

Chapitre IV

$\hbar$

Formalisme Mathématique de la Mécanique Quantique

$\hbar$

Objectif de ce chapitre

- Donner une vue d'ensemble des outils mathématiques de base utilisés en mécanique quantique;
- Regrouper les diverses notions utiles en mécanique quantique en insistant particulièrement sur la commodité des notations de Dirac;
- Connaître des notions sur l'espace des fonctions d'onde;
- Comprendre le concept d'état d'un système physique et l'espace des états du système;
- Savoir utiliser les notations de Dirac et faire des manipulations sur les kets, les bras et les opérateurs.

Espace de fonctions d'ondes $\mathfrak{L}^2$

La probabilité

$$dP = |\Psi(\vec{r}_0, t)|^2 dv$$

la densité de probabilité

$$\rho = \frac{dP}{dv} = |\Psi(\vec{r}_0, t)|^2$$

Définition de $\mathfrak{L}^2$

$\mathfrak{L}^2$ est l'espace des fonctions de carrés sommables (intégrables).

$$\mathfrak{R}^3, \mathfrak{R}^+ \rightarrow \mathbb{C}$$

$$(\vec{r}, t) \rightarrow \psi(\vec{r}, t)$$

$$\iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \text{ est finie}$$

Caractéristiques de $\mathbb{L}^2$

i) La linéarité

$\mathbb{L}^2$ a une structure d'espace vectoriel sur le corps des nombres complexes

Si $|\psi_1\rangle \in L^2$ et $|\psi_2\rangle \in L^2$

Alors $|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

La combinaison linéaire de deux fonctions de carré sommable est une fonction de carré sommable.

Notons que

$|\text{ket}\rangle$ = vecteur colonne,

$\langle \text{bra}|$ = vecteur ligne des complexes conjugués

ii) Le produit scalaire dans $\mathcal{L}^2$

Le produit scalaire de deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ est noté $\langle \psi | \phi \rangle$

$$\langle \phi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx$$

Les propriétés de ce produit scalaire sont

$$\langle \phi, \psi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle^*$$

$$\langle \phi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi, \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi, \psi_2 \rangle$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1, \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2, \psi \rangle$$

$$\langle \phi, \psi \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi \perp \psi$$

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad \text{nul si et seulement si } \psi = 0$$

$$\sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} \quad \text{est appelée norme de } \psi.$$

$\mathcal{L}^2$ muni du produit scalaire défini comme ci-dessus a une structure d'espace d'Hilbert.

Suivant les cas, on aura à utiliser soit une base à indice discret, soit une base à indice continu

L'ensemble dénombrable de fonctions de carré sommable $\{u_i(x)\}$ ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$).

L'ensemble de fonctions $v_\alpha(x)$ repérées par un indice α variant de façon continue

i) Cet ensemble est orthonormé si :

$$\langle u_i, u_j \rangle = \int u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij}$$

Relation d'orthogonalité

$$\int v_\alpha^*(x) v_\beta(x) dx = \delta(\alpha - \beta)$$

Relation d'orthogonalité

ii) Il est complet si toute fonction $\psi(x)$ peut s'écrire dans $u_i(x)$:

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$$

Les coefficients c_i sont appelés composantes de $\psi(x)$ sur les $u_i(x)$

$$\int v_\alpha^*(x) v_\alpha(x') d\alpha = \delta(x - x')$$

Relation de fermeture

$u_i(x)$ forment alors une base orthonormée complète discrète

Base orthonormée complète discrète de ξ

Base orthonormée complète continue de α

Composantes de $\Psi(x)$

$$\begin{aligned}\langle u_j | \psi \rangle &= \int u_j^*(x) \psi(x) dx \\ &= \sum_i c_i \langle u_j(x) | u_i(x) \rangle \\ &= \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j\end{aligned}$$

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle = \int u_i^*(x) \psi(x) dx$$

$$c_\alpha = \langle v_\alpha | \psi \rangle = \int v_\alpha^*(x) \psi(x) dx$$

$$\begin{aligned}\int c_\alpha v_\alpha(x) d\alpha &= \int \left(\int v_\alpha^*(x') \psi(x') dx' \right) v_\alpha(x) d\alpha \\ &= \int \left(\int v_\alpha^*(x) v_\alpha(x') d\alpha \right) \psi(x') dx' \\ &= \int \delta(x - x') \psi(x') dx'\end{aligned}$$

