MAP 583 - Feuille d'exercices 2

14 janvier 2014

Exercice 1 (oscillateur harmonique). On considère l'opérateur a sur $L^2(\mathbb{R})$ défini par

$$D(a) = \left\{u \in L^2(\mathbb{R}) \mid u' + xu \in L^2(\mathbb{R})\right\}, \quad \forall u \in D(a),\ (au)(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u'(x) + xu(x)\right).$$

1a. Calculer l'adjoint $a^\dagger$ de a. Vérifier que $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ est stable par a et $a^\dagger$.

1b. Calculer le commutateur $[a^\dagger, a] = a^\dagger a - a a^\dagger$ sur $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.

1c. Expliciter l'action sur $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ de l'opérateur

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}.$$

1d. Montrer que H, défini sur $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, est un opérateur symétrique sur $L^2(\mathbb{R})$ et admet une extension de Friedrichs, encore notée H pour simplifier les notations.

1e. On considère la famille de fonctions de $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ définie par

$$\phi_0(x) = \pi^{-1/4}\, e^{-x^2/2}, \qquad \phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \phi_0.$$

Montrer que $a\phi_0 = 0$ et que pour tout $n \in \mathbb{N}$, $[(a^\dagger)^n, a] = -n(a^\dagger)^{n-1}$. Montrer que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad H\phi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\phi_n.$$

En déduire que $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ forme une famille orthonormale de fonctions de $L^2(\mathbb{R})$.

1f. Soit $g \in L^2(\mathbb{R})$ et f_g la fonction de $\mathbb{C}$ dans $\mathbb{C}$ définie par

$$\forall z \in \mathbb{C}, \quad f_g(z) = \int_{\mathbb{R}} g(x)\phi_0(x)e^{xz}\, dx.$$

Montrer que f_g est une fonction analytique.

1g. Soit g une fonction de $L^2(\mathbb{R})$ orthogonale à l'espace engendré par les $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Montrer que la fonction f_g et toutes ses dérivées successives sont nulles en 0. En déduire que $g = 0$. Quelle propriété concernant la famille $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ce résultat implique-t-il ?

1h. On pose $\mathcal{N} := a^\dagger a$. Calculer $a\phi_n$, $a^\dagger\phi_n$ et $\mathcal{N}\phi_n$. Les opérateurs a, $a^\dagger$ et $\mathcal{N}$ sont appelés respectivement opérateur d'annihilation, opérateur de création et opérateur nombre. Justifier ces dénominations.

Exercice 2 (relation de commutation canonique).

Dans cet exercice, $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert séparable.

2a. Montrer qu'il n'existe pas d'opérateurs auto-adjoints bornés P et Q sur $\mathcal{H}$ vérifiant la relation de commutation canonique

$$[P, Q] = -i. \tag{1}$$

Indication : raisonner par l'absurde en supposant P et Q bornés et calculer $[P^n, Q]$.

2b. On considère les opérateurs x (position) et p (impulsion) sur $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ définis par

$$D(x) = \left\{u \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \mid xu(x) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\right\} \quad \text{et} \quad \forall u \in D(x),\ (xu)(x) = xu(x),$$

$$D(p) = H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \quad \text{et} \quad \forall u \in D(p),\ pu = -iu',$$

On rappelle que ces deux opérateurs sont auto-adjoints sur $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ (voir feuille d'exercices 1). Vérifier que $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ est stable pour ces deux opérateurs et que sur $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, $[p, x] = -i$.

2c. Expliciter l'action sur $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ des opérateurs $U_x(t) = e^{-itx}$ et $U_p(t) = e^{-itp}$ ($t \in \mathbb{R}$). Vérifier que

$$\forall (s, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \quad U_p(s)U_x(t) = e^{its}U_x(t)U_p(s).$$

2d. On dit que deux opérateurs auto-adjoints P et Q sur $\mathcal{H}$ vérifient les relations de Weyl si les groupes fortement continus d'opérateurs unitaires $(U_P(t))_{t\in\mathbb{R}}$ et $(U_Q(t))_{t\in\mathbb{R}}$ ($U_P(t) = e^{-itP}$ et $U_Q(t) = e^{-itQ}$) si

$$\forall (s, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \quad U_P(s)U_Q(t) = e^{its}U_P(t)U_Q(s). \tag{2}$$

2e. Commenter le résultat suivant :

Theorem 1 (von Neumann)**.** *Soit P et Q deux opérateurs auto-adjoints sur un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$ vérifiant les relations de Weyl. Alors il existe une suite (finie ou infinie) de sous-espaces fermés $(\mathcal{H}_j)_{j\in J}$ de $\mathcal{H}$ (avec J égal à un ensemble fini ou à $\mathbb{N}$) tels que*

