$

et $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$ que $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$

donc on a la même chose : $\langle p|\hat{P}p'\rangle = \langle \hat{P}p|p'\rangle$

donc $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$

• pour savoir s'il ont le même domaine de définition, il faut pour ça définir sur quel intervalle sont définies les fonction de $L^2(\mathbb{C})$

On choisit l'intervalle $[0, l]$ avec $l \in \mathbb{R}^+$ et on définit nos C.L. : $\Psi(0) = \Psi(l) = 0$

Alors, d'après le cours, exemple 2, $\vec{p}^{\dagger}$ n'a pas le même domaine de définition $(\mathcal{D}(A^{\dagger}) = \mathcal{C}^1([0,\ell]))$ que $\vec{p}$ $(\mathcal{D}(A) = \{ f \in \mathcal{C}^1[0,\ell] \, / \, f(0) = f(\ell) = 0 \})$.

↳ $\vec{p}$ n'est pas auto-adjoint, donc pas une observable.

- On peut cependant définir une extension auto-adjointe de P, qui est auto-adjointe, donc la réel observable. C'est cette observable qui est utilisée pour mesurer l'impulsion dans des expériences physiques où les particules sont sur le domaine $\{[0,2\pi] \, / \, f(0) = f(2\pi) = 0\}$

⚠ hermitien est parfois défini comme auto-adjoint, parfois juste comme $A = A^{\dagger}$, donc il faut préciser

4. $\langle x | [X,P] | \psi \rangle = \langle x | XP | \psi \rangle - \langle x | PX | \psi \rangle$

- $\langle x | XP | \psi \rangle = x \times \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x)$

en effet : $\langle x | XP | \psi \rangle = \int dx' \, dp \, dp' \, \langle x | X | x' \rangle \langle x' | p \rangle \langle p | P | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle$

en utilisant 3 fois la relation de fermeture avec x', p, p'

$$= \int dx' \, dp \, dp' \; x \, \delta(x - x') \frac{e^{ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, p \, \delta(p - p') \, \tilde{\psi}(p')$$

$$= \int dp \; x \, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, p \, \tilde{\psi}(p) \quad \text{en utilisant les propriétés de } \delta$$

$$= x \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \int dp \, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p)\right)$$

$$= x \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \int dp \, \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle\right) = x \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \langle x | \psi \rangle\right)$$

$$= x \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x)$$

de même, $\langle x | PX | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(x\psi(x)\right)$

$$= -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x)$$

donc $\langle x | [X,P] | \psi \rangle = \cancel{-i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x)} + i\hbar\psi(x) + \cancel{i\hbar x \frac{d}{dx}\psi(x)}$

$$= i\hbar\psi(x) = \langle x | i\hbar \mathbb{1} | \psi \rangle$$

vrai $\forall |x\rangle, \forall |\psi\rangle$

donc $[X,P] = i\hbar\mathbb{1}$

4. On a vu au TD de tutorat 2, exercice 3, que si $\hat{A}, \hat{B}$ commutent avec $[\hat{A},\hat{B}]$, alors $[\hat{A}, f(\hat{B})] = [\hat{A},\hat{B}]f'(\hat{B})$

ici $\hat{A} = \hat{X}$ $\hat{B} = \hat{P}$ qui commutent avec $[\hat{A},\hat{B}] = i\hbar\mathbb{1}$

donc $[\hat{X}, e^{-ia\hat{P}/\hbar}] = [\hat{X},\hat{P}]\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)e^{-ia\hat{P}/\hbar}$

$$= i\hbar\mathbb{1}\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)e^{-ia\hat{P}/\hbar} = a\, e^{-ia\hat{P}/\hbar}$$

puis $\hat{X}\left(\hat{T}(a)|x\rangle\right) = \hat{X} e^{-ia\hat{P}/\hbar}|x\rangle$

or $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A},\hat{B}]$

donc $\hat{X}\left(\hat{T}(a)|x\rangle\right) = e^{-ia\hat{P}/\hbar}\underbrace{\hat{X}|x\rangle}_{x|x\rangle} + a\, e^{-ia\hat{P}/\hbar}|x\rangle$

$$= (x+a)\, e^{-ia\hat{P}/\hbar}|x\rangle = (x+a)\left(\hat{T}(a)|x\rangle\right)$$

donc $\hat{T}(a)|x\rangle$ est bien état propre de $\hat{X}$ avec pour valeur propre $x+a$