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

$$\Rightarrow \psi(x) = \int c_\alpha v_\alpha(x) d\alpha$$

$$c_\alpha = \langle v_\alpha | \psi \rangle$$

Base orthonormée complète discrète de ξ Base orthonormée complète continue de ξ

Expression du produit scalaire et de la norme

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$$

$$\phi(x) = \sum_j b_j u_j(x)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \sum_i \sum_j b_j^* c_i \int u_j^*(x) u_i(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j b_j^* c_i \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \end{aligned}$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2$$

$$i \leftrightarrow \alpha$$

$$\sum_i \leftrightarrow \int d\alpha$$

$$\delta_{ij} \leftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$$

$$\psi(x) = \int c_\alpha v_\alpha(x) d\alpha$$

$$\phi(x) = \int c_{\alpha'} v_{\alpha'}(x) d\alpha'$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx \\ &= \iiint b_{\alpha'}^* c_\alpha v_{\alpha'}^*(x) v_\alpha(x) d\alpha' d\alpha dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \iint \left[b_{\alpha'}^* c_\alpha \int v_{\alpha'}^*(x) v_\alpha(x) dx \right] d\alpha' d\alpha \\ &= \iint b_{\alpha'}^* c_\alpha \delta(\alpha - \alpha') d\alpha' d\alpha = \int b_\alpha^* c_\alpha d\alpha \end{aligned}$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int b_\alpha^* c_\alpha d\alpha$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int |c_\alpha|^2 d\alpha$$

Base orthonormée complète discrète de ξ Base orthonormée complète continue de ξ **Relation de fermeture**

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= \sum_i c_i u_i(x) \\
 &= \sum_i \langle u_i | \psi \rangle u_i(x) \\
 &= \sum_i \left[\int u_i^*(x') \psi(x') dx' \right] u_i(x)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= \int \left[\sum_i u_i(x) u_i^*(x') \right] \psi(x') dx' \\
 &= \int F(x, x') \psi(x') dx'
 \end{aligned}$$

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

 $\delta(x-x')$: Fonction de Dirac

$$\sum_i u_i(x) u_i^*(x') = \int \delta(x - x')$$



relation de fermeture

Exemples de fonctions $v_\alpha(x)$

Les fonctions delta :

C'est l'ensemble des fonctions localisées aux différents points x_0 :

$$v_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$$

x_0 est une abscisse qui joue le rôle de α et qui varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Les $v_{x_0}(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture, on a en effet :

$$\int v_{x_0}^*(x) v_{x'_0}(x) dx = \int \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) dx = \delta(x_0 - x'_0)$$

$$\int v_{x_0}(x) v_{x'_0}^*(x) dx = \int \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) dx = \delta(x_0 - x'_0)$$

Les $v_{x_0}(x)$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(x)$ se développe de façon unique suivant les $v_{x_0}(x)$

$$\psi(x) = \int c_{x_0} v_{x_0}(x) dx_0$$

$$c_{x_0} = \langle v_{x_0}(x) | \psi(x) \rangle = \int \delta(x - x_0) \psi(x) dx = \psi(x_0)$$

$$\psi(x) = \int \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0$$

Cet résultat exprime que toute fonction $\Psi(\mathbf{x})$ peut être considérée comme une superposition linéaire de fonctions $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, centrées aux divers points $\mathbf{x}_0$, le coefficient multipliant la fonction $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ centrée au point $\mathbf{x}_0$ étant la valeur de $\psi(\mathbf{x})$ en $\mathbf{x}_0$.

