Notes de Cours

Mécanique Quantique II (Physique 8)

3ième année Licence de Physique Générale

A.Gharbi

2013-2014

Département de Physique

Université de Bejaia

Table des matières

1	Formalisme mathématique de la mécanique quantique	4
1.1	Espace des fonctions d'ondes	4
1.1.1	Introduction	4
1.1.2	Définition	5
1.1.3	Structure de l'espace F des fonctions d'ondes	5
1.1.4	Base discrète orthonormée dans F	7
1.1.5	Base continue dans F : base n'appartenant pas à F	10
1.2	Espace des états - Notation de Dirac	17
1.2.1	Introduction	17
1.2.2	Espace des états $\mathcal{E}$	17
1.2.3	Produit scalaire	18
1.2.4	Vecteur Bra et espace dual $\mathcal{E}^*$	19
1.2.5	Les opérateur linéaire	20
1.2.6	Représentation dans l'espace des états $\mathcal{E}$	28
1.3	Exercices	41
2	Postulats de la mécanique quantique	50
2.1	Enoncé des postulats	50
2.2	Valeurs moyennes et principe d'incertitude	53

2.3	Produit tensoriel	54
2.3.1	Définition	55
2.3.2	Les kets dans $\mathcal{E}$	55
2.3.3	Produit scalaire	56
2.3.4	Les opérateurs dans $\mathcal{E}$	57
3	Dynamique Quantique	59
3.1	Opérateur d'évolution	59
3.1.1	Image de Heisenberg et de Schrödinger	61
3.1.2	Image de Schrödinger	61
3.1.3	Image de Heisenberg	61
3.1.4	Passage entre le deux images	61
3.1.5	Base propre d'un opérateur dans l'image de Heisenberg	62
3.1.6	Equivalence par rapport aux postulats de la mécanique quantique	63
3.2	Opérateur Densité	64
3.2.1	Trace d'un opérateur	64
3.2.2	Définition de l'opérateur densité	65
3.2.3	Prédictions des probabilités sur un mélanges statistique	67
4	Oscillateur harmonique à une dimension	68
4.1	Introduction	68
4.2	Oscillateur harmonique classique	69
4.3	Oscillateur harmonique quantique	70
4.4	Méthode algébrique	71
4.4.1	Spectre de N	73
4.4.2	Fonctions propres de H	75
4.5	Exercices	77

Chapitre 1

Formalisme mathématique de la mécanique quantique

1.1 Espace des fonctions d'ondes

1.1.1 Introduction

On sait que les fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ décrivant un système physique quelconque sont solutions de l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= H\psi(\vec{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (1.1)$$

1. Le fait que l'équation (1.1) est linéaire implique que si $\psi_1(\vec{r}, t)$ et $\psi_2(\vec{r}, t)$ sont des solutions de (1.1), alors

$$\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$$

est aussi solution de (1.1), où α et β sont des nombres complexes. C'est le principe de

superposition qui nous permet de construire un espace vectoriel.

2. L'interprétation de $\psi(\vec{r}, t)$ comme étant une amplitude de probabilité implique la condition de normalisation

$$\int_{\text{tout l'espace}} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3r = \int_{\text{tout l'espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad \text{est convergente}$$

cette condition va nous permettre de doter notre espace vectoriel d'un produit scalaire.

1.1.2 Définition

On appelle ensemble de fonctions de carré sommable, les fonctions $\psi(\vec{r}, t)$ dont l'intégrale

$$\int_{\text{tout l'espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad \text{est convergente}$$

cet ensemble de fonctions est noté L^2 , il a la structure d'un espace de Hilbert (espace vectoriel).

En mécanique quantique, on utilise des fonctions qui sont définies et continues et indéfiniment dérivable. De ce fait, on ne va s'intéresser qu'aux fonctions d'ondes appartenant à un sous-espace de L^2 , qu'on va noter F et pour lequel les fonctions d'ondes sont partout définies et continues et indéfiniment dérivable.

1.1.3 Structure de l'espace F des fonctions d'ondes

F est un espace vectoriel

F est un espace vectoriel défini sur le corps des complexes $\mathbb{C}$:

$$\text{si } \psi_1 \in F \text{ et } \psi_2 \in F \implies \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \in F \text{ ou } \alpha \text{ et } \beta \in \mathbb{C}$$

Produit scalaire

F est munit d'un produit scalaire qui est défini comme suit :

Le produit scalaire des fonctions φ et ψ dans cet ordre est défini de $F \times F \rightarrow \mathbb{C}$ par :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^* (\vec{r}, t) \psi (\vec{r}, t) d^3r \quad (1.2)$$

Propriétés : La relation (1.2) définit un produit scalaire si elle vérifie les propriétés suivantes :

1. $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$.
2. Linéarité : $(\varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\varphi, \psi_1) + \lambda_2 (\varphi, \psi_2)$.
3. Antilinéarité : $(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi) = \lambda_1^* (\varphi_1, \psi) + \lambda_2^* (\varphi_2, \psi)$.

Le produit scalaire nous permet de correspondre à chaque fonction d'onde ψ une norme $\|\psi\|$:

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int \psi^* (\vec{r}, t) \psi (\vec{r}, t) d^3r = \int |\psi (\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (1.3)$$

Le nombre (ψ, ψ) est réel et positif, il est nul si $\psi (\vec{r})$ est nulle.

Si le produit scalaire $(\varphi, \psi) = 0$, on dit que les fonctions φ et ψ sont orthogonales.

Inégalité de Schwartz

$$|(\varphi, \psi)| \leq \sqrt{(\varphi, \varphi) (\psi, \psi)} \quad (1.4)$$

1.1.4 Base discrète orthonormée dans F

Définition

Soit un ensemble de fonctions $\{u_i(\vec{r})\}$, $i = 1, 2, 3, \dots$ qui appartiennent à F . Cet ensemble est dit orthonormé si :

$$\forall i, j : \quad (u_i, u_j) = \int u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d^3r = \delta_{ij} \quad (1.5)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

L'ensemble $\{u_i(\vec{r})\}$, $i = 1, 2, 3, \dots$ constitue une base dans F si toute fonction $\psi(\vec{r})$ de F peut se développer d'une façon unique sur cet ensemble :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \quad (1.6)$$

où c_i est un complexe, il représente la composante de $\psi(\vec{r})$ suivant $u_i(\vec{r})$.

La composante c_i est défini par :

$$\boxed{c_i = (u_i, \psi)}$$

Vérification : $(u_i, \psi) = \left(u_i, \sum_j c_j u_j \right) = \sum_j c_j (u_i, u_j) = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i$.

On dit que $\{c_i\}$, $i = 1, 2, 3, \dots$ représentent les composant de $\psi(\vec{r})$ dans la base $\{u_i(\vec{r})\}$.

Expression du produit scalaire

Soit $\varphi(\vec{r})$ et $\psi(\vec{r})$ deux fonctions quelconques de F avec :

$$\begin{cases} \varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i \\ \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i \end{cases}$$

alors

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi) &= \left(\sum_j b_j u_j, \sum_i c_i u_i \right) \\ &= \sum_j b_j^* \sum_i c_i (u_j, u_i) \\ &= \sum_j b_j^* \sum_i c_i \delta_{ij} \\ &= \sum_j b_j^* c_j \\ &= b_1^* c_1 + b_2^* c_2 + b_3^* c_3 + \dots \end{aligned}$$

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \sum_j b_j^* c_j}$$

Ainsi la norme de ψ sera donnée par

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= (\psi, \psi) \\ &= \sum_j c_j^* c_j \\ &= \sum_j |c_j|^2 \end{aligned}$$

$$\boxed{\|\psi\|^2 = \sum_j |c_j|^2}$$

Relation de fermeture

soit une base $\{u_i(\vec{r})\}$ de F , on peut écrire une fonction quelconque $\psi(\vec{r})$ comme suit :

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(\vec{r}) \\ &= \sum_i \left(\int u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \right) u_i(\vec{r}) \\ &= \int \left[\sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}') d^3 r' \\ &= \int F(\vec{r}', \vec{r}) \psi(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}$$

avec

$$F(\vec{r}', \vec{r}) = \sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r})$$

En utilisant la définition de la fonction $\delta(\vec{r}' - \vec{r})$ de Dirac :

$$\psi(\vec{r}) = \int \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \psi(\vec{r}') d^3 r'$$

Par identification, on obtient :

$$\boxed{\sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r})} \quad \text{Relation de fermeture}$$

D'une manière réciproque, tout ensemble orthonormé $\{u_i(\vec{r})\}$ vérifiant la relation de fermeture, alors cette ensemble constitue une base :

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{r}) &= \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3r' \\
 &= \int \sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) \psi(\vec{r}') d^3r' \\
 &= \sum_i \left[\int u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3r' \right] u_i(\vec{r}) \\
 &= \sum_i (u_i, \psi) u_i(\vec{r}) \\
 &= \sum_i c_i u_i(\vec{r})
 \end{aligned}$$

1.1.5 Base continue dans F : base n'appartenant pas à F

En mécanique quantique, on utilise parfois des bases à indice continu dans F , les fonctions constituant cette base ne sont pas de carré sommable (elles n'appartiennent pas à F). Cependant, on peut développer toutes fonctions $\psi(\vec{r})$ de F sur ces bases.