1. *$\mathcal{H}$ est somme directe orthogonale des $\mathcal{H}_j$:*
$$\mathcal{H} = \bigoplus_{j\in J} \mathcal{H}_j;$$
2. *les $\mathcal{H}_j$ sont stables pour les groupes $(U_P(t))_{t\in\mathbb{R}}$ et $(U_Q(t))_{t\in\mathbb{R}}$:*
$$\forall j \in J, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad U_P(t) : \mathcal{H}_j \to \mathcal{H}_j \quad \text{et} \quad U_Q(t) : \mathcal{H}_j \to \mathcal{H}_j;$$
3. *pour chaque $j \in J$, il existe un opérateur unitaire $T_j : \mathcal{H}_j \to L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ tel que*
$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad T_j U_P(t) T_j^{-1} = U_p(t), \quad T_j U_Q(t) T_j^{-1} = U_x(t).$$

2f. Déduire du théorème ci-dessus que si P et Q sont deux opérateurs auto-adjoints sur $\mathcal{H}$ vérifiant les relations de Weyl, alors il existe un sous-espace $D \subset \mathcal{H}$ tel que

1. D est dense dans $\mathcal{H}$, $D \subset D(P) \cap D(Q)$, et D est stable par P et Q ;
2. P et Q vérifient les relations de commutation canoniques (1) sur D ;
3. $P|_D$ et $Q|_D$ sont essentiellement auto-adjoints sur $\mathcal{H}$.

Attention : la réciproque de ce résultat est fausse. On peut trouver deux opérateurs auto-adjoints P et Q sur $\mathcal{H}$ vérifiant les trois conditions ci-dessus, mais pas les relations de Weyl.

Exercice 3 (physique statistique quantique).

On considère un système quantique dont l'ensemble des états purs est en bijection avec l'espace projectif $\mathcal{H}/\mathbb{C}$ où $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert séparable de dimension infinie, et on note H l'Hamiltonien de ce système (l'observable associée à l'énergie), que l'on suppose borné inférieurement (i.e. $\min(\sigma(H)) > -\infty$).

3a. On appelle état mixte un état du système décrit par un opérateur D sur $\mathcal{H}$, appelé matrice densité, et vérifiant

$$D \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}) \cap \mathcal{S}(\mathcal{H}), \quad 0 \leq D \leq 1, \quad \mathrm{Tr}\,(D) = 1. \tag{3}$$

Montrer qu'il existe une suite décroissante de réels $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et une base hilbertienne $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ tel que (en utilisant la notation bra-ket de Dirac),

$$D = \sum_{n\in\mathbb{N}} p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|, \quad 0 \leq p_n \leq 1, \quad \sum_{n\in\mathbb{N}} p_n = 1.$$

D'un point de vue physique, p_n s'interprète comme la probabilité que le système soit dans l'état pur caractérisé par ψ_n.

3b. Soit $\widetilde{A}$ une grandeur physique relative au système considéré pour laquelle l'observable A associée est un opérateur auto-adjoint borné sur $\mathcal{H}$. Exprimer l'espérance $\langle A\rangle_D$ et la variance de la mesure de la grandeur physique $\widetilde{A}$ lorsque le système est dans l'état mixte D, en fonction des opérateurs A et D.

3c. Considérons maintenant le cas où l'observable A est un opérateur positif, mais pas nécessairement borné. A quelle condition sur D l'espérance de $\widetilde{A}$ est-elle finie ?

3d. On note

$$\Gamma = \{D \in \mathfrak{S}_1(\mathcal{H}) \cap \mathcal{S}(\mathcal{H}) \mid 0 \leq D \leq 1,\ \mathrm{Tr}\,(D) = 1\}$$

l'ensemble des matrices densité. Montrer que Γ est un ensemble convexe. Montrer que la fonctionnelle d'entropie $S : \Gamma \to [0, +\infty]$ définie par

$$\forall D \in \Gamma, \quad S(D) = -k_{\mathrm{B}} \mathrm{Tr}\,(D \ln D),$$

où k_{B} est la constante de Boltzmann, est strictement concave.

3e. Montrer que les minima de S sont les points extrémaux de Γ. A quels états physiques correspondent ces points ?

3f. On suppose que H est à résolvante compacte et qu'il existe des constantes $C \in \mathbb{R}$, $\alpha > 0$ et $\gamma > 0$ telles que la suite croissante $(E_n)_{n\in\mathbb{N}}$ des valeurs propres de H comptées avec leur multiplicité vérifie

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad E_n \geq C + \alpha n^\gamma.$$

Pour $E \in [\min(\sigma(H)), +\infty[$, on considère le problème d'optimisation

$$s(E) = \sup\left\{S(D) \mid D \in \Gamma,\ \langle H\rangle_D = E\right\}. \tag{4}$$

Montrer que l'ensemble de minimisation est non vide, et donner une interprétation physique de ce problème. A quelle condition sur les valeurs propres de H, la quantité positive $s(E)$ est-elle finie ? Montrer que si $s(E) < \infty$, le problème (4) admet un unique maximiseur, que l'on caractérisera.

