PHY310aA - TD 4

Opérateurs, commutateurs, valeurs et vecteurs propres

1. Opérateurs

a) $\phi_1(x) = H\,\psi_1(x) = -\dfrac{d^2}{dx^2}\psi_1 + x^2\psi_1 = -\dfrac{d^2}{dx^2}(e^{-x2/2}) + x^2 . e^{-x2/2}$

$\phi_1(x) = (1 - x^2)\, e^{-x2/2} + x^2 . e^{-x2/2} = e^{-x2/2}$

d'où $H\,\psi_1(x) = \psi_1(x)$

$\phi_2(x) = H\,\psi_2(x) = -\dfrac{d^2}{dx^2}\psi_2 + x^2\psi_2 = -\dfrac{d^2}{dx^2}(4x^2 - 2)\, e^{-x2/2} + x^2(4x^2 - 2)\, e^{-x2/2}$

$\phi_2(x) = -(4x^4 - 22x^2 + 10)\, e^{-x2/2} + (4x^4 - 2x^2)\, e^{-x2/2} = 5(4x^2 - 2)\, e^{-x2/2}$

d'où $H\,\psi_2(x) = 5\,\psi_2(x)$

b) Dans les 2 cas, la fonction $\psi(x)$ vérifie l'équation aux valeurs propres de l'opérateur H.

Les fonctions ψ_1 et ψ_2 sont donc des fonctions propres de l'opérateur H et les valeurs propres associées sont respectivement 1 et 5.

En fait on retrouve à un facteur ½ près (dans la définition du potentiel et de l'énergie cinétique) l'oscillateur harmonique, de valeurs propres (n+1/2) en unités réduites et de vecteurs propres Hn(x)e^(-x^2/2) avec Hn(x) polynôme d'Hermite

2. Valeurs propres, commutateurs

a) Les valeurs propres λ des matrices σ s'obtiennent à l'aide de l'équation caractéristique

Det $[\sigma - \lambda I] = 0$ I étant la matrice unité,

soit $|\sigma_x - \lambda_x I| = \begin{vmatrix} -\lambda_x & 1 \\ 1 & -\lambda_x \end{vmatrix} = 0$ $\lambda_x^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_x = \pm 1$

de même $|\sigma_y - \lambda_y I| = \begin{vmatrix} -\lambda_y & -i \\ i & -\lambda_y \end{vmatrix} = 0$ $\lambda_y^2 + i^2 = 0 \Rightarrow \lambda_y = \pm 1$

et $|\sigma_z - \lambda_z I| = \begin{vmatrix} 1-\lambda_z & 0 \\ 0 & -1-\lambda_z \end{vmatrix} = 0$ $(1 - \lambda_z)(1 + \lambda_z) = 0$

d'où $\lambda_z = \pm 1$ Cela se voit sur la matrice qui est déjà diagonale

On peut noter que $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z = \pm 1$ Les valeurs propres sont réelles car les matrices sont hermitiques (égales à la transposée de leur conjuguée complexe)

Le vecteur propre $|\psi_x(x_1, x_2)\rangle$ correspondant à $\lambda_x = 1$ s'obtient par l'équation

$$\sigma_x \psi_x - \lambda_x \psi_x = 0$$

d'où le système d'équations : $\begin{cases} -x_1 + x_2 = 0 \\ x_1 - x_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow x_1 = x_2$

avec x1 arbitraire par exemple x1=1 le vecteur propre est simplement

$$v1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dans le cas où $\lambda_x = -1$, le système d'équations devient :

$$x_1 + x_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1 = -x_2$$

et le vecteur propre est $|\psi_x(x_1, -x_1)\rangle$.

on obtient finalement les coordonnées des vecteurs propres $A = \begin{pmatrix} 1 & 1. \\ 1. & -1. \end{pmatrix}$ On peut vérifier que $A^{-1}\sigma_x A$ est une matrice diagonale et que A est une matrice orthogonale (les vecteurs propres sont mutuellement orthogonaux, sa transposée est donc son inverse)

Pour $\lambda_y = 1$, le système d'équations est : $\begin{cases} -y_1 - i\,y_2 = 0 \\ i\,y_1 - y_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow y_2 = i\,y_1$

d'où le vecteur propre est $|\psi_y(y_1, -i\,y_1)\rangle$.

De même pour $\lambda_y = -1$, $y_1 - i\,y_2 = 0 \Rightarrow y_2 = -i\,y_1$

et le vecteur propre associé $|\psi_y(y_1, i\,y_1)\rangle$.

Pour $\lambda_z = 1$, $z_2 = 0 \Rightarrow |\psi_z(z_1, 0)\rangle$.

Et pour $\lambda_z = -1$, $z_1 = 0 \Rightarrow |\psi_z(0, z_2)\rangle$.

b) Le commutateur $[\sigma_x, \sigma_y]$ s'obtient en développant $\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x =$

$$= \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = 2i\,\sigma_z$$

De même, le commutateur $[\sigma_y, \sigma_z] = \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y =$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 2i \\ 2i & 0 \end{pmatrix} = 2i\,\sigma_x$$

Et enfin, le commutateur $[\sigma_x , \sigma_z] = \sigma_x \sigma_z - \sigma_z \sigma_x =$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = -2\, i\, \sigma_y$$

Les matrices de Pauli constituent ainsi une algèbre de Lie qui n'est pas sans rappeler les opérations sur le produit vectoriel (permutation circulaire de x,y,z au signe près) : ainsi,

Si x et y sont présents, on voit apparaître z, si x et z sont présents, on voit –y. C'est normal car ces matrices sont associées au spin ½ de l'électron en mécanique quantique, qui correspond à un moment cinétique intrinsèque et donc à un produit vectoriel (l=r X p). Dans l'exercice le facteur ½ a été supprimé ; néanmoins les valeurs propres des opérateurs de spin dans 3 directions orthogonales sont évidemment + ou – ½ pour un spin ½.