Exemple de la base des ondes planes

On se restreint aux cas unidimensionnel. Soit $\psi(x)$ une fonction d'onde de F , en utilisant la définition de la transformée de Fourier :

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} \\
 \bar{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}
 \end{aligned}$$

Soit $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ qui représente une onde plane. Evidemment, cette fonction n'app

partient pas à F car elle n'est pas de carré sommable :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |v_p(x)|^2 \quad \text{diverge}$$

On a alors :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) v_p(x) \quad (1.7)$$

On voit bien dans (1.7) que $\psi(x)$ se développe dans la base $\{v_p(x)\}$ où p est un indice continu qui prend toutes les valeurs réelles possibles de $-\infty$ à $+\infty$.

On va présenter l'analogie entre une base discrète et une base continue :

base discrète $\{u_i(x)\}$	base continue $\{v_p(x)\}$
$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$	$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) v_p(x)$
i	$\rightarrow p$
$\sum_i$	$\rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dp$
c_i	$\rightarrow \bar{\psi}(p)$
$u_i(x)$	$\rightarrow v_p(x)$

– La composante $\bar{\psi}(p) \stackrel{?}{=} (v_p, \psi(x))$. Vérification :

$$\begin{aligned} (v_p, \psi(x)) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx v_p^*(x) \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= \bar{\psi}(p) \quad \text{la relation est vérifiée} \end{aligned}$$

– Norme $(\psi, \psi) \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 :$

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^* \psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi|^2 \stackrel{\text{formule de Parseval}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2$$

– La relation de fermeture $\int_{-\infty}^{+\infty} dp v_p(x) v_p^*(x') \stackrel{?}{=} \delta(x - x') :$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dp v_p(x) v_p^*(x') &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &= \delta(x - x') \end{aligned}$$

– La relation d'orthonormalisation :

le produit scalaire entre deux fonctions de la base :

$$\begin{aligned} (v_p, v_{p'}) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ix(p'-p)/\hbar} \\ &= \delta(p' - p) \end{aligned}$$

Ce type d'orthonormalisation est dit : orthonormalisation au sens de Dirac.

Exemple de la base des fonctions δ de Dirac

Soit l'ensemble des fonctions : $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ tel que $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$, la base $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ représente l'ensemble des fonctions δ centrées aux points $\vec{r}_0(x_0, y_0, z_0)$. Les fonctions $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ ne sont pas de carré sommable : $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \notin F$.

Pour toute fonction $\psi(\vec{r}) \in F$, on peut écrire :

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0 \psi(\vec{r}_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

$\psi(\vec{r}_0) \rightarrow$ la composante

$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \rightarrow$ une fonction de la base

– la base $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ est réelle :

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0 \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \psi(\vec{r}_0)$$

et

$$\psi(\vec{r}_0) = (\xi_{\vec{r}_0}, \psi) = \int d^3r_0 \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}_0)$$

$$= \int d^3r_0 \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \psi(\vec{r}_0)$$

$$\implies \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}) = \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \implies \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \text{ est réelle}$$

– Analogie avec une base discrète :

base discrète $\{u_i(\vec{r})\}$	base continue $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$
$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0 \psi(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$
i	$\vec{r}_0$
$\sum_i$	$\int d^3r_0$
c_i	$\psi(\vec{r}_0)$
$u_i(\vec{r})$	$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

– Le produit scalaire :

$$\text{base discrète : } \varphi = \sum_i b_i u_i(\vec{r}), \psi = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \rightarrow (\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$$

$$\begin{aligned} \text{base } \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) : \varphi &= \int d^3 r_0 \varphi(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}), \psi(\vec{r}) = \int d^3 r_0 \psi(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \\ &\rightarrow (\varphi, \psi) = \int d^3 r_0 \varphi^*(\vec{r}_0) \psi(\vec{r}_0) \end{aligned}$$

– La relation d'orthonormalisation :

$$\begin{aligned} (\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}), \xi_{\vec{r}'_0}(\vec{r})) &= (\delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \delta(\vec{r} - \vec{r}'_0)) \\ &= \int d^3 r \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}'_0) \\ &= \delta(\vec{r}'_0 - \vec{r}_0) \end{aligned}$$

– La relation de fermeture :

$$\begin{aligned} \int d^3 r_0 \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') &= \int d^3 r_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \\ &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

Généralisation à une base continue quelconque $W_\alpha(\vec{r})$

Définition On appelle base orthonormée continue, un ensemble de fonction $\{W_\alpha(\vec{r})\}$ avec α un indice continu et où :

- $(W_\alpha, W_{\alpha'}) = \int d^3 r W_\alpha^*(\vec{r}) W_{\alpha'}(\vec{r}) = \delta(\alpha - \alpha') \rightarrow$ relation d'orthonormalisation.
- $\int d\alpha W_\alpha^*(\vec{r}') W_\alpha(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \rightarrow$ relation de fermeture.

– soit $\psi(\vec{r})$ une fonction de F :

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \int d^3r' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= \int d^3r' \psi(\vec{r}') \int d\alpha W_\alpha^*(\vec{r}') W_\alpha(\vec{r}) \\ &= \int d\alpha \left[\int d^3r' \psi(\vec{r}') W_\alpha^*(\vec{r}') \right] W_\alpha(\vec{r}) \\ \psi &= \int d\alpha c(\alpha) W_\alpha(\vec{r})\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}c(\alpha) &= \int d^3r' \psi(\vec{r}') W_\alpha^*(\vec{r}') \\ &= (W_\alpha, \psi)\end{aligned}$$

$c(\alpha)$ est la composante de ψ suivant W_α

Produit scalaire Soit deux fonctions φ, ψ de F :

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{r}) &= \int d\alpha b(\alpha) W_\alpha(\vec{r}) \\ \psi(\vec{r}) &= \int d\alpha c(\alpha) W_\alpha(\vec{r})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\varphi, \psi) &= \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \\ &= \int d^3r \left[\int d\alpha b^*(\alpha) W_\alpha^*(\vec{r}) \right] \left[\int d\alpha' c(\alpha') W_{\alpha'}(\vec{r}) \right] \\ &= \int d\alpha b^*(\alpha) \int d\alpha' c(\alpha') \int d^3r W_\alpha^*(\vec{r}) W_{\alpha'}(\vec{r}) \\ &= \int d\alpha b^*(\alpha) \int d\alpha' c(\alpha') \delta(\alpha - \alpha')\end{aligned}$$

$$(\varphi, \psi) = \int d\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$$

Ainsi la norme sera donnée :

$$(\psi, \psi) = \int d\alpha |c(\alpha)|^2$$

1.2 Espace des états - Notation de Dirac

1.2.1 Introduction

Dans ce qui suit, nous allons présenter la notation de Dirac de la mécanique quantique (notation Bra-Ket). Cette notation a été introduite dans le but de faciliter l'écriture et la manipulation des équations de la mécanique quantique. Essentiellement, elle met en valeur le caractère vectoriel des objets mathématiques qui sont sensés représenter les états quantiques d'un système physique.

1.2.2 Espace des états $\mathcal{E}$

Définition

Nous avons vu que l'état d'une particule est décrit par une fonction d'onde ψ de F . On construit l'espace des états, qu'on notera $\mathcal{E}$, isomorphe à l'espace F des fonctions d'onde tel qu'à toute fonction ψ de F correspond un vecteur d'état de $\mathcal{E}$. La structure de $\mathcal{E}$ est celle d'un espace vectoriel défini sur le corps des complexes.

Vecteur d'état

Un élément de l'espace des états $\mathcal{E}$ est appelé vecteur d'état ou vecteur Ket ou tout simplement ket, il est noté $|\psi\rangle$, la lettre ψ rappelle à quelle fonction d'onde est associé le ket $|\psi\rangle$, on écrit :

$$\psi(\vec{r}) \in F \rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

L'espace $\mathcal{E}$ est un espace vectoriel sur le corps des complexes $\mathbb{C}$:

1. $\forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{E} \implies |\psi\rangle + |\varphi\rangle \in \mathcal{E}$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle \\ |\chi\rangle + (|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = (|\chi\rangle + |\psi\rangle) + |\varphi\rangle \\ \qquad \qquad \qquad = |\chi\rangle + |\psi\rangle + |\varphi\rangle \end{array} \right.$$

2. $\exists$ un ket nul, noté $\mathbf{0}$

$$|\psi\rangle + \mathbf{0} = |\psi\rangle$$

3. $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $\exists$ un ket opposé (inverse) $|\neg\psi\rangle$ tel que :

$$|\psi\rangle + |\neg\psi\rangle = |\neg\psi\rangle + |\psi\rangle = \mathbf{0}$$

4. $\forall \mu, \nu \in \mathbb{C}$, $\forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{E}$:

$$- \mu (|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = \mu |\psi\rangle + \mu |\varphi\rangle$$

$$- (\mu + \nu) |\psi\rangle = \mu |\psi\rangle + \nu |\psi\rangle$$

$$- (\mu\nu) |\psi\rangle = \mu (\nu |\psi\rangle)$$

$$- 1 |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

1.2.3 Produit scalaire

On peut munir l'espace des états $\mathcal{E}$ d'un produit scalaire : à tout couple de kets $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ dans cet ordre, on associe un nombre complexe qui est le produit scalaire, on note le produit scalaire $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$:

$$|\varphi\rangle \text{ et } |\psi\rangle \in \mathcal{E} \longrightarrow (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