Calcul fonctionnel et inégalités de trace.

Dans toute cette note, $\mathcal{H}$ désigne un espace de Hilbert séparable. Si A et B sont deux opérateurs auto-adjoints bornés sur $\mathcal{H}$, la notation $A \leq B$ signifie que l'opérateur $B - A$ est positif, autrement dit que

$$\forall u \in \mathcal{H}, \quad \langle u|Au\rangle \leq \langle u|Bu\rangle.$$

Soit I un intervalle de $\mathbb{R}$ et $f : I \to \mathbb{R}$ une fonction continue.

1. On dit que la fonction f est croissante au sens des opérateurs (*operator monotone increasing*) si pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ tels que $\sigma(A)$ et $\sigma(B)$ soient inclus dans I, on a
$$A \leq B \quad \Rightarrow \quad f(A) \leq f(B).$$
On dit que f est décroissante au sens des opérateurs si $-f$ est croissante au sens des opérateurs.

2. On dit que la fonction f est convexe au sens des opérateurs (*operator convex*) si pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ tels que $\sigma(A)$ et $\sigma(B)$ soient inclus dans I, on a
$$\forall t \in]0,1[, \quad f(tA + (1-t)B) \leq tf(A) + (1-t)f(B).$$
On dit que f est concave au sens des opérateurs si $-f$ est convexe au sens des opérateurs.

Il faut prendre garde au fait qu'une fonction croissante (resp. convexe) au sens usuel n'est pas, en général, croissante (resp. convexe) au sens des opérateurs. Par exemple, la fonction $f(t) = t^2$ définie sur $\mathbb{R}_+$ est croissante au sens usuel, mais n'est pas croissante au sens des opérateurs, tandis que la fonction $f(t) = t^3$ définie sur $\mathbb{R}_+$ est convexe au sens usuel mais n'est pas convexe au sens des opérateurs :

$$\text{Contre-exemple :} \qquad \mathcal{H} = \mathbb{R}^2, \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On a cependant les résultats suivants.

Theorem 2 (Löwner-Heinz)**.**

1. *Pour $-1 \leq p \leq 0$, la fonction $f(t) = t^p$ définie sur $\mathbb{R}_+^*$ est décroissante et convexe au sens des opérateurs.*

2. *Pour $0 \leq p \leq 1$, la fonction $f(t) = t^p$ définie sur $\mathbb{R}_+$ est croissante et convexe au sens des opérateurs.*

3. *Pour $1 \leq p \leq 2$, la fonction $f(t) = t^p$ définie sur $\mathbb{R}_+$ est convexe au sens des opérateurs.*

4. *La fonction $f(t) = \ln(t)$ définie sur $\mathbb{R}_+^*$ est croissante et concave au sens des opérateurs.*

5. *La fonction $f(t) = t\ln(t)$ définie sur $\mathbb{R}_+$ est convexe au sens des opérateurs.*

Theorem 3 (convexité et monotonicité de la fonction trace)**.** *Soit $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction continue.*

1. *Si f est croissante, on a pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H}) \cap \mathcal{K}(\mathcal{H})$,*

$$A \leq B \quad \Rightarrow \quad \mathrm{Tr}\,(f(A)) \leq \mathrm{Tr}\,(f(B)) \text{ lorsque les deux traces ont un sens.}$$

2. *Si f est convexe, on a pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H}) \cap \mathcal{K}(\mathcal{H})$,*

$$\forall t \in]0,1[, \quad \mathrm{Tr}\,(f(tA+(1-t)B)) \leq t\mathrm{Tr}\,(f(A))+(1-t)\mathrm{Tr}\,(f(B)), \text{ lorsque cette expression a un sens,}$$

   et l'inégalité est stricte si f est strictement convexe.

Theorem 4 (Klein)**.**

1. *Soit $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction dérivable et convexe. Alors pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$,*

$$\mathrm{Tr}\,\big(f(A) - f(B) - (A-B)f'(B)\big) \geq 0, \text{ lorsque cette expression a un sens.}$$

   De plus, si f est strictement convexe, il y a égalité si et seulement si $A = B$.

2. *Soit $f : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ une fonction convexe (donc continue), dérivable sur $\mathbb{R}_+^*$. Alors pour tout A et B dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ tels que $A \geq 0$ et $B \geq 0$,*

$$\mathrm{Tr}\,\big(f(A) - f(B) - (A-B)f'(B)\big) \geq 0, \text{ lorsque cette expression a un sens.}$$

   De plus, si f est strictement convexe, il y a égalité si et seulement si $A = B$.