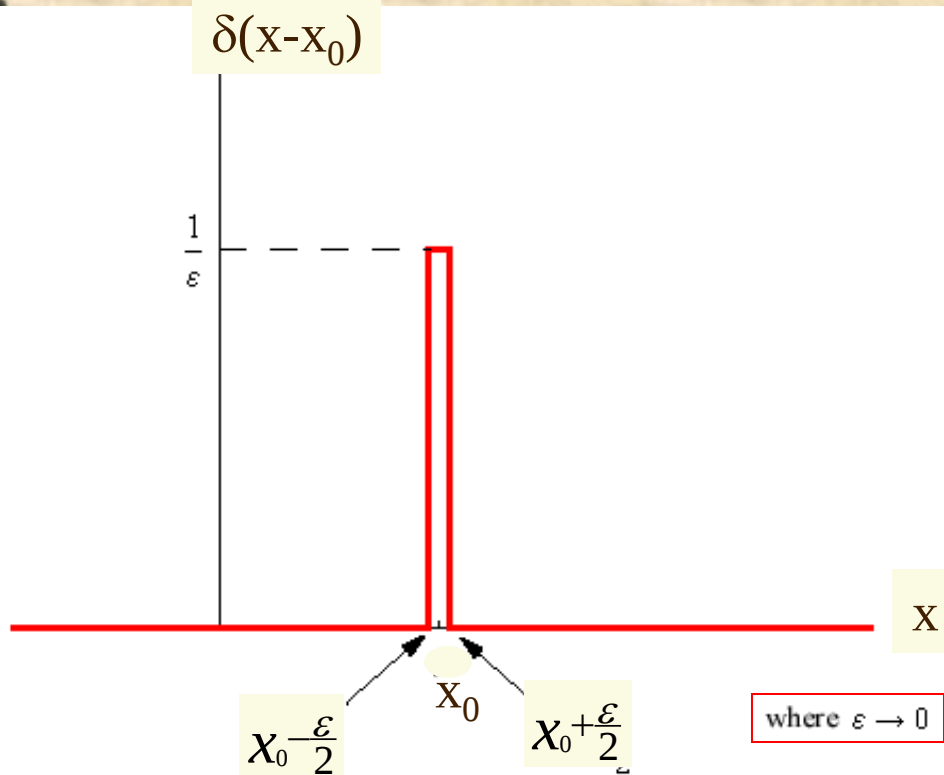
On écrit souvent pour alléger le formalisme :

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

C'est la représentation $\{x\}$.

Opérateur position : X

Les fonctions propres de cet opérateurs décrivent une particule dont la position est parfaitement connue. Elles doivent donc être de la forme :



Cette fonction est la fonction « delta » de Dirac. On la note $\delta(x-x_0)$. x_0 est la valeur propre associée à ce delta de Dirac.

Il y a une infinité de valeurs de x_0 possibles. Cette grandeur n'est pas quantifiée.

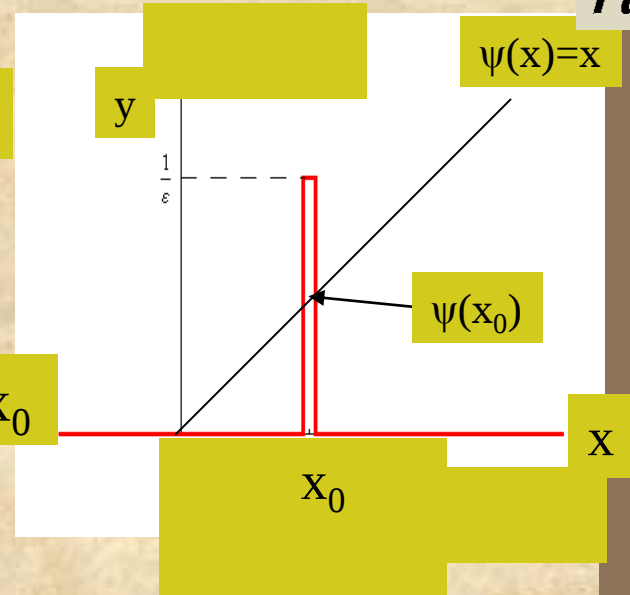
$$X \delta(x-x_0) = x_0 \delta(x-x_0)$$

Une propriété des fonctions delta est que l'on a :

$$\psi(x)\delta(x-x_0) = \psi(x_0)\delta(x-x_0)$$

Fonction de x

Valeur de la fonction au point x_0



On peut en déduire la forme analytique de l'opérateur position X :

$$X = x$$

Exemple d'utilisation : on pourra calculer la valeur moyenne de la position d'une particule décrite par une fonction d'onde $\psi(x)$ en calculant :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

Les ondes planes

C'est l'ensemble des fonctions définies par : $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$

p est une composante de l'impulsion qui joue le rôle de α et qui varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Les $v_p(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture. On a en effet:

$$\int v_p^*(x) v_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(p'-p)u} du = \delta(p-p')$$

$$u = \frac{x}{\hbar}$$

$$\int v_p(x) v_p^*(x') dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(x-x')p/\hbar} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(x-x')k} dk = \delta(x-x')$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

le résultat des intégrales découlant des transformées de Fourier des fonctions de Dirac.