Propriétés :

1. $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle)^*$

2. $(|\varphi\rangle, \mu |\psi\rangle) = \mu (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$

3. $(\mu |\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \mu^* (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$
4. $(|\varphi\rangle, (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)) = (|\varphi\rangle, |\psi_1\rangle) + (|\varphi\rangle, |\psi_2\rangle)$

Ce produit scalaire nous permet de définir une norme pour chaque ket $|\psi\rangle$:

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{(|\psi\rangle, |\psi\rangle)} \quad \text{et } (|\psi\rangle, |\psi\rangle) \text{ est un nombre positif, il est nul lorsque } |\psi\rangle \text{ est nul}$$

On dit que deux kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont orthogonaux, si leur produit scalaire est nul :

$$(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = 0.$$

1.2.4 Vecteur Bra et espace dual $\mathcal{E}^*$

L'espace dual $\mathcal{E}^*$ de l'espace des états $\mathcal{E}$ est l'espace des formes linéaires qui associent à tout vecteur ket $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$ un nombre complexe :

$$\begin{aligned} f \in \mathcal{E}^* : \mathcal{E} &\rightarrow \mathbb{C} \\ |\psi\rangle &\rightarrow f(|\psi\rangle) \end{aligned}$$

Le produit scalaire qu'on vient de définir dans $\mathcal{E}$ nous permet d'associer à tout ket $|\psi\rangle$ une forme linéaire A_ψ de $\mathcal{E}^*$ tel que :

$$\begin{aligned} A_\psi \in \mathcal{E}^* : \mathcal{E} &\rightarrow \mathbb{C} \\ |\varphi\rangle &\rightarrow A_\psi(|\varphi\rangle) = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \end{aligned}$$

on appelle un élément A_ψ quelconque de $\mathcal{E}^*$ un Bra et on va le noter $\langle\psi|$.

Ainsi :

- A tout ket $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$, on associe un bra $\langle\psi|$ de $\mathcal{E}^*$.
- Le produit scalaire $(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ de $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ dans cet ordre sera noter dorénavant $\langle\psi|\varphi\rangle$.

- La norme de $|\psi\rangle$ sera : $\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$.
- L'espace $\mathcal{E}^*$ est un espace vectoriel sur le corps des complexes.
- La correspondance Ket - Bra est antilinéaire :

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|$$

$$\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \rightarrow \lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2|$$

1.2.5 Les opérateur linéaire

Définition dans F

Un opérateur linéaire A est un être mathématique qui associe à toute fonction $\psi(\vec{r})$ de F une autre fonction $\varphi(\vec{r})$ de F :

$$A\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})$$

Cette correspondance est linéaire :

$$A(\lambda_1\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\psi_2(\vec{r})) = \lambda_1 A\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\vec{r})$$

Exemple :

1. L'opérateur dérivation par rapport à x qu'on va noter $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$:

$$D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x}$$

2. L'opérateur multiplication par x qu'on va noter X :

$$X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

Définition dans $\mathcal{E}$

De la même façon, un opérateur linéaire A qui agit dans $\mathcal{E}$ fait correspondre à chaque ket $|\psi\rangle$ un autre ket $|\varphi\rangle$:

$$A|\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

Cette correspondance est linéaire :

$$A(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$$

On appelle élément de matrice de l'opérateur A entre les kets $|\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle$ le produit scalaire $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ qui est un nombre complexe.

On appelle l'opérateur unité et on le note $\mathbf{1}$ tel que $\forall A : A\mathbf{1} = \mathbf{1}A = A$.

Produit d'opérateur

Le produit de deux opérateurs A et B est aussi un opérateur :

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

c'est à dire

$$(AB)|\psi\rangle \equiv \text{On fait agir } B \text{ sur } |\psi\rangle \text{ puis on fait agir } A \text{ dans cet ordre.}$$

En général, le produit d'opérateurs n'est pas commutatif, c'est à dire $AB \neq BA$. On définit le commutateur de A et B , qu'on note $[A, B]$ par

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

Le commutateur $[A, B]$ est un opérateur qui nous informe sur la commutativité ou la non commutativité du produit d'opérateurs AB :

- Si $[A, B] = 0$ on dit que les opérateurs A et B commutent.
- Si $[A, B] \neq 0$ on dit que les opérateurs A et B ne commutent pas.

Exemple important : Le commutateur $[X, P_x]$

On a déjà vu que la projection de l'impulsion $\vec{P}$ sur l'axe x , notée P_x est représentée dans l'espace F par l'opérateur $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar D_x$$

Calculons le commutateur $[X, P_x]$, on doit le faire agir sur une fonction d'onde quelconque $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} [X, P_x] \psi(x) &= (XP_x - P_xX) \psi(x) \\ &= -i\hbar (XD_x - D_xX) \psi(x) \\ &= -i\hbar (XD_x\psi - D_xX\psi) \\ &= -i\hbar \left(X \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - D_x(x\psi) \right) \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial (x\psi)}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \right) \\ &= i\hbar \psi(x) \\ &\implies \boxed{[X, P_x] = i\hbar} \end{aligned}$$

Propriétés des commutateurs : A, B, C trois opérateurs linéaires.

1. $[A, B] = -[B, A]$.

2. $[A, (B + C)] = [A, B] + [A, C]$
3. $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
4. $[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [A, [B, C]] = 0$

Projecteurs

On sait que le produit scalaire $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$ est un nombre complexe. Quelle est la nature de l'objet mathématique $|\psi\rangle\langle\varphi|$?

$$(|\psi\rangle\langle\varphi|)|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle|\psi\rangle = |\psi'\rangle \implies \boxed{|\psi\rangle\langle\varphi| \text{ est un opérateur}}.$$

Quelques Propriétés : Soit $\lambda \in \mathbb{C}$:

1. $|\psi\rangle\lambda = \lambda|\psi\rangle$.
2. $\langle\psi|\lambda = \lambda\langle\psi|$.
3. $\langle\varphi|\lambda|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\lambda$.

Soit un ket $|\psi\rangle$ normé $\iff \langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Soit l'opérateur $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, appliquons P_ψ sur un ket quelconque $|\varphi\rangle$:

$$\implies P_\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle\langle\psi|)|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle|\psi\rangle$$

$$\implies P_\psi|\varphi\rangle \text{ est proportionnel à } |\psi\rangle \text{ et le facteur de proportionnalité est le produit scalaire } \langle\psi|\varphi\rangle$$

Par analogie avec la géométrie dans l'espace ordinaire, l'action de P_ψ sur un ket quelconque $|\varphi\rangle$ se résume à la projection de ce ket ($|\varphi\rangle$) sur le ket $|\psi\rangle$. Donc $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ est l'opérateur projecteur sur le ket $|\psi\rangle$.

Calculons

$$P_\psi^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_1\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

$$\implies \boxed{P_\psi^2 = P_\psi}$$

Conjugaison hermétique

Opérateur adjoint soit un $|\psi\rangle$ ket quelconque de $\mathcal{E}$, on fait correspondre à chaque $|\psi\rangle$ un bra $\langle\psi|$ de $\mathcal{E}^*$. Soit A un opérateur linéaire qui agit dans $\mathcal{E}$ tel que :

$$\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}^*$$

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle\psi|$$

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

$$|\psi'\rangle \rightarrow \langle\psi'|$$

On associe à l'opérateur A qui agit dans $\mathcal{E}$, un opérateur qui agit dans $\mathcal{E}^*$, qu'on appelle opérateur adjoint (conjugué), qu'on note A^+ de sorte que :

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \rightarrow \langle\psi'| = \langle\psi| A^+$$

Remarque importante : l'action de A^+ sur $\langle\psi|$ s'écrit $\langle\psi| A^+$, non $A^+ \langle\psi|$

Relation importante :

$$\begin{aligned} \langle\psi| (A|\varphi\rangle) &= \langle\psi| A|\varphi\rangle \\ &= (|\psi\rangle, A|\varphi\rangle) \\ &= (A|\varphi\rangle, |\psi\rangle)^* \\ &= ((\langle\psi| A^+) |\varphi\rangle)^* \\ &= \langle\varphi| A^+ |\psi\rangle^* \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A^+ | \psi \rangle^*}$$

Quelques Propriétés (à démontrer) : Soit $\lambda \in \mathbb{C}$:

1. $(A^+)^+ = A$.
2. $(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$.
3. $(A+B)^+ = A^+ + B^+$.
4. $(AB)^+ = B^+ A^+$.

