Mécanique Quantique I, Série 1

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Cette série contient une partie du bagage mathématique qui sera utilisé durant ce cours. L'ensemble des notions présentées ici a déjà été rencontré dans les cours des années précédentes, dans une formulation sans doute un peu différente.

En plus de faire un rappel et de travailler avec des objets qui nous seront utiles plus tard, cette série vous permet également d'évaluer votre niveau en mathématiques et en calcul. S'il vous semble insuffisant, nous sommes à votre disposition pour répondre à vos questions. Certains éléments de démonstration utilisés dans les corrigés des exercices dépassent l'objectif du cours ; ces éléments ont néanmoins vocation à laisser entrevoir la précision que nécessiteraient des raisonnements rigoureux.

Exercice 1 : Diagonalisation

Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice suivante (si ces derniers existent) :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Exercice 2 : Commutateurs et matrices de Pauli

1. Avec la définition du commutateur $[A, B] \equiv AB - BA$ montrer que :
   — $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$
   — $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
   — $[\lambda A, B] = \lambda[A, B]$
   où A, B et C sont des opérateurs (matrices), et λ un nombre.
2. Soient les matrices de Pauli [1]

   $$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

   Démontrer l'égalité suivante :

   $$\sigma_i \sigma_j = \mathbb{1}\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k,$$

   où l'on a introduit le symbole de Levi-Civita défini par : $\epsilon_{ijk} = 1$ si $(ijk) = (123), (231), (312)$; $\epsilon_{ijk} = -1$ si $(ijk) = (132), (213), (321)$; $\epsilon_{ijk} = 0$ autrement. En déduire les relations de commutation suivantes :

   $$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

3. Pour chacune des matrices de Pauli, trouver les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés $\langle v|v\rangle = (\vec{v}^\dagger \cdot \vec{v}) = 1$.
4. On appelle "valeur" d'une matrice hermitienne $M = M^\dagger$ sur un vecteur normalisé $\vec{v}$ la quantité suivante :

   $$M\big|_v = \langle v|M|v\rangle = (\vec{v}^\dagger \cdot M \cdot \vec{v})$$

   Calculer :
   — La valeur de σ_3 sur chacun des vecteurs propres de $\sigma_3 \equiv \{v_i^3\}_{i=1,2}$
   — La valeur de σ_3 sur les vecteurs propres de $\sigma_2 \equiv \{v_i^2\}_{i=1,2}$
   — La valeur de σ_2 sur $\{v_i^2\}_{i=1,2}$

1. Ces matrices vont revenir de façon récurrente dans les cours de physique. Ce sont les générateurs du groupe $SU(2)$ qui décrit, entre autre, le spin des particules élémentaires ou encore la théorie électro-faible.

5. On verra plus tard dans le cours l'importance que prend l'exponentielle d'une matrice, définie par la série
$$e^M \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M^n}{n!}$$
Afin de se familiariser avec ces objets, calculer :
— $\exp(i\alpha\sigma_3)$
— $\exp(i\alpha\sigma_2)$
6. Finalement, on aimerait comprendre comment ces exponentielles agissent sur les vecteurs. Pour cela, appliquer $\exp(i\alpha\sigma_3)$ à v_1^3 et le décomposer sur $\left\{v_i^3\right\}_{i=1,2}$. Ce que nous entendons par là, c'est de trouver les coefficients c_1 et c_2 dans :
$$\exp(i\alpha\sigma_3) \cdot v_1^3 = c_1 v_1^3 + c_2 v_2^3$$
Pour y parvenir, on peut utiliser l'orthonormalité des vecteurs propres. Faire de même avec :
— $\exp(i\alpha\sigma_2)$ appliqué à v_1^2 et décomposer le résultat sur $\left\{v_i^2\right\}_{i=1,2}$
— $\exp(i\alpha\sigma_3)$ appliqué à v_2^3 et décomposer le résultat sur $\left\{v_i^2\right\}_{i=1,2}$
— $\exp(i\alpha\sigma_2)$ appliqué à v_1^3 et décomposer le résultat sur $\left\{v_i^3\right\}_{i=1,2}$
— $\exp(i\alpha\sigma_2)$ appliqué à v_1^2 et décomposer le résultat sur $\left\{v_i^2\right\}_{i=1,2}$