Les $\mathbf{v}_p(\mathbf{x})$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(\mathbf{x})$ se développe de façon unique suivant les $\mathbf{v}_p(\mathbf{x})$:

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} c_p \mathbf{v}_p(\mathbf{x})$$

$$c_p = \langle \mathbf{v}_p | \psi \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \psi(\mathbf{p})$$

$\Psi(\mathbf{p})$ n'est autre que la transformée de Fourier de $\Psi(\mathbf{x})$, de sorte qu'on a :

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \psi(\mathbf{p}) \mathbf{v}_p(\mathbf{x})$$

On retrouve donc le résultat bien connu des transformées de Fourier (**cf. EP2.15**) : toute fonction $\Psi(\mathbf{x})$ peut être considérée comme une superposition linéaire d'ondes planes, le coefficient multipliant l'onde plane étant la transformée de Fourier $\psi(\mathbf{p})$ de $\Psi(\mathbf{x})$.

On écrit souvent pour simplifier le formalisme $\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$

C'est la représentation $\{\mathbf{p}\}$.

Notion de représentation - Notations de Dirac

1. Définition

Choisir une représentation c'est se donner une base orthonormée complète (discrète ou continue) suivant laquelle se décompose chaque fonction de ξ .

2- Vecteurs "kets" et vecteurs "bras"

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi(x') \\ \vdots \\ \psi(x^i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(p) \\ \psi(p') \\ \vdots \\ \psi(p^i) \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi| = |c_1^* \ c_2^* \dots c_i^* \dots| = |\psi^*(x) \dots \psi^*(x') \dots \psi^*(x^i) \dots| = |\bar{\psi}^*(p) \dots \bar{\psi}^*(p') \dots \bar{\psi}^*(p^i) \dots|$$

3. Correspondance entre ket et bra

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow \langle\psi| = \lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2|$$

$$|\lambda\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad \text{alors} \quad \langle\lambda\psi| = \lambda^* \langle\psi|$$

Opérateurs linéaires

Définition

Un opérateur $\mathbf{A}$ est un être mathématique qui à toute fonction $\psi(\mathbf{r}) \in \xi$ fait correspondre une fonction $\psi'(\mathbf{r}) \in \xi$ définie par:

$$|\psi'\rangle = \mathbf{A}|\psi\rangle$$

Un opérateur linéaire si: $\mathbf{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \mathbf{A}\lambda_1|\psi_1\rangle + \mathbf{A}\lambda_2|\psi_2\rangle$

Exemples :

Opérateur $\mathbf{X} : \Psi(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{x}\Psi(\mathbf{x})$

Opérateur $\mathbf{P} : \psi(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x})$

Opérateur $\pi : \Psi(\mathbf{x}) \rightarrow \Psi(-\mathbf{x})$

Représentation d'un opérateur par une matrice

On appelle éléments de matrice de l'opérateur A dans la base orthonormée complète discrète $\{u_i\}$ les nombres complexes A_{ij} tels que :

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i^*(x) [A u_j(x)] dx$$

Ligne

colonne

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

Matrice carrée

Notation matricielle:

$$|u_i\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix}$$

$$|u_j\rangle = \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u'_n \end{pmatrix}$$

$$A|u_i\rangle = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdot & \cdot & A_{1n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & A_{ij} & \cdot \\ A_{n1} & \cdot & \cdot & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}u_1 + \dots + A_{1n}u_n \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ A_{n1}u_1 + \dots + A_{nn}u_n \end{pmatrix}$$

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = \sum_{\substack{i=1,n \\ j=1,n}} u_i^* A_{ij} u_j = \begin{pmatrix} u_1^* & \cdot & \cdot & \cdot & u_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & \cdot & \cdot & A_{1n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & A_{ij} & \cdot \\ A_{n1} & \cdot & \cdot & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix}$$

Si on connaît les coordonnées c_i de $|\psi\rangle$

on peut en déduire les coordonnées c'_i de

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

En effet on a :