Exemple : l'opérateur adjoint de $|\psi\rangle \langle \varphi|$:

$$\begin{aligned} \langle \chi | (|\psi\rangle \langle \varphi|) | \phi \rangle &= \langle \chi | \psi \rangle \langle \varphi | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \chi \rangle^* \langle \phi | \varphi \rangle^* \\ &= \langle \phi | \varphi \rangle^* \langle \psi | \chi \rangle^* \\ &= (\langle \phi | \varphi \rangle \langle \psi | \chi \rangle)^* \\ &= \langle \phi | (|\varphi\rangle \langle \psi|) | \chi \rangle^* \end{aligned}$$

Mais par définition $\langle \chi | (|\psi\rangle \langle \varphi|) | \phi \rangle = \langle \phi | (|\psi\rangle \langle \varphi|)^+ | \chi \rangle^*$

$$\implies \boxed{(|\psi\rangle \langle \varphi|)^+ = (|\varphi\rangle \langle \psi|)}$$

On dit qu'un opérateur linéaire A est hermétique s'il est identique à son opérateur adjoint A^+ :

$$A \text{ hermétique : } A = A^+$$

Exemple : d'opérateur hermétique le projecteur $P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$

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

$$\boxed{P_\psi^+ = P_\psi \implies P_\psi \text{ est hermétique}}$$

Conjugaison hermétique : Dans la notation de Dirac 4 types d'objets mathématiques :

1. Le nombre complexe λ : son conjugué hermétique est λ^* qui le conjugué complexe.
2. Le ket $|\psi\rangle$: son conjugué hermétique est le bra $\langle\psi|$.
3. Le bra $\langle\varphi|$: son conjugué hermétique est le ket $|\varphi\rangle$.
4. L'opérateur A : son conjugué hermétique est l'opérateur adjoint A^+ .

Pour obtenir le conjugué hermétique d'une expression quelconque, on doit :

– Remplacer :

1. Les nombres complexes (les constantes) par leurs conjugué complexe.
2. Les kets par leurs bras associés.
3. Les bras par leurs kets associés.
4. Les opérateurs par leurs adjoints.

– Inverser l'ordre des facteurs, la position des nombres complexes n'est pas importante.

Exemple :

$$(\lambda \langle\chi| A |\psi\rangle \langle\varphi| B |\phi\rangle)^* = \lambda^* \langle\phi| B^+ |\varphi\rangle \langle\psi| A^+ |\chi\rangle$$

Fonction d'un opérateur

Soit A un opérateur linéaire, $n \in \mathbb{N}^*$.

On définit l'opérateur A^n qui correspond à n applications successives de A .

On définit l'opérateur inverse A^{-1} tel que : $A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbf{1}$ (opérateur identité).

Soit $F(z)$ une fonction de la variable z , si dans un certain domaine F se développe en série entière de z :

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$$

alors on peut définir la fonction $F(A)$ comme un opérateur donnée par :

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A^n$$

Exemple :

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \implies e^A = 1 + A + \frac{A^2}{2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

On peut définir la dérivée d'un opérateur :

$$\frac{dA}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{A(t + \Delta t) - A(t)}{\Delta t}$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{d(A+B)}{dt} &= \frac{dA}{dt} + \frac{dB}{dt} \\ \frac{d(AB)}{dt} &= \frac{dA}{dt}B + A\frac{dB}{dt} \end{aligned}$$

Opérateur unitaire

Un opérateur U est dit unitaire, si son adjoint est égale à son inverse :

$$U^{-1} = U^+ \text{ et } U^+U = UU^+ = \mathbf{1}$$

Soit

$$|\psi'_1\rangle = U |\psi_1\rangle$$

et

$$|\psi'_2\rangle = U |\psi_2\rangle \rightarrow \langle\psi'_2| = \langle\psi_2| U^\dagger$$

$$\implies \langle\psi'_2|\psi'_1\rangle = \langle\psi_2| U^\dagger U |\psi_1\rangle = \langle\psi_2| \mathbf{1} |\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

On dit que l'action d'un opérateur unitaire conserve le produit scalaire.

1.2.6 Représentation dans l'espace des états $\mathcal{E}$

Le choix d'une représentation de l'espace des états $\mathcal{E}$ est tout simplement le choix d'une base orthonormée de l'espace des états avec laquelle on exprimera les kets les bras et les opérateurs.

Base orthonormée dans $\mathcal{E}$

Relation d'orthonormalisation Un ensemble de kets discret $\{|U_i\rangle\}$ ou continu $\{|W_\alpha\rangle\}$ est dit orthonormé si :

1. $\forall i, j : \langle U_j | U_i \rangle = \delta_{ij}$ (ensemble discret).
2. $\forall \alpha, \alpha' : \langle W_{\alpha'} | W_\alpha \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ (ensemble continu).

Base l'ensemble orthonormé $\{|U_i\rangle\}$ ou $\{|W_\alpha\rangle\}$ constitue une base dans $\mathcal{E}$, si tout ket $|\psi\rangle$ peut s'écrire de façon unique :

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |U_i\rangle \rightarrow c_i = \langle U_i | \psi \rangle$$

où

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |W_\alpha\rangle \rightarrow c(\alpha) = \langle W_\alpha | \psi \rangle$$

on a

$$\begin{aligned} \langle W_\alpha | \psi \rangle &= \int d\alpha' c(\alpha') \langle W_\alpha | W_{\alpha'} \rangle \\ &= \int d\alpha' c(\alpha') \delta(\alpha - \alpha') \\ &= c(\alpha) \end{aligned}$$

Remarque : Les ket $|W_\alpha\rangle \notin \mathcal{E}$ mais les kets de $\mathcal{E}$ peuvent se développer suivant $\{|W_\alpha\rangle\}$.

Relation de fermeture

Base discrète

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |U_i\rangle \\ &= \sum_i \langle U_i | \psi \rangle |U_i\rangle \\ &= \sum_i |U_i\rangle \langle U_i | \psi \rangle \\ &= \left(\sum_i |U_i\rangle \langle U_i| \right) |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_i |U_i\rangle \langle U_i| = \mathbf{1}}$$

Base continue

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int d\alpha c(\alpha) |W_\alpha\rangle \\ &= \int d\alpha \langle W_\alpha | \psi \rangle |W_\alpha\rangle \\ &= \int d\alpha |W_\alpha\rangle \langle W_\alpha | \psi \rangle \\ &= \left(\int d\alpha |W_\alpha\rangle \langle W_\alpha| \right) |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\int d\alpha |W_\alpha\rangle \langle W_\alpha| = \mathbf{1}}$$

Représentation des kets

Base discrète : $\{|U_i\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |U_i\rangle \rightarrow c_i = \langle U_i | \psi \rangle$$

Le ket $|\psi\rangle$ est représenté par une matrice colonne :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle U_1 | \psi \rangle \\ \langle U_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle U_i | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Base continue : $\{|W_\alpha\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |W_\alpha\rangle \rightarrow c(\alpha) = \langle W_\alpha | \psi \rangle$$

Le ket $|\psi\rangle$ est représenté par une matrice colonne :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ c(\alpha) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Représentation des bras

Base discrète : $\{|U_i\rangle\}$

$$\langle\psi| = \langle\psi|\mathbf{1} = \langle\psi|\sum_i |U_i\rangle\langle U_i| = \sum_i \langle\psi|U_i\rangle\langle U_i| = \sum_i \langle U_i|\psi\rangle^* \langle U_i| = \sum_i \langle U_i|c_i^*$$

Le bra $\langle\psi|$ est représenté par une matrice ligne :

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^*, \dots, c_i^*, \dots) = (\langle\psi|U_1\rangle, \langle\psi|U_2\rangle, \dots, \langle\psi|U_i\rangle, \dots)$$

Base continue : $\{|W_\alpha\rangle\}$

$$\langle\psi| = \int d\alpha c^*(\alpha) \langle W_\alpha| \rightarrow c^*(\alpha) = \langle\psi|W_\alpha\rangle$$

Le bra $\langle\psi|$ est représenté par une matrice ligne :

$$\langle\psi| = (\dots, c^*(\alpha), \dots) = (\dots, \langle\psi|W_\alpha\rangle, \dots)$$

Représentation des opérateurs

Base discrète : $\{|U_i\rangle\}$

$$\begin{aligned}
A &= \mathbf{1A1} \\
&= \left(\sum_i |U_i\rangle \langle U_i| \right) A \left(\sum_j |U_j\rangle \langle U_j| \right) \\
&= \sum_{i,j} |U_i\rangle \langle U_i| A |U_j\rangle \langle U_j| \\
&= \sum_{i,j} A_{ij} |U_i\rangle \langle U_j|
\end{aligned}$$

avec $A_{ij} = \langle U_i | A | U_j \rangle \rightarrow$ élément de matrice de A

L'opérateur A est représenté par une matrice carré :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Base continue : $\{|W_\alpha\rangle\}$

L'élément de matrice de $A \rightarrow A(\alpha, \alpha') = \langle W_\alpha | A | W_{\alpha'} \rangle$

L'opérateur A est représenté par une matrice carré :

$$A = \begin{pmatrix} \dots & c|c: & \dots \\ \dots & \vdots & \dots \\ \dots & A(\alpha, \alpha') & \dots \\ \dots & c|c: & \dots \\ \dots & \vdots & \dots \end{pmatrix}$$

Représentation de l'opérateur adjoint A^+ :

L'opérateur adjoint A^+ est aussi représenté par une matrice carrée. Comment calculer ses éléments de matrices ?

$$\text{Base discrète : } (A^+)_{ij} = \langle U_i | A^+ | U_j \rangle = \langle U_j | A | U_i \rangle^* = A_{ji}^*$$

$$\text{Base continue : } A^+ (\alpha, \alpha') = [A (\alpha, \alpha')]^*$$

Donc les matrices représentant A et A^+ sont hermitiques conjuguées l'une de l'autre.