Exercice 3 : La "fonction" δ

Rappelons d'abord quelques définitions au sujet de la "fonction" $\delta(x)$:
— La fonction généralisée (ou distribution) $\delta_{x_0} = \delta(x - x_0)$ est définie par
$$\int_{\mathbb{R}} dx\, \phi(x)\delta(x - x_0) = \phi(x_0)$$
pour toute fonction $\phi(x)$ infiniment dérivable et à support dans un intervalle fermé et borné ; δ_{x_0} est l'application linéaire qui à toute fonction ϕ continue fait correspondre sa valeur ϕ_{x_0} en x_0 ; ϕ est appelée *fonction test*.
— Soit $f_\epsilon(x)$ une suite de fonctions. On dit que $f_\epsilon(x - x_0) \to \delta(x - x_0),\ \epsilon \to 0$ (limite au sens des distributions) si pour toute fonction test ϕ,
$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_{\mathbb{R}} dx\, \phi(x) f_\epsilon(x - x_0) = \phi(x_0)$$
— La $n^{\text{ième}}$ dérivée $\delta^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n}\delta(x)$ de $\delta(x)$ est définie par
$$\int_{\mathbb{R}} dx\, \phi(x)\delta^{(n)}(x - x_0) = (-1)^n \phi^{(n)}(x_0)$$

1. Soit $f(x)$ une fonction intégrable telle que $\int f(x)dx = 1$ et $f_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon} f\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$. Montrer que
$$f_\epsilon(x - x_0) \to \delta(x - x_0), \quad \epsilon \to 0.$$
Indications : pour une preuve, on pourra utiliser le théorème de convergence dominée, qui stipule que si $f_n(x)$ est une suite de fonctions telle que $\lim_{n\to\infty} f_n(x)$ existe pour presque tout x (convergence simple) et s'il existe $g(x)$ telle $\int dx g(x) < \infty$ et que $|f_n(x)| < g(x)$ pour tout n et tout x, alors $\lim_{n\to\infty} \int dx f_n(x) = \int dx \lim_{n\to\infty} f_n(x)$. Des constructions souvent rencontrées de $f_\epsilon(x - x_0)$ sont
$$\frac{1}{\epsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\epsilon^2}},\ \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{(x-x_0)^2+\epsilon^2},\ \frac{1}{\pi}\frac{\sin\left(\frac{x-x_0}{\epsilon}\right)}{x-x_0}.$$

2. Soit la fonction de Heaviside
$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases}$$
Montrer que
$$\frac{1}{\epsilon}(\theta(x+\epsilon) - \theta(x)) \to \delta(x), \ \epsilon \to 0.$$
On écrit alors formellement $\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x)$.
3. Etablir les propriétés
   (a)
$$\delta(x) = \delta(-x), \ \delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \ (a \neq 0)$$
   (b) Si $g(x)$ est une fonction dérivable qui s'annule aux points x_n avec $g'(x_n) \neq 0$
$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|}\delta(x - x_n)$$