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$



$$|\psi'\rangle = \sum_i c'_i |u_i\rangle$$

$$c'_i = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | \sum_j c_j A | u_j \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle c_j = \sum_j A_{ji} c_j$$

$$c'_i = \sum_j A_{ji} c_j$$

$$\begin{bmatrix} c_1^* \\ c_2^* \\ \vdots \\ c_i^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{bmatrix}$$

Le même formalisme peut se concevoir dans la base continue $\{v_\alpha\}$; on aura en effet :

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \sum_i \sum_j b_i^* A_{ij} c_j$$

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \iint b_\alpha^* A_{\alpha\alpha'} c_{\alpha'} d\alpha d\alpha'$$

2. Produit de deux opérateurs - Commutateur

Le produit de deux opérateurs linéaires A et B , noté AB est défini de la façon suivante :

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

B agit d'abord, **A** ensuite.

En général, le produit AB est différent du produit BA .

On définit le **commutateur** de **A** et **B** qu'on note $[A,B]$ par l'opérateur :

$$[A, B] = AB - BA$$

Si $[A, B] = 0$, on dit que les deux opérateurs commutent.

Exemple : Commutateur : $[X, P]$

Dans la représentation $\{x\}$ on a :

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

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

$$(XP - PX)\psi(x) = -\frac{\hbar}{i} \psi = i\hbar\psi$$

Ψ étant quelconque, on aura :

$$[X, P] = i\hbar$$

4. Exemple d'opérateur linéaire : Le projecteur

On appelle projecteur sur l'état normé $|\psi\rangle$ l'opérateur P_ψ défini par :

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Comme $\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$

$$P_\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} \begin{vmatrix} c_1^* & c_2^* & \dots & c_i^* \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \dots & c_1 c_i^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \dots & c_2 c_i^* \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_i c_1^* & c_i c_2^* & \dots & c_i c_i^* \end{vmatrix}$$

Faisons agir P_ψ sur un ket $|\phi\rangle$ quelconque, on a :

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \phi \rangle = \lambda |\psi\rangle \quad \text{avec } \lambda = \langle \psi | \phi \rangle$$

L'interprétation géométrique de P_ψ est donc la suivante :

P_ψ agissant sur un ket $|\phi\rangle$ donne un ket proportionnel à $|\psi\rangle$, le coefficient de proportionnalité étant le produit scalaire $\langle \psi | \phi \rangle$ c'est à dire la projection de $|\phi\rangle$ sur $|\psi\rangle$: P_ψ est donc l'opérateur projection orthogonale sur le ket $|\psi\rangle$.

On a aussi :

$$(P_\psi)^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi | |\psi\rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi$$

Projeter deux fois de suite sur un vecteur donné est équivalent à projeter une seule fois.

5. Relation de fermeture

Dans la base orthonormée complète discrète $\{\mathbf{u}_i\}$, l'opérateur $P_{\{\mathbf{u}_i\}}$ défini par :

$$P_{\{\mathbf{u}_i\}} = \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle\langle\mathbf{u}_i|$$

Agir cet opérateur sur un ket $|\psi\rangle \rightarrow P_{\{\mathbf{u}_i\}} |\psi\rangle = \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle\langle\mathbf{u}_i|\psi\rangle = |\psi\rangle$

$$P_{\{\mathbf{u}_i\}} = \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle\langle\mathbf{u}_i| = 1$$



De même pour une base orthonormée complète continue $\{\mathbf{v}_\alpha\}$

on obtient:

$$P_{\{\mathbf{u}_i\}} = \int |\mathbf{v}_\alpha\rangle\langle\mathbf{v}_\alpha| d\alpha = 1$$

Application de la relation de fermeture : changement de base

$$\{|u_i\rangle\} \longrightarrow \{|\omega_l\rangle\}$$

telle que : $\langle u_i | \omega_l \rangle = S_{il}$ et $\langle \omega_l | u_i \rangle = S_{il}^*$

Les relations de fermeture s'écrivent dans les deux bases

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1$$

$$P_{\{\omega_l\}} = \sum_l |\omega_l\rangle \langle \omega_l| = 1$$

a- Transformation des composantes d'un vecteur :

Soit le vecteur $|\psi\rangle$

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ ses coordonnées sont $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$

Dans la base $\{|\omega_l\rangle\}$ ses coordonnées sont $b_l = \langle \omega_l | \psi \rangle$