Trace d'un opérateur A :

Dans une base discrète, la trace d'un opérateur A est défini par

$$\begin{aligned} \text{Tr}(A) &= \sum_i \langle U_i | A | U_i \rangle \\ &= \text{La somme des éléments diagonaux} \end{aligned}$$

Dans une base continue

$$\text{Tr}(A) = \int d\alpha \langle W_\alpha | A | W_\alpha \rangle$$

Exemple de représentations continue dans $\mathcal{E}$

Les représentations $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$: Dans l'espace des fonctions d'ondes F nous avons introduit deux bases continues qui n'appartenaient pas à F et qui sont :

$$\begin{cases} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \\ v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar} \end{cases}$$

nous allons faire correspondre à chacune de ces bases dans F , des bases dans $\mathcal{E}$:

$$\begin{aligned} \{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\} &\rightarrow \{|\vec{r}_0\rangle\} \\ \{v_{\vec{p}_0}(\vec{r})\} &\rightarrow \{|\vec{p}_0\rangle\} \end{aligned}$$

Relations d'orthonormalisation et de fermeture :

Relation d'orthonormalisation :

$$\begin{aligned}(|\vec{r}_0\rangle, |\vec{r}'_0\rangle) &= \langle \vec{r}_0 | \vec{r}'_0 \rangle = \int d\vec{r} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \xi_{\vec{r}'_0}(\vec{r}) \\ &= \int d\vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}'_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \\ &= \delta(\vec{r}'_0 - \vec{r}_0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(|\vec{p}_0\rangle, |\vec{p}'_0\rangle) &= \langle \vec{p}_0 | \vec{p}'_0 \rangle = \int d\vec{r} v_{\vec{p}_0}^*(\vec{r}) v_{\vec{p}'_0}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} e^{i(\vec{p}'_0 - \vec{p}_0)\vec{r}/\hbar} \\ &= \delta(\vec{p}'_0 - \vec{p}_0)\end{aligned}$$

Relation de fermeture :

$$\begin{aligned}\int d\vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0| &= \mathbf{1} \\ \int d\vec{p}_0 |\vec{p}_0\rangle \langle \vec{p}_0| &= \mathbf{1}\end{aligned}$$

Composante d'un ket :

Dans la base $\{|\vec{r}_0\rangle\}$:

Calculons

$$\langle \vec{r}_0 | \psi \rangle = (|\vec{r}_0\rangle, |\psi\rangle) = \int d\vec{r} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0)$$

Dans la base $\{|\vec{p}_0\rangle\}$:

Calculons

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}_0 | \psi \rangle &= (|\vec{p}_0\rangle, |\psi\rangle) = \int d\vec{r} v_{\vec{p}_0}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r}) \\ &= \bar{\psi}(\vec{p}_0)\end{aligned}$$

Ainsi : la valeur $\psi(\vec{r}_0)$ de la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ au point $\vec{r} = \vec{r}_0$ apparait comme la composante de $|\psi\rangle$ sur le ket $|\vec{r}_0\rangle$.

$$|\psi\rangle = \mathbf{1} |\psi\rangle = \int d\vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle = \int d\vec{r}_0 \underbrace{\langle \vec{r}_0 | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r}_0)} |\vec{r}_0\rangle$$

De même $\bar{\psi}(\vec{p}_0)$ apparait comme la composante du ket $|\psi\rangle$ sur le ket $|\vec{p}_0\rangle$.

$$|\psi\rangle = \mathbf{1} |\psi\rangle = \int d\vec{p}_0 |\vec{p}_0\rangle \langle \vec{p}_0 | \psi \rangle = \int d\vec{p}_0 \underbrace{\langle \vec{p}_0 | \psi \rangle}_{\bar{\psi}(\vec{p}_0)} |\vec{p}_0\rangle$$

Si on remplace $|\vec{r}_0\rangle$ et $|\vec{p}_0\rangle$ par respectivement $|\vec{r}\rangle$ et $|\vec{p}\rangle$

$$\begin{array}{l} \text{Orthonormalisation} \\ \text{Fermeture} \\ \text{et} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \\ \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \\ \int d\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbf{1} \\ \int d\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \mathbf{1} \\ \langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) \\ \langle \vec{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\vec{p}) \end{array} \right.$$

Produit scalaire :

Dans $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \langle\varphi|\mathbf{1}|\psi\rangle = \int d\vec{r} \langle\varphi|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \int d\vec{r} \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})\end{aligned}$$

Dans $\{|\vec{p}\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \langle\varphi|\mathbf{1}|\psi\rangle = \int d\vec{p} \langle\varphi|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\psi\rangle \\ &= \int d\vec{p} \bar{\varphi}(\vec{p}) \bar{\psi}(\vec{p})\end{aligned}$$

Passage entre composantes :

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} = \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle^*$$

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}|\psi\rangle &= \langle\vec{r}|\mathbf{1}|\psi\rangle = \int d\vec{p} \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\psi\rangle \\ \psi(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \bar{\psi}(\vec{p})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}|\psi\rangle &= \langle\vec{p}|\mathbf{1}|\psi\rangle = \int d\vec{r} \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ \bar{\psi}(\vec{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r})\end{aligned}$$

On retrouve donc le fait que $\psi(\vec{r})$ et $\bar{\psi}(\vec{p})$ sont reliées par la transformation de Fourier.

Equation aux valeurs propres - Observables

Equation aux valeurs propres

Définition :

On dit que le ket $|\psi\rangle$ est *vecteur propre* de l'opérateur A si

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

où λ est un nombre complexe appelé *valeur propre* de A correspondant au vecteur propre $|\psi\rangle$.

L'ensemble des valeurs propres de l'opérateur A est appelé *spectre de A* .

Remarques :

- Si $|\psi\rangle$ est *vecteur propre* de l'opérateur A avec la *valeur propre* λ , alors tout ket $\alpha|\psi\rangle$ avec α complexe est aussi *vecteur propre* de l'opérateur A avec la *valeur propre* λ :

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle &\implies A(\alpha|\psi\rangle) = \alpha A|\psi\rangle = \alpha\lambda|\psi\rangle \\ &\implies A(\alpha|\psi\rangle) = \lambda(\alpha|\psi\rangle) \end{aligned}$$

- Si $|\psi\rangle$ est *vecteur propre* de l'opérateur A avec la *valeur propre* λ et si $F(A)$ est une fonction de l'opérateur A , alors $|\psi\rangle$ est aussi *vecteur propre* de l'opérateur $F(A)$ avec la *valeur propre* $F(\lambda)$:

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle &\implies F(A)|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A^n |\psi\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n |\psi\rangle \\ &= F(\lambda)|\psi\rangle \end{aligned}$$

Dégénérescence :

Lorsque à la valeur propre λ de A correspondent g vecteurs propres qui sont linéairement indépendants, la valeur propre λ est dite *dégénérée*.

g est appelé *degré de dégénérescence*. On écrit :

$$A |\psi^i\rangle = \lambda |\psi^i\rangle \quad i = 1, 2, \dots, g$$

Les kets $\{|\psi^i\rangle\}$ sont linéairement indépendants :

$$\langle \psi^i | \psi^j \rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots, g$$

L'ensemble $\{|\psi^i\rangle\}$ engendre un sous-espace dans l'espace des états de dimension g . On dit que la valeur propre dégénérée λ engendre un sous-espace.

Recherche des valeurs propres :

Soit un espace des états de dimension N . L'opérateur A est représenté par une matrice carrée $N \times N$. La recherche des vecteurs propres et des valeurs propres associées de A revient à la résolution de l'équation aux valeurs propres

$$A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \tag{1.8}$$

L'équation (1.8) admet une solution non triviale si

$$\det (A - \lambda \mathbf{1}) = 0 \tag{1.9}$$

l'équation (1.9) est appelée *équation caractéristique*. C'est une équation de degré N en λ . Elle a N racines en λ dont certaines peuvent être confondues. Les valeurs propres de A sont donc les racines de l'équation caractéristique.

Observable

Définition : une *observable* est un opérateur hermétique dont les vecteurs propres forment une base de l'espace des états.

Propriétés :

1. Si A est un opérateur hermétique alors ses valeurs propres sont réelles

Preuve : A un opérateur hermétique : $A = A^+$. Soit $|\psi\rangle$ un *vecteur propre* de l'opérateur A avec la *valeur propre* λ

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Conjugaison}} \langle\psi|A^+ = \langle\psi|\lambda^*$$

alors

$$\begin{aligned} \langle\psi|(A|\psi\rangle) &= (\langle\psi|A^+)|\psi\rangle \implies \langle\psi|(\lambda|\psi\rangle) = (\langle\psi|\lambda^*)|\psi\rangle \\ &\implies \lambda\langle\psi|\psi\rangle = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle \\ &\implies \lambda = \lambda^* \\ &\implies \lambda \text{ réel} \end{aligned}$$

2. Si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont des kets propres de A (hermétique) avec des valeurs propres différentes, alors $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont orthogonaux : $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$.