Exercice 4 : La transformée de Fourier sur $\mathbb{R}$

Soit $f(x)$ une fonction intégrable ($\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty$). On appelle alors *transformée de Fourier* de f la fonction notée $\tilde{f}$ définie par :
$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} f(x)$$
Montrer
1. (a) $\widetilde{f^*}(k) = \left(\tilde{f}(-k)\right)^*$
   (b) Si $f_y(x) = f(x+y)$, $\tilde{f}_y(k) = e^{iky}\tilde{f}(k)$.
   (c) Si $f(x)$ est n fois dérivable avec $f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x) \to 0$, $x \to \pm\infty$
$$\widetilde{f^{(n)}}(k) = (ik)^n \tilde{f}(k)$$
   Indications : on supposera que f et ses dérivées s'annulent à l'infini (ce qui n'est pas garanti par la seule intégrabilité).
2. Si $h(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dy\, f(x-y)\, g(y)$ est la *convolution* de deux fonctions intégrables,
$$\tilde{h}(k) = \tilde{f}(k)\tilde{g}(k) \quad \text{(théorème de la convolution)}$$
3. Transformées de Fourier intéressantes :
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} e^{-\frac{1}{2}ax^2} = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-\frac{k^2}{2a}} \ , \quad a > 0,$$
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} e^{-a|x|} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{a^2 + k^2} \ , \quad a > 0.$$
   Montrer de là que
$$h_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk\, e^{ikx} e^{-\epsilon^2 \frac{k^2}{2}} \to \delta(x) \ , \quad \epsilon \to 0$$
   (on écrit alors formellement $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk\, e^{ikx}$).
4. Transformée de Fourier inverse
   (a) Si $\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} f(x)$, établir
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk\, e^{ikx} \tilde{f}(k)$$

(b) Etablir la relation de Parseval

$$\int dx\, f(x)^* g(x) = \int dk \tilde{f}(k)^* \tilde{g}(k)$$

5. Transformée de Fourier sur $\mathbb{R}^3$
Si $f(\mathbf{x})$ est une fonction sur $\mathbb{R}^3$, on définit sa transformée de Fourier par

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{x}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$$

et les propriétés établies sur $\mathbb{R}$ se généralisent sans difficulté. Montrer

(a)

$$(\tilde{\Delta f})(\mathbf{k}) = -|\mathbf{k}|^2 \tilde{f}(\mathbf{k}).$$

où $\Delta f = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) f(\mathbf{x})$ est le laplacien de f.

(b)

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{4\pi}{|\mathbf{k}|^2} = \frac{(2\pi)^{3/2}}{r}\ , \quad r = |\mathbf{x}|$$

$$\left(\text{rappel : } \int_0^\infty dx\, \frac{\sin x}{x} = \frac{\pi}{2}\right)$$

6. Lien avec la physique.
Cette partie de l'exercice est un peu en avance sur le cours, mais il nous a semblé que c'était néanmoins le bon endroit pour le mettre, sachant qu'il est toujours possible de le mettre de côté et le reprendre plus tard. Nous laissons volontairement de côté les normalisations.

Une fonction d'onde dans l'espace réel, unidimensionnel, est décrite par une fonction de carré intégrable $\psi(x)$, $\int |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x < \infty$. Le produit scalaire avec une autre fonction d'onde est défini par :

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int \phi^*(x) \psi(x) \mathrm{d}x$$

De plus, nous savons qu'une particule avec une impulsion k_0 est donnée par une onde plane

$$\phi_{k_0}(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} k_0 x\right)$$

On en déduit que la transformée de Fourier est simplement une décomposition de la fonction d'onde sur la base des ondes planes, à un facteur $\hbar$ près :

$$\tilde{\psi}(k/\hbar) = \langle \phi_k | \psi \rangle$$

La forme de $|\tilde{\psi}(k)|$ indique donc quelles impulsions composent la fonction d'onde.

En utilisant l'ensemble des résultats déduits plus haut, répondre aux questions suivantes :
— Trouver et interpréter $\tilde{\phi}_{k_0}(k)$.
— On définit $\psi_{[a,b]} = \theta(x-a) - \theta(x-b)$. Trouver et esquisser $\tilde{\psi}_{[-L,L]}(k)$.
— On considère un paquet d'onde de dispersion Δ se déplaçant avec une impulsion moyenne k_0 : $\psi_{\Delta,k_0} = \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\Delta^2} + \frac{i}{\hbar} k_0 x\right)$. Trouver et esquisser $\tilde{\psi}_{\Delta,k_0}(k)$.