On a dans la base $\{|\omega_l\rangle\}$

$$b_l = \langle \omega_l | \psi \rangle = \langle \omega_l | P_{\{u_i\}} | \psi \rangle = \langle \omega_l | \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_i \langle \omega_l | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle$$

soit :

$$b_l = \sum_i S_{il}^* c_i$$

B- Transformation des éléments de matrice d'un opérateur $\mathbf{A}$:

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ les éléments de matrice de $\mathbf{A}$ sont :

$$A_{ij} = \langle u_i | \mathbf{A} | u_j \rangle$$

Dans la base $\{|\omega_l\rangle\}$ les éléments de matrice de $\mathbf{A}$ sont :

$$A_{lm} = \langle \omega_l | \mathbf{A} | \omega_m \rangle$$

On a dans la base $\{|\omega_l\rangle\}$

$$\begin{aligned} A_{lm} &= \langle \omega_l | \mathbf{A} | \omega_m \rangle = \langle \omega_l | \mathbf{P}_{\{u_i\}} \mathbf{A} \mathbf{P}_{\{u_i\}} | \omega_m \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \langle \omega_l | u_i \rangle \langle u_i | \mathbf{A} | u_j \rangle \langle u_j | \omega_m \rangle \end{aligned}$$

soit :

$$A_{lm} = \sum_i \sum_j S_{il}^* A_{ij} S_{jm}$$

C- Invariance de la trace d'un opérateur A dans un changement de base :

Dans la base $\{u_i\}$, on a:

$$(\text{Tr}A)_{\{u_i\}} = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle$$

Dans la base $\{|\omega_l\rangle\}$, on a:

$$(\text{Tr}A)_{\{\omega_l\}} = \sum_l \langle \omega_l | A | \omega_l \rangle$$

En utilisant la relation de fermeture il vient:

$$\begin{aligned} \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle &= \sum_i \langle u_i | \sum_l |\omega_l\rangle \langle \omega_l | A | u_i \rangle \\ &= \sum_l \sum_i \langle u_i | \omega_l \rangle \langle \omega_l | A | u_i \rangle \\ &= \sum_l \sum_i \langle \omega_l | A | u_i \rangle \langle u_i | \omega_l \rangle \\ &= \sum_l \langle \omega_l | A | \sum_i | u_i \rangle \langle \sum_i u_i | \omega_l \rangle = \sum_l \langle \omega_l | A | \omega_l \rangle \end{aligned}$$

soit :

$$(\text{Tr}A)_{\{u_i\}} = (\text{Tr}A)_{\{\omega_l\}}$$

Opérateurs adjoints

Définitions: A^+ adjoint de $A \iff \langle u_j | A^+ | u_i \rangle = \langle u_i | A | u_j \rangle^*$

Cette définition se généralise pour deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ quelconques:

$$\langle \phi | A^+ | \psi \rangle = \langle \psi | A | \phi \rangle^*$$

Propriétés

$$(A^+)^+ = A$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+$$

$$|\psi'\rangle = A|\phi\rangle \implies \langle \psi' | = \langle \phi | A^+$$

$$\langle \psi' | = \langle \psi | B^+ A^+ = \langle \psi | (AB)^+$$

Règles de conjugaison

Pour obtenir l'expression conjuguée d'une expression donnée il faut :

- ❑ Renverser l'ordre des termes.
- ❑ Remplacer ket par bra et réciproquement.
- ❑ Prendre le complexe conjugué des constantes.
- ❑ Remplacer les opérateurs par leurs adjoints.

Exemple, l'expression conjuguée de $\lambda AB|\psi\rangle$ est $\lambda^* \langle\psi|B^+A^+$

Opérateurs hermétiques

1. Définitions Un opérateur $\mathbf{A}$ est hermétique s'il est égal à son adjoint



$\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$. Il s'ensuit que les éléments de matrice de $\mathbf{A}$ dans une représentation donnée $\{\mathbf{u}_i\}$ sont tels que :

$$A_{ij} = A_{ji}^*$$

Plus généralement pour deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ quelconques:

$$\langle \psi | \mathbf{A} | \phi \rangle = \langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle^*$$

Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur

1. Définition $A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$

$$A|\phi_n^\alpha\rangle = a_n|\phi_n^\alpha\rangle$$

Rechercher les valeurs propres d'un opérateur A revient à diagonaliser la matrice associée.