Preuve :

$$\begin{cases} A|\psi_1\rangle = \lambda|\psi_1\rangle \\ A|\psi_2\rangle = \mu|\psi_2\rangle \end{cases} \text{ avec } \lambda \neq \mu$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle &= \lambda \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \mu \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \\
\implies (\lambda - \mu) \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle &= 0 \\
\implies \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle &= 0
\end{aligned}$$

Quelques théorèmes importants :

Soit A et B deux observables qui commutent, si $|\psi_1\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre λ_1 , alors $B|\psi_1\rangle$ est ket propre de A avec la même valeur propre λ_1 .

Soit A et B deux observables qui commutent, si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont des kets propres de A pour des valeurs propres différentes, alors l'élément de matrice $\langle \psi_2 | B | \psi_1 \rangle$ est nul.

Si deux observables A et B commutent, alors on peut toujours construire dans l'espace des états $\mathcal{E}$ une base orthonormée formée par des vecteurs propres communs à A et B , c'est à dire, il existe une base orthonormée dans laquelle A et B sont simultanément diagonalisées.

Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC) :

Par définition, un ensemble d'observables $A, B, C, \dots$ est appelé ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC) si :

1. toutes les observables $A, B, C, \dots$ commutent deux à deux.
2. la donnée des valeurs propres de toutes les observables $A, B, C, \dots$ suffit à déterminer un vecteur propre commun unique (à un facteur multiplicatif près).

Une définition équivalente est la suivante : Un ensemble d'observables $A, B, C, \dots$ est un ensemble complet d'observables qui commutent s'il existe une base orthonormée de vecteurs propres communs, et si cette base est unique (aux facteurs de phase près).

1.3 Exercices

Exercice 1 :

Les fonctions d'ondes stationnaires d'une particule piégée dans une boîte unidimensionnelle de largeur a :

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{avec } n = 1, 2, 3, \dots$$

constituent une base orthonormée dans l'espace F . Vérifier que l'ensemble $\{\phi_n(x)\}$ est orthonormé (utiliser : $2 \sin A \sin B = \cos(A - B) - \cos(A + B)$).

La particule précédente est décrite par la fonction d'onde :

$$\psi(x) = C \sin^3 \frac{\pi x}{a}$$

1. Exprimer $\psi(x)$ dans la base $\{\phi_n(x)\}$. (utiliser : $\sin 3\theta = 3 \sin \theta - 4 \sin^3 \theta$)
2. Normaliser $\psi(x)$.
3. Calculer la valeur moyenne de l'hamiltonien du système $\widehat{H} = \frac{\widehat{P}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$.

Exercice 2 :

Obtenir des expressions détaillées pour les opérateurs suivants :

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2, \quad \left(x \frac{d}{dx}\right)^2, \quad \left(\frac{d}{dx}(x)\right)^2.$$

Exercice 3 :

Trouver la valeur de la constante A qui rend la fonction $\exp(-\lambda x^2)$ fonction propre de l'opérateur $\left(\frac{d^2}{dx^2} + Ax^2\right)$. Quelle est la valeur propre correspondante ?

Exercice 4 :

L'opérateur $\left(x + \frac{d}{dx}\right)$ a une valeur propre λ . Obtenir la fonction propre correspondante.

Exercice 5 :

Parmi les fonction suivantes, quelles sont les fonctions propres de l'opérateur $\frac{d^2}{dx^2}$? Pour toute fonction propre trouver la valeur propre correspondante :

1. $\psi = A \sin mx$.

2. $\psi = B \cos nx$.

3. $\psi = Cx^2$.

4. $\psi = D/x$.

5. $\psi = E e^{-mx}$.

Exercice 6 :

1. On considère l'opérateur

$$\widehat{Q} = i \frac{d}{d\phi},$$

où ϕ est la coordonnée polaire à deux dimensions. Trouver les fonctions propres et les valeurs propres correspondantes.

2. On considère l'opérateur

$$\widehat{Y} = \frac{d^2}{d\phi^2},$$

est-il hermitien ? Trouver les fonctions propres et les valeurs propres correspondantes.

Exercice 7 :

1. On considère trois opérateurs $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ et $\widehat{C}$. Montrer que :

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

2. Montrer que :

$$[\widehat{X}^n, \widehat{P}_x] = i\hbar n \widehat{X}^{n-1}$$

3. Montrer que :

$$[f(\widehat{X}), \widehat{P}_x] = i\hbar f'(\widehat{X}) \quad \forall f(x)$$

Exercice 8 :

1. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles.
2. Montrer que si deux fonctions propres d'un opérateur hermitien sont associées à deux valeurs propres distinctes, alors elles sont orthogonales.

Exercice 9 :

On définit l'opérateur parité $\hat{P}$ par :

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \quad \forall \psi(x)$$

1. Montrer que $\hat{P}$ est hermitien.
2. Montrer que ses valeurs propres sont ± 1 .
3. Montrer que toute fonction $\psi(x)$ peut être exprimée comme une somme d'une fonction paire et d'une fonction impaire.

Exercice 10 :

Montrer que tout opérateur peut être exprimé comme une combinaison de deux opérateurs hermitiens.

Exercice 11 :

1. Montrer que si deux opérateurs hermitiens $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent et si $\phi(x)$ est fonction propre de $\hat{A}$ avec la valeur propre a alors $\hat{B}\phi(x)$ est fonction propre de $\hat{A}$ avec la même valeur propre a .
2. Montrer que si deux opérateurs hermitiens $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent et si $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$ sont fonctions propres de $\hat{A}$ pour deux valeurs propres distinctes a_1 et a_2 , alors $(\phi_1, \hat{B}\phi_2) = 0$.

Exercice 12 :

On considère un opérateur Q dont les vecteurs propres forment une base orthonormée de l'espace des états :

$$Q|e_n\rangle = q_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Montrer que cet opérateur peut s'écrire sous la forme suivante :

$$Q = \sum_n q_n |e_n\rangle \langle e_n| \quad (\text{représentation spectrale de } Q)$$

Exercice 13 :

On dit qu'un opérateur Q est anti-hermitien si :

$$Q^+ = -Q$$

1. Montrer que la valeur moyenne d'un opérateur anti-hermitien est imaginaire.
2. Montrer que le commutateur de deux opérateurs hermitiens est anti-hermitien. Que peut-on dire du commutateur de deux opérateurs anti-hermitiens ?

Exercice 14 :

On considère un système physique ne possédant que deux états linéairement indépendants :

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

L'état du système le plus général est une combinaison linéaire de la forme :

$$|s\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \text{avec } |a|^2 + |b|^2 = 1$$

L'hamiltonien du système est exprimé sous la forme matricielle suivante :

$$H = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

où h et g sont des constantes réelles.

Si l'état du système à $t = 0$ est $|1\rangle$, que sera l'état du système à un instant ultérieur t ?

Exercice 15 :

On considère un espace des états engendré par la base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Deux kets $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ sont donnés par :

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

1. Construire $\langle\alpha|$, $\langle\beta|$ dans la base duale $\{\langle 1|, \langle 2|, \langle 3|\}$.
2. Trouver $\langle\alpha|\beta\rangle$ et $\langle\beta|\alpha\rangle$ et vérifier que $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$.
3. Trouver l'expression matricielle de l'opérateur $A = |\alpha\rangle\langle\beta|$. Est-il hermitien ?

Exercice 16 :

L'hamiltonien d'un système physique à deux niveaux est donné par :

$$H = \epsilon (|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

où $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ est une base orthonormée et ϵ est un nombre ayant la dimension d'une énergie. Trouver ces valeurs propres et ses vecteurs propres (comme une combinaison linéaire de $|1\rangle$ et $|2\rangle$). Trouver la représentation matricielle de H .

Exercice 17 :

Soit un espace des états $\mathcal{E}$ à deux dimensions, muni d'une base orthonormée $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle\}$ tel que :

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

On considère un opérateur X qui agit dans $\mathcal{E}$ tel que :

$$X |a_1\rangle = |a_1\rangle + 2i |a_2\rangle$$

$$X |a_2\rangle = -2i |a_1\rangle + |a_2\rangle$$

1. Trouver la représentation matricielle de X .
2. Calculer les valeurs propres λ_1 et λ_2 et les vecteurs propres normalisés correspondants $|\mu_1\rangle$ et $|\mu_2\rangle$ de l'opérateur X .
3. Montrer que $|\mu_1\rangle$ et $|\mu_2\rangle$ sont orthogonaux.
4. Trouver la représentation matricielle des opérateurs $P_1 = |\mu_1\rangle\langle\mu_1|$ et $P_2 = |\mu_2\rangle\langle\mu_2|$.
Montrer que P_1 et P_2 sont des projecteurs.
5. Vérifier que :
 - $P_1 + P_2 = I$, la matrice identité.
 - $\lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 = X$.
 - $\lambda_1^2 P_1 + \lambda_2^2 P_2 = X^2$.
 - $\frac{1}{\lambda_1} P_1 + \frac{1}{\lambda_2} P_2 = X^{-1}$. L'opérateur inverse de X .