5. Non, car on a de manière générale

$$\hat{T}(a)|x\rangle = \alpha\,|x+a\rangle \quad \text{avec } \alpha \in \mathbb{C}$$

En effet ce vecteur, et $|x+a\rangle$ sont tous les 2 vecteurs propre de $\hat{X}$ avec pour valeur propre $x+a$. De plus, les valeurs propres de $\hat{X}$ sont non-dégénérées, donc le sous espace propre est : $\{\beta|x+a\rangle / \beta \in \mathbb{C}\}$

6. • $\langle x+a|\psi\rangle$

or $|x+a\rangle = \frac{1}{\alpha}\hat{T}(a)|x\rangle = \frac{1}{\alpha}e^{-ia\hat{P}/\hbar}|x\rangle$

donc $\langle x+a| = \langle x|\frac{1}{\alpha^*}e^{+ia\hat{P}^\dagger/\hbar}$

or $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$

donc $\langle x+a| = \langle x|\frac{1}{\alpha^*}e^{+ia\hat{P}/\hbar}$

puis $\langle x+a|\psi\rangle = \langle x|\frac{1}{\alpha^*}e^{+ia\hat{P}/\hbar}|\psi\rangle$

$$= \frac{1}{\alpha^*}\langle x|e^{+ia\hat{P}/\hbar}|\psi\rangle$$

De même que Q4 pour calculer $\langle x|XP|\psi\rangle = x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)$,

on a $\langle x|e^{-ia\hat{P}/\hbar}|\psi\rangle = \exp\left(\frac{+ia}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right)\psi(x)$

$$= \exp\left(a\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)$$

donc $\langle x+a|\psi\rangle = \frac{1}{\alpha^*}\sum_n \frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)$

• $\psi(x+a) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)$

7. Or, on a $\Psi(x+a) = \langle x+a | \Psi \rangle$

donc $\frac{1}{\alpha^*} = 1$ puis $\alpha = 1$

donc $\hat{T}(a)|x\rangle = |x+a\rangle$

(On aurait aussi pû le démontrer en montrant que $\hat{T}(a)$ est unitaire $U^\dagger = U^{-1}$, donc conserve la norme)

Exercice 2 :

1. $[P, X^n] = [P, X^{n-1} \cdot X] = X^{n-1}[P,X] + [P, X^{n-1}]X$

car $[A, BC] = B[A,C] + [A,C]B$

$[P, X^n] = n\, X^{n-1}[P,X] + \underbrace{[P, \mathbb{1}]}_{=0} X$

$= -n X^{n-1}[X,P] = -i\hbar n X^{n-1}$

2. $[P,X] = -i\hbar \mathbb{1}$ commute avec P et X

puis $[P, f(X)] = [P, \sum_n b_n X^n]$ car f differentiable

$= \sum_n b_n [P, X^n] = \sum_n b_n (-i\hbar n) X^{n-1}$

$= -i\hbar \sum_n b_n\, n\, X^{n-1} = -i\hbar f'(X) = -i\hbar \frac{d}{dx} f(X)$

3. $\langle x | \hat{P} | x' \rangle = \int dp \, \langle x | \hat{P} | p \rangle \langle p | x' \rangle = \int dp \, \langle x | p | p \rangle \langle p | x' \rangle$

$= \int dp \, \underbrace{p \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{-i\hbar \frac{d}{dx}\left(\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)} \frac{e^{-ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

$$= -i\hbar \frac{d}{dx}\left(\int dp \; \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)$$

$$= -i\hbar \frac{d}{dx}\left(\int dp \; \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle \right) = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(\langle x|x'\rangle \right) = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(\delta(x-x') \right)$$

Exercice 3: paquet d'onde gaussien

1. Dans l'espace des positions $|\Psi\rangle$ s'écrit:

$\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$

or $\tilde{\Psi}(p) = \langle p|\Psi\rangle$

donc $\Psi(x) = \int dp \; \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle$

$$= \int dp \; \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\sigma}} e^{-(p-p_0)^2/(2\sigma^2)}$$

$$= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\sigma}} e^{-(p-p_0)^2/(2\sigma^2) + ipx/\hbar}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{3/2}\sigma\hbar}} e^{-p_0^2/(2\sigma^2)} \int dp \; e^{-\left(p^2 - 2pp_0 - \frac{2ipx\sigma^2}{\hbar}\right)/(2\sigma^2)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{3/2}\sigma\hbar}} e^{-p_0^2/(2\sigma^2)} \int dp \; e^{-\left(p^2 - \left(p_0 + \frac{ix\sigma^2}{\hbar}\right)\right)^2/(2\sigma^2)} e^{\left(p_0 + \frac{ix\sigma^2}{\hbar}\right)^2/(2\sigma^2)}$$

