Physique quantique appliquée

Travaux dirigés n°2. Bases de l'espace des états

On rappelle que le produit scalaire des deux états $|f\rangle$ et $|g\rangle$, décrits par les fonctions d'ondes $f(x)$ et $g(x)$ est noté $\langle f|\, g\rangle$ et que, dans les problèmes à une dimension, son expression est $\langle f|\, g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(x)\, g(x)\, dx$ où $\bar{f}(x)$ est le complexe conjugué de $f(x)$.

A- Bases continues de l'espace des états

On note $\delta(x-a) = \delta_a(x)$ la fonction généralisée de Dirac de pole a et on définit $u_k(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ où k est un indice réel continu, $k \in (-\infty, +\infty))$.

Exercice 1

1a- Exprimer $\langle \delta_\alpha\, |\delta_\beta\rangle$, $\langle \delta_\alpha\, |u_k\rangle$ et $\langle u_k\, |\delta_\beta\rangle$.

1b- Déterminer $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta''(x-a)\, dx$ où δ'' est la dérivée seconde de δ.

1c- Représenter le graphe de la fonction $Y_a(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta_a(t)\, dt$.

1d- Calculer $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(ax)\, \psi(x)\, dx$. En déduire l'expression de $\delta(ax)$. On distinguera deux cas suivant le signe de a.

Exercice 2

Soit $|v_\lambda\rangle$ une base de l'espace des états dépendant de l'indice continue, $\lambda \in (-\infty, +\infty)$. Cette base est orthonormé au sens suivant : $\langle v_\alpha|\, v_\beta\rangle = \delta(\alpha - \beta)$.
On considère la décomposition des états $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ sur la base $\{|v_\lambda\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} C_{(\lambda)}\ |v_\lambda\rangle\ d\lambda \text{ et } \quad |\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} K_{(\mu)}\ |v_\mu\rangle\ d\mu$$

2a- Exprimer la fonction d'onde $\psi(x)$ de l'état $|\psi\rangle$ en fonction de la fonction d'onde $v_\mu(x)$ de l'état $|v_\mu\rangle$. Calculer $\langle v_\alpha|\, \psi\rangle$.

2b- Démontrer que le produit scalaire $\langle \psi|\, \varphi\rangle$ est l'intégrale d'une quantité que l'on exprimera en fonction de $C_{(\lambda)}$ et $K_{(\lambda)}$ et de leurs conjugués complexes.

Exercice 3

On admet que $\{|u_k\rangle\}$ forme une base orthonormée de l'espace des états.
On définit la transformée de Fourier, $\tilde{\psi}(k)$, de la fonction d'onde $\psi(x)$ par la relation

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\ e^{-ikx} dx$$

Exprimer $\tilde{\psi}(k)$ sous la forme d'un produit scalaire.
Donner la décomposition de $|\psi\rangle$ sur la base $\{|u_k\rangle\}$. Exprimer les "coefficients de cette décomposition" en fonction de $\tilde{\psi}(k)$.

B- Bases discrètes de l'espace des états accessibles

Exercice 1

On considère une base discrète, orthonormée de l'espace des états : $\{|u_k\rangle\}$ où k est un élément arbitraire de l'ensemble des entiers positifs : $k = 1, 2, etc.$

1a- Exprimer le produit scalaire $\langle u_n | u_m\rangle$ en fonction du symbole de Kronecker δ_{nm} défini par les relations $\delta_{nm} = \begin{cases} 1 \text{ pour } n = m \\ 0 \text{ pour } n \neq m \end{cases}$

1b- Une fonction d'onde se développe sous la forme $\psi(x) = \sum_n C_n u_n(x)$. Exprimer C_n sous la forme d'un produit scalaire.

1c- On pose $\varphi(x) = \sum_n K_n u_n(x)$. Exprimer le produit scalaire $\langle \varphi | \psi\rangle$ en fonction de C_n, K_n et leurs conjugués complexes.

Physique quantique appliquée

Travaux dirigés n°2. Bases de l'espace des états

A- Bases continues de l'espace des états

Exercice 1

On rappelle la relation $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x) f(x) dx = f(\alpha)$.

1a- • $\langle \delta_\alpha | \delta_\beta \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x)\, \delta_\beta(x)\, dx$. En considérant $\delta_\beta(x)$ comme une "fonction ordinaire" il vient $\boxed{\langle \delta_\alpha | \delta_\beta \rangle = \delta_\beta(\alpha) = \delta(\alpha - \beta) = \delta(\beta - \alpha)}$ (car les roles de $\delta_\beta(x)$ et $\delta_\alpha(x)$ peuvent être échangés).

• $\langle \delta_\alpha | u_k \rangle = u_k(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\alpha}$

• $\langle u_k | \delta_\beta \rangle = \overline{\langle \delta_\beta | u_k \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik\beta}$

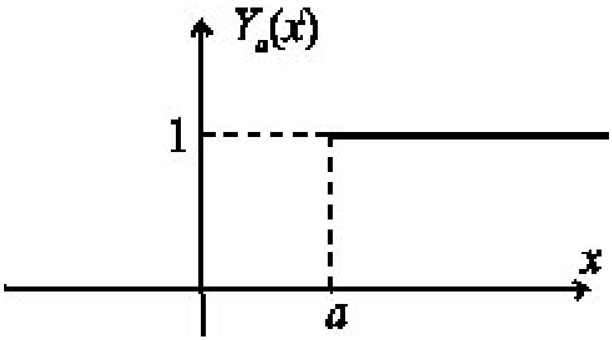
En résumé :

$$\boxed{\langle \delta_\alpha | u_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\alpha} et \ \langle u_k | \delta_\beta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik\beta}}$$