Exercice 18 :

On considère un système physique avec un espace des états $\mathcal{E}$ de dimensions 3. Une base orthonormée de l'espace des états est choisit de sorte que l'hamiltonien H est représentée par la matrice :

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

1. Quels sont les résultats possibles lorsque l'énergie du système est mesurée ?

2. Une particule est dans l'état $|\psi\rangle$ représenté dans cette base par $\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} i \\ -i \\ i \end{pmatrix}$. Trouver $\langle H \rangle, \langle H^2 \rangle$ et ΔH .

Exercice 19 :

On considère un système physique avec un espace des états $\mathcal{E}$ de dimensions 3, muni d'une base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ tel que :

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- I) l'hamiltonien H du système est une observable qui agit dans $\mathcal{E}$ de sorte que :

$$H |u_1\rangle = |u_1\rangle - |u_2\rangle$$

$$H |u_2\rangle = -|u_1\rangle + |u_2\rangle$$

$$H |u_3\rangle = -|u_3\rangle$$

1. Trouver la représentation matricielle de H .
2. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés correspondants de l'hamiltonien H .
3. Quels sont les résultats possibles lorsque l'énergie du système est mesurée ?
4. L'état du système est décrit par le ket $|\psi\rangle$ représenté par $\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} i \\ -i \\ i \end{pmatrix}$. Trouver $\langle H \rangle, \langle H^2 \rangle$ et ΔH .

– II) Une observable A est représentée dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ par la matrice :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

1. On effectue une mesure de l'énergie du système et on trouve la valeur -1 . Juste après, On procède à une mesure de A . Donner les résultats possibles et la probabilité correspondant à chaque résultat obtenu.
2. Calculer ΔA .

Remarque :

Quelques parties des exercices proposés nécessitent des concepts du chapitre deux .

Chapitre 2

Postulats de la mécanique quantique

2.1 Enoncé des postulats

Postulat I : (*état d'un système*)

Tout système quantique est complètement défini à l'instant t par un vecteur d'état (ket) $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}$. La connaissance de $|\psi(t)\rangle$ à l'instant donné t permet d'obtenir toutes les informations accessibles concernant le système.

Postulat II : (*grandeurs physiques*)

A chaque grandeur physique $\mathcal{A}$ (position, impulsion, énergie, moment cinétique), correspond une observable A agissant dans l'espace des états $\mathcal{E}$. Les seuls résultats de mesure possibles de la grandeur physique $\mathcal{A}$ sont les valeurs propres de l'opérateur A .

Construction des observables : (principe de correspondance)

1. A la position $\vec{r}(x, y, z)$ de la particule est associée l'observable (opérateur hermitique) $\vec{R}(X, Y, Z)$ qui agit dans l'espace des états $\mathcal{E}$.

2. A l'impulsion $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ de la particule est associée l'observable (opérateur hermétique) $\vec{P}(P_x, P_y, P_z)$ qui agit dans l'espace des états $\mathcal{E}$.
3. La plupart des autres grandeurs physiques classiques (énergie, moment cinétique...) s'écrivent algébriquement comme fonctions des positions et des impulsions. Pour construire l'observable associée à la grandeur physique $\mathcal{A}$, on prend l'expression classique de cette grandeur, on y remplace respectivement $\vec{r}(x, y, z)$ et $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ par les observables $\vec{R}(X, Y, Z)$ et $\vec{P}(P_x, P_y, P_z)$. L'expression obtenue qui est un opérateur qui agit dans l'espace des états $\mathcal{E}$ doit être convenablement symétrisée afin d'obtenir un opérateur hermétique.

Exemple :

1. L'hamiltonien d'une particule libre $h = \frac{p^2}{2m} \rightarrow H = \frac{P^2}{2m}$
 $H^+ = \frac{\vec{P}^+ \vec{P}^+}{2m} = \frac{(\vec{P}^+)^2}{2m}$ comme $\vec{P}$ est hermétique $\vec{P}^+ = \vec{P} \implies H^+ = \frac{P^2}{2m} = H$
 $\implies$ L'opérateur obtenu H est hermétique, pas besoin de symétriser l'expression obtenue.

2. La grandeur $\vec{r} \cdot \vec{p} \rightarrow \vec{R} \cdot \vec{P}$
 $(\vec{R} \cdot \vec{P})^+ = \vec{P}^+ \cdot \vec{R}^+ = \underbrace{\vec{P} \cdot \vec{R} \neq \vec{R} \cdot \vec{P}}_{\text{ne commutent pas}} \implies$ l'opérateur obtenu $\vec{R} \cdot \vec{P} \implies$ l'expression de l'opérateur doit être symétriser

$\vec{r} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}) \rightarrow \frac{1}{2}(\vec{R} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \vec{R})$: l'expression obtenue est un opérateur hermétique.

Postulat III : (*la mesure*)

1. **cas d'un spectre discret non dégénéré :**

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\psi(t)\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre non-dégénérée a_n de

l'observable A correspondante est

$$P(a_n) = |\langle U_n | \psi(t) \rangle|^2$$

où $|U_n\rangle$ est le vecteur propre normé de A associé à la valeur propre a_n .

2. cas d'un spectre discret dégénéré :

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\psi(t)\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat de la mesure la valeur propre a_n de l'observable A correspondante est

$$P(a_n) = \sum_i^{g_n} |\langle U_n^i | \psi(t) \rangle|^2$$

où $i = 1, 2, 3, \dots, g_n$, g_n étant le degré de dégénérescence de a_n et $\{|U_n^i\rangle\}$ un système orthonormé de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre $\mathcal{E}_n$ associé à la valeur propre a_n de A .

3. cas d'un spectre continu et non-dégénéré :

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état normé $|\psi(t)\rangle$, la probabilité $dP(a)$ d'obtenir un résultat compris entre $a + da$ est

$$dP(a) = |\langle \nu_a | \psi(t) \rangle|^2 da$$

où $|\nu_a\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre a de l'observable A .

Postulat IV : (la réduction du paquet d'onde)

Si la mesure de la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur le système dans l'état $|\psi(t)\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée de $|\psi(t)\rangle$ sur

le sous-espace propre associé à a_n , soit

$$\frac{P_n |\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle \psi(t) | P_n | \psi(t) \rangle}}$$

où le projecteur $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |U_n^i\rangle \langle U_n^i|$

Postulat V : (évolution dans le temps)

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

où $H(t)$ l'hamiltonien du système (l'observable associée à l'énergie totale du système).

2.2 Valeurs moyennes et principe d'incertitude

Valeur moyenne d'une observable :

La valeur moyenne d'une observable A sur un état donné $|\psi\rangle$ est défini par

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Dans la pratique, La valeur moyenne d'une observable A sur un état donné $|\psi\rangle$ est obtenue en prenant la valeur moyenne des résultats d'une mesure de A , effectuée sur un grand nombre de systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$.

Principe d'incertitude de Heisenberg :

Ce principe a été énoncé par Werner Heisenberg en 1926, il stipule que :

On ne peut mesurer simultanément la position et l'impulsion d'un objet avec une précision (incertitude) arbitraire.

Si on détermine la composante suivant x de l'impulsion p_x d'un objet avec une incertitude Δp_x , on ne peut déterminer en même temps sa position x avec une incertitude Δx inférieure à $\hbar/2\Delta p_x$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{array} \right.$$

- Lorsque deux observable A et B commutent ($[A, B] = 0$), on dit que A et B sont compatibles, elles sont simultanément mesurables.
- Lorsque deux observable A et B ne commutent pas ($[A, B] \neq 0$), on dit que A et B sont incompatibles, elles ne sont pas simultanément mesurables.
- si $[A, B] \neq 0$ alors la relation d'incertitude entre A et B sur un état $|\psi\rangle$ est :

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|$$

2.3 Produit tensoriel

Dans certaines situations en mécanique quantique, on est amené à élargir l'espace des états du système étudié. Ceci se fait via l'opération "produit tensoriel"

On retrouve le produit tensoriel :

1. Lorsque on veut passer du cas unidimensionnel au cas tridimensionnel.
2. Pour étudier un système formé de plusieurs particules.
3. Pour tenir compte du degrés de liberté intrinsèque (le spin) en plus des degrés de liberté orbitaux.

2.3.1 Définition

On considère deux espaces des états de dimensions N_1 et N_2 .

On définit l'espace vectoriel $\mathcal{E}$ espace produit tensoriel de $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$, noté $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$, de sorte qu'on associe à tout ket $|\psi_1\rangle$ de $\mathcal{E}_1$ et $|\psi_2\rangle$ de $\mathcal{E}_2$ un ket $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$, noté $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$.

Le produit tensoriel vérifie les propriétés suivantes :

1. $(\lambda |\psi_1\rangle) \otimes |\psi_2\rangle = \lambda (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle)$.
2. $|\psi_1\rangle \otimes (|\psi_2\rangle + |\psi'_2\rangle) = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \otimes |\psi'_2\rangle$
3. Si $\{|u_i(1)\rangle\}$ est une base de $\mathcal{E}_1$

Si $\{|v_j(2)\rangle\}$ est une base de $\mathcal{E}_2$

alors $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle\}$ est une base de $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$

si $\dim(\mathcal{E}_1) = N_1$ et $\dim(\mathcal{E}_2) = N_2$ alors $\dim(\mathcal{E}) = N_1 N_2$.