$$= \frac{e^{\left(-p_0^2 + \left(p_0 + \frac{ix\sigma^2}{\hbar}\right)^2\right)/(2\sigma^2)}}{\sqrt{2\pi^{3/2}\sigma\hbar}} \underbrace{\int dp \; e^{-\left(p^2 - \left(p_0 + \frac{ix\sigma^2}{\hbar}\right)\right)^2/(2\sigma^2)}}$$

intégrale d'une gaussienne de largeur σ, centrée en $p_0 + \frac{ix\sigma^2}{\hbar}$

$$= \sqrt{2\pi\sigma^2}$$

$$= \sqrt{\frac{\sigma}{\pi^{1/2}\hbar}} \; e^{\frac{2ip_0x\sigma^2}{2\hbar\sigma^2}} \; e^{-\frac{x^2\sigma^4}{\hbar^2 2\sigma^2}} = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi^{1/2}\hbar}} \; e^{-\frac{x^2}{2}\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2} e^{ip_0x/\hbar}$$

$\rightarrow$ gaussienne de largeur $\frac{\hbar}{\sigma}$ multipliée par une onde plane

2. $\langle X \rangle = \langle \Psi | X | \Psi \rangle = \int dx\, dx' \; \langle \Psi | x \rangle \langle x | X | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle$

$$= \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar} \int dx\, dx' \; e^{-\frac{x^2}{2}\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2} e^{-ip_0 x/\hbar} \, x' \delta(x - x') \, e^{ip_0 x'/\hbar} \, e^{-\frac{x'^2}{2}\left(\frac{\sigma^2}{\hbar}\right)}$$

$$= \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar} \int dx \; \underbrace{e^{\frac{2x^2}{2}\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2}}_{\text{symétrique}} \cdot \underbrace{x}_{\text{antisym.}} \underbrace{e^{ip_0(x-x)\hbar}}_{=1}$$

$$= \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar} \times 0$$

car on intègre x, antisymétrique, multiplié par $e^{x^2\left(\frac{\sigma^2}{\hbar}\right)}$ symétrique, entre $-\infty$ et $+\infty$

$\langle x \rangle = 0$

De même pour $\langle P \rangle$, on a $\langle P \rangle = 0$

$\longrightarrow$ normal, car les gaussiennes sont centrées en 0, donc ont pour valeur moyenne 0 pour x et p

3. $\langle \Delta X \rangle^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle$

On obtient la même intégrale avec $\langle x | X^2 | x' \rangle$ au lieu de $\langle x | X | x' \rangle$, qui est égal à $x^2 \delta(x - x')$

$$\langle X^2 \rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar} \int dx \; e^{-x^2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2} x^2$$

on intègre par partie avec $u = x$ $\quad du = 1$

$v = e^{-x^2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2}$ $\quad dv = -2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2 x \, e^{-x^2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2}$

$$\langle X^2 \rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar} \left(\frac{\hbar}{\sigma}\right)^2 \frac{1}{2} \underbrace{\int dx \; e^{-x^2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right)^2}}_{= \sqrt{2\pi} \times \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar}{\sigma}}$$

$$\langle X^2\rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\,\hbar}\left(\frac{\hbar}{\sigma}\right)^2 \frac{1}{2}\sqrt{2\pi}\times\sqrt{\frac{1}{2}}\,\frac{\hbar}{\sigma}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{\sigma}\right)^2$$

- $\langle P^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\sigma}\int dp\, e^{-(p-p_0)^2/\sigma^2}\, p^2$ de la même manière

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\sigma}\sqrt{2\pi}\sqrt{\frac{1}{2}}\,\sigma\times\frac{\sigma^2}{2} = \frac{\sigma^2}{2}$$

- On a donc $\Delta X\,\Delta P = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{\sigma}\sigma = \frac{\hbar}{2}$, on a l'égalité de l'inéquation d'Heisenberg

- On avait vu que si $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ne commutent pas,

$$\Delta A\,\Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|[A,B]\right|$$

ici $\Delta X\,\Delta P \geqslant \frac{1}{2}\left|[X,P]\right| = \frac{1}{2}|i\hbar| = \frac{\hbar}{2}$

car X et P ne commutent pas