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \quad \longrightarrow \quad \langle u_n|A^\dagger = a_n^* \langle u_n|$$

Dégénérescence

Une valeur propre peut être associée à plusieurs fonctions propres linéairement indépendantes.

S'il en est ainsi, la valeur propre est dite dégénérée.

$$A|\phi_n^\alpha\rangle = a_n|\phi_n^\alpha\rangle$$

$$A|\phi_n^\beta\rangle = a_n|\phi_n^\beta\rangle$$

Le nombre g_n de fonctions propres linéairement indépendantes associées à la même valeur propre a_n est appelé le degré de dégénérescence de a_n .

3. Equation caractéristique

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$\langle u_i | A | \psi \rangle = \lambda \langle u_i | \psi \rangle = \lambda c_i$$

$$\langle u_i | A \sum_j | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} c_j$$

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i$$

Système d'équation $\sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0$

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & \cdot & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & \cdot & A_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdot & \cdot & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Recherche des états propres et des valeurs propres associées à un opérateur :

La résolution de l'équation

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

est bien connue en algèbre linéaire. La diagonalisation de $\mathbf{A}$ permet de déterminer les valeurs de λ et les kets $|\psi\rangle$ associés.

**VOUS DEVEZ ABSOLUMENT SAVOIR
DIAGONALISER UNE MATRICE.**

En faisant court, si la matrice $\mathbf{A}$ est exprimée dans une base orthonormée :

- 1) Les valeurs propres sont les solutions de : $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0$
- 2) On trouve les fonctions propres en résolvant le système d'équations pour chaque valeur de λ .

Propriétés utiles et fondamentales :

- Les vecteurs propre d'un opérateur sont orthogonaux.
- La matrice de l'opérateur, représentée dans la base de ses vecteurs propres est diagonale. Les éléments diagonaux sont les valeurs propres.
- Les valeurs propres d'une observable sont réelles.
- Le nombre d'états propres est égal à la dimension de la matrice.
- La même valeur propre peut être associée à plusieurs états propres. On dit qu'elle est dégénérée.

4. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermitique

4.1. Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad \langle\phi_n|A^\dagger = a_n^*\langle\phi_n|$$

$$\langle\phi_n|A|\phi_n\rangle = a_n\langle\phi_n|\phi_n\rangle = a_n$$

$$\langle\phi_n|A^\dagger|\phi_n\rangle = a_n^*\langle\phi_n|\phi_n\rangle = a_n^*$$

Comme $A = A^\dagger \implies a_n = a_n^*$

$$\langle\phi_n|A = a_n\langle\phi_n|$$

si $|\phi_n\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre a_n

Alors $\langle\phi_n|$ est bra propre de A avec la même valeur propre a_n .

Observables

1. Définition

Une observable est un opérateur hermitique dont le système de vecteurs propres $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ est non seulement orthonormé mais complet ; c'est-à-dire qu'on a toujours :

$$\langle u_n^{\alpha'} | u_n^\alpha \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\sum_n \sum_\alpha \langle u_n^\alpha | u_n^\alpha \rangle = 1$$

Observables

Un opérateur qui peut être associé à une observable doit coïncider avec son adjoint (propriété d'hermiticité) et on a alors :

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^*$$

Au niveau de la matrice représentant l'opérateur, cela signifie que :

- * Les éléments symétriques par rapport à la diagonale principale sont complexes conjugués.
- * Les éléments sur la diagonale principale sont réels.

Exemple
d'observable :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1+2i & i & 0 \\ 1-2i & 8 & 0 & 6 \\ -i & 0 & 3 & 2-i \\ 0 & 6 & 2+i & 2 \end{pmatrix}$$

NB : une matrice réelle
symétrique non nulle est
toujours une observable

Diagonale principale

2. Exemples d'observables

2.1. Le projecteur :

$$\lambda^2 = \lambda, \text{ soit } \lambda = 1 \text{ ou } \lambda = 0$$

2.2. Opérateur X :

X est hermitique et son équation aux valeurs propres s'écrit en représentation $\{\mathbf{x}\}$:

$$x\varphi_{x'}(x) = x'\varphi_{x'}(x)$$

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

$$\varphi_{x'}(x) = \delta(x - x')$$

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

$$\int |x\rangle\langle x|dx = 1$$

2.3. Opérateur P :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi_{p'}(x) = p' \varphi_{p'}(x)$$

$$\varphi_{p'}(x) = A \exp\left(\frac{ip'x}{\hbar}\right)$$

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

$$\int |p\rangle \langle p| dp = 1$$

3. Observables qui commutent

3.1. Théorème 1

$$A|\phi_n^\alpha\rangle = a_n|\phi_n^\alpha\rangle$$

$$AB|\phi_n^\alpha\rangle = a_n B|\phi_n^\alpha\rangle$$

$$A(B|\phi_n^\alpha\rangle) = a_n (B|\phi_n^\alpha\rangle)$$

$$B|\phi_n^\alpha\rangle = b_n|\phi_n^\alpha\rangle$$

$$B|\chi_{n,m}^\beta\rangle = b_m|\chi_{n,m}^\beta\rangle$$

3.2. Théorème 2

$$[A, B] = 0 \quad \longrightarrow \quad \langle \phi_n^{\alpha'} | [A, B] | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$$

$$\langle \phi_n^{\alpha'} | AB | \phi_n^{\alpha} \rangle - \langle \phi_n^{\alpha'} | BA | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$$

$$a_{n'} \langle \phi_n^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle - a_n \langle \phi_n^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$$

$$(a_n - a_{n'}) \langle \phi_n^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$$

$$a_{n'} \neq a_n \quad \longrightarrow \quad \langle \phi_n^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$$

4. Généralisation

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$$

$$\langle u_v | u_{v'} \rangle = \delta(v - v')$$

$$\langle u_v | u_v \rangle = 0$$

$$\sum |u_n\rangle \langle u_n| + \int |u_v\rangle \langle u_v| dv = 1$$

5. Ensemble complet d'observables qui commutent

VIII. Opérateurs unitaires

1. Définition

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+$$

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}$$

2. Transformation sur les vecteurs

$$|\varphi'_1\rangle = \mathbf{U} |\varphi_1\rangle$$

$$|\varphi'_2\rangle = \mathbf{U} |\varphi_2\rangle$$

$$\langle\varphi'_1| = \langle\varphi_1| \mathbf{U}^+$$

$$\langle\varphi'_2| = \langle\varphi_2| \mathbf{U}^+$$

$$\langle\varphi'_1|\varphi'_1\rangle = \langle\varphi_1| \mathbf{U}^+ \mathbf{U} |\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle$$

$$\langle\varphi'_2|\varphi'_1\rangle = \langle\varphi_2| \mathbf{U}^+ \mathbf{U} |\varphi_1\rangle = \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle$$

3. Transformation sur les opérateurs

3.1. Définition

$$|\psi\rangle = A|\phi\rangle$$

$$|\psi'\rangle = A'|\phi'\rangle$$

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$

$$|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$$

$$U|\psi\rangle = A'U|\phi\rangle$$

$$U^+U|\psi\rangle = U^+A'U|\phi\rangle$$

$$|\psi\rangle = U^+A'U|\phi\rangle = A|\phi\rangle$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^+\mathbf{A}'\mathbf{U}$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^+$$

2. Exemples d'observables

$\hbar$

$\hbar$

3. Observables qui commutent

4. Généralisation

5. Ensemble complet d'observables qui commutent

VIII. Opérateurs unitaires

3. Transformation sur les opérateurs

4. Opérateur unitaire infinitésimal

$\hbar$

$\hbar$

IX. Produit tensoriel d'espaces d'états

1. Définition

2. Propriétés

3. Composantes d'un vecteur produit

4. Produit scalaire dans ξ

5. Prolongement dans ξ d'un opérateur agissant dans ξ_1 ou ξ_2

6. Produit tensoriel de deux opérateurs $A(1)$ et $B(2)$

7. Etats propres et valeurs propres de $\tilde{A}(1)$

8. Etats propres et Valeurs propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)$

Ernest Solvay (1838 – 1922) épris de science et ... riche finance un congrès réunissant les meilleurs physiciens... Le premier en 1911, le 21ème en 1998...



Picard Henriot Ehrenfest Herzen de Donder Schrödinger Verschaffelt Pauli Heisenberg Fowler Brillouin
Debye Knudsen Bragg Kramers Dirac Compton L. de Broglie Born Bohr
Langmuir Planck Mme Curie Lorentz Einstein Langevin Guye Wilson Richardson