1b- $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta''(x-a)\, dx = [f(x)\delta'(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} f'(x)\delta'(x-a)\, dx = -\int_{-\infty}^{+\infty} f'(x)\delta'(x-a)\, dx$
$-\int_{-\infty}^{+\infty} f'(x)\delta'(x-a)\, dx = -[f'(x)\delta(x)]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} f''(x)\delta(x-a)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f''(x)\delta(x-a)\, dx$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta''(x-a)\, dx = f''(a)}$$

1c- $Y_a(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta_a(t)\, dt$. $\delta_a(t) = 0$ pour $t < a \Rightarrow \int_{-\infty}^{x} \delta_a(t)\, dt = 0 = Y_a(x)$ pour $x < a$.
Pour $x > a$ il vient $\int_{-\infty}^{x} \delta_a(t)\, dt = 1$. D'ou le graphe de la fonction



Y_a n'est pas définie en $x = a$. On pose souvent $Y_a(a) = 1/2$.

1d- Effectuons le changement de variable $u = ax$.

• $a > 0$ il vient $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(ax)\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u)\, \psi\left(\frac{u}{a}\right) \frac{du}{a} = \frac{1}{a}\psi(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta(x)}{a} \psi(x)\, dx$. Cette relation étant satisfaite pour toute fonction d'onde ψ, il vient $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}$

• $a<0$ il vient $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(ax)\psi(x)\,dx=\int_{+\infty}^{-\infty}\delta(u)\psi\left(\frac{u}{a}\right)\frac{du}{a}=-\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(u)\psi\left(\frac{u}{a}\right)\frac{du}{a}$. On en déduit la relation $\delta(ax)=-\frac{\delta(x)}{a}$. Dans tous les cas il vient

$$\boxed{\delta(ax)=\frac{\delta(x)}{|a|}}$$

Exercice 2

2a- $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle=\langle x\int_{-\infty}^{+\infty}C_{(\lambda)}\ |v_\lambda\rangle\,d\lambda=\int_{-\infty}^{+\infty}C_{(\lambda)}\langle x|v_\lambda\rangle\,d\lambda=\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty}C_{(\lambda)}v_\lambda(x)\ d\lambda=\psi(x)}$
$\langle v_\alpha|\,\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{v}_\alpha(x)\ C_{(\lambda)}\ v_\lambda(x)\ d\lambda=\iint\overline{v}_\alpha(x)\ C_{(\lambda)}\ v_\lambda(x)\ d\lambda dx$
$\langle v_\alpha|\,\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{v}_\alpha(x)\ C_{(\lambda)}\ v_\lambda(x)\ dx=\int_{-\infty}^{+\infty}d\lambda C_{(\lambda)}\langle v_\alpha|v_\lambda\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}C_{(\lambda)}\delta(\alpha-\lambda)\,d\lambda$

$$\boxed{\langle v_\alpha|\,\psi\rangle=C_{(\alpha)}}$$

2b- $\langle\psi|\,\varphi\rangle=\iint\left\langle C_{(\lambda)}v_\lambda\right|K_{(\mu)}v_\mu\rangle\,d\lambda d\mu=\iint\overline{C}_{(\lambda)}K_{(\mu)}\langle v_\lambda|\,v_\mu\rangle\,d\lambda d\mu$
$\langle\psi|\,\varphi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d\mu\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{C}_{(\lambda)}K_{(\mu)}\delta(\lambda-\mu)\,d\lambda=\int_{-\infty}^{+\infty}d\mu\,\overline{C}_{(\mu)}K_{(\mu)}$

$$\boxed{\langle\psi|\,\varphi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{C}_{(\mu)}K_{(\mu)}\ d\mu}$$

Exercice 3

• $\boxed{\tilde{\psi}(k)=\langle u_k|\psi\rangle}$

•La <u>décomposition</u> de $|\psi\rangle$ s'écrit $|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}f_{(k)}|u_k\rangle\,dk$ avec $\boxed{f_{(k)}=\langle u_k|\psi\rangle=\tilde{\psi}(k)}$.

B- Bases discrètes de l'espace des états accessibles

Exercice 1

1a- Base orthonormée : $\boxed{\langle u_n|u_m\rangle=\delta_{nm}}$

1b- $\psi(x)=\sum\limits_m C_m u_m(x)\Rightarrow\langle u_n|\psi\rangle=\sum\limits_m C_m\langle u_n|u_m\rangle=\sum\limits_m C_m\delta_{nm}=C_n$

$$\boxed{C_n=\langle u_n|\psi\rangle}$$

1c- $\langle\varphi|\psi\rangle=\langle\sum K_n u_n|\psi\rangle=\sum\limits_n\langle K_n u_n|\psi\rangle=\sum\limits_n\overline{K}_n\langle u_n|\psi\rangle$
$\langle\varphi|\psi\rangle=\sum\limits_n\overline{K}_n\langle u_n|\sum C_m u_m\rangle=\sum\limits_n\sum\limits_m\overline{K}_n\langle u_n|C_m u_m\rangle=\sum\limits_n\sum\limits_m\overline{K}_n C_m\langle u_n|u_m\rangle$
$\langle\varphi|\psi\rangle=\sum\limits_n\overline{K}_n\sum\limits_m C_m\delta_{nm}$

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle=\sum\limits_n\overline{K}_n C_n}$$