2.3.2 Les kets dans $\mathcal{E}$

On considère deux kets :

- $|\psi_1\rangle$ de $\mathcal{E}_1$: $|\psi_1\rangle = \sum_i c_i |u_i(1)\rangle$
- $|\psi_2\rangle$ de $\mathcal{E}_2$: $|\psi_2\rangle = \sum_j b_j |v_j(2)\rangle$

alors

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \sum_{ij} c_i b_j |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle$$

En notation matricielle

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 b_1 \\ c_1 b_2 \\ \vdots \\ c_1 b_j \\ \vdots \\ c_i b_j \\ \vdots \end{pmatrix}, N = N_1 N_2 \text{ composantes}$$

La représentation des bras s'obtient de la même façon (simple).

Remarques :

1. Pour alléger les expressions à manipuler, le produit tensoriel peut être noté comme suit :

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |\psi_1, \psi_2\rangle$$

2. si $|\psi\rangle$ est de la forme $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$ l'état est dit factorisé.
3. si $|\psi\rangle$ est de la forme $|\psi\rangle = \alpha |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle + \beta |\psi'_1\rangle |\psi'_2\rangle$ l'état est dit intriqué.

2.3.3 Produit scalaire

si $|\psi_1, \psi_2\rangle$ et $|\phi_1, \phi_2\rangle$ sont de $\mathcal{E}$, alors leur produit scalaire est défini par

$$\langle \phi_1, \phi_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle$$

Cette définition vérifie les propriétés du produit scalaire dans l'espace des états (vu dans le premier chapitre).

2.3.4 Les opérateurs dans $\mathcal{E}$

Pour définir l'action des opérateurs dans $\mathcal{E}$, on utilise la notion de prolongement si deux opérateurs :

$$A_1 : A_1 |\psi_1\rangle = |\psi'_1\rangle \text{ agit dans } \mathcal{E}_1$$

$$A_2 : A_2 |\psi_2\rangle = |\psi'_2\rangle \text{ agit dans } \mathcal{E}_2$$

alors

1. Le prolongement de A_1 dans $\mathcal{E}_1$, noté $\tilde{A}_1$ est défini par

$$\tilde{A}_1 |\psi_1, \psi_2\rangle = (A_1 |\psi_1\rangle) |\psi_2\rangle$$

On écrit

$$\tilde{A}_1 = A_1 \otimes 1$$

2. Le prolongement de A_2 dans $\mathcal{E}_2$, noté $\tilde{A}_2$ est défini par

$$\tilde{A}_2 |\psi_1, \psi_2\rangle = |\psi_1\rangle (A_2 |\psi_2\rangle)$$

On écrit

$$\tilde{A}_2 = 1 \otimes A_2$$

3. Le produit tensoriel de deux opérateurs $\tilde{A}_1 \otimes \tilde{A}_2$ est défini par

$$\left(\tilde{A}_1 \otimes \tilde{A}_2\right) |\psi_1, \psi_2\rangle = (A_1 |\psi_1\rangle) (A_2 |\psi_2\rangle)$$

Chapitre 3

Dynamique Quantique

3.1 Opérateur d'évolution

L'évolution d'un ket $|\psi(t)\rangle$ est gouvernée par l'équation de Schrödinger donnée par

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle$$

où $H(t)$ est l'hamiltonien du système. Si on connaît $|\psi(t)\rangle$ à un instant t_0 , on peut retrouver $|\psi(t)\rangle$ à n'importe quel instant ultérieure.

De manière équivalente à l'équation de Schrödinger, on peut obtenir l'évolution des kets dans le temps via un opérateur unitaire, appelé opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ et on écrit

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Propriétés :

L'essentiel des propriétés qui vont suivre découle des propriétés de l'équation de Schrödinger

1. Linéarité : $U (\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle) = \alpha_1 U |\psi_1\rangle + \alpha_2 U |\psi_2\rangle$.
2. $U (t, t) = 1$.
3. l'inverse de $U (t, t_0)$: $U^{-1} (t, t_0) = U (t_0, t)$ (définition formelle).
4. U est unitaire : $U^{-1} = U^+ \rightarrow$ conservation de la norme des kets.
5. $U (t, t_0)$ vérifie l'équation

$$i\hbar \frac{\partial U (t, t_0)}{\partial t} = H (t) U (t, t_0) \quad \text{avec } U (t_0, t_0) = 1$$

Pour un hamiltonien indépendant du temps, l'équation précédente se résoud facilement et on obtient

$$U (t, t_0) = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} H (t - t_0) \right) = U (t - t_0)$$

dans le base propre de l'hamiltonien

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

l'opérateur d'évolution , pour $t_0 = 0$, prend la forme

$$U (t) = \sum_n e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

c'est la représentation spectrale de $U (t)$. Dans ce cas, tout ket, à un instant t , peut s'écrire dans base propre de l'hamiltonien

$$|\psi (t)\rangle = \sum_n c_n (0) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle$$

3.1.1 Image de Heisenberg et de Schrödinger

Dans ce qui suit, nous allons présenter deux manières différentes mais équivalentes de décrire l'évolution dans le temps en mécanique quantique.

3.1.2 Image de Schrödinger

L'évolution dans le temps est contenue dans l'état $|\psi(t)\rangle$, les opérateurs de base $\vec{R}$ et $\vec{P}$ ne dépendent pas du temps. On note $|\psi_s(t)\rangle$, $\vec{R}_s$, $\vec{P}_s$, l'équation d'évolution est l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi_s(t)\rangle}{dt} = H_s |\psi_s(t)\rangle$$

3.1.3 Image de Heisenberg

L'évolution dans le temps est contenue dans les opérateurs $A(t)$, les kets ne dépendent pas du temps. On note $|\psi_H\rangle$, $\vec{R}_H$, $\vec{P}_H$, l'équation d'évolution des opérateurs est l'équation de Heisenberg

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{dA_s(t)}{dt} \right)_H$$

où $A_H(t)$ représente la grandeur A dans l'image de Heisenberg, $A_s(t)$ représente la grandeur A dans l'image de Schrödinger, $H_H(t)$ est l'hamiltonien dans l'image de Heisenberg.

Nous allons voir que ces deux points de vues sont équivalents par rapport aux postulats de la mécanique quantique, ie, ils redonnent les mêmes prédictions (probabilités et valeurs moyennes).

3.1.4 Passage entre les deux images

Le passage entre les deux images se fait via l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ comme suit :

1.

$$|\psi_H\rangle = U^{-1}(t, t_0) |\psi_s(t)\rangle$$

or

$$|\psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle$$

alors

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle &= U^{-1}(t, t_0) U(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle \\ &= |\psi_s(t_0)\rangle \end{aligned}$$

2.

$$A_H(t) = U^{-1}(t, t_0) A_s(t) U(t, t_0)$$

en utilisant la relation précédente et l'équation d'évolution de $U(t, t_0)$ qui découle de l'équation Schrödinger, on aboutit à l'équation de Heisenberg (on ici une forme d'équivalence).

pour un hamiltonien qui ne dépend pas du temps, on a

$$H_s = H_H$$

3.1.5 Base propre d'un opérateur dans l'image de Heisenberg

On considère une observable A_s dans l'image de Schrödinger. Son équation aux valeurs propres

$$A_s |a\rangle = a |a\rangle \quad \{|a\rangle\} \text{ est une base}$$

A ne dépend pas du temps, son équation aux valeurs propres aussi.

Pour l'image de Heisenberg, on peut écrire

$$\begin{aligned} A_s |a\rangle = a |a\rangle &\rightarrow U^+ A_s |a\rangle = a U^+ |a\rangle = U^+ A_s U U^+ |a\rangle \\ &\rightarrow A_H (U^+ |a\rangle) = a (U^+ |a\rangle) \end{aligned}$$

cette relation est l'équation aux valeurs propres de A dans l'image de Heisenberg. les vecteurs propres ($U^+ |a\rangle$) qui dépendent du temps forment une base. Le spectre de l'observable est resté le même (c'était prévisible).

On note $U^+ |a\rangle = |a, t\rangle$ et on a

$$\begin{aligned} \langle a, t | a', t \rangle &= \delta_{aa'} \text{ au même } t \\ \sum_a |a, t\rangle \langle a, t| &= 1 \end{aligned}$$

et la représentation spectrale de A_H sera

$$A_H = \sum_a a |a, t\rangle \langle a, t|$$

3.1.6 Equivalence par rapport aux postulats de la mécanique quantique

On considère un système décrit par

1. $|\psi_s(t)\rangle$ en image de Schrödinger
2. $|\psi_H\rangle$ en image de Heisenberg.

On mesure la grandeur A décrite par

1. $A_s : \{a, |a\rangle\}$ en image de Schrödinger
2. $A_H : \{a, |a, t\rangle\}$ en image de Heisenberg

Les prédictions en termes de probabilités sont données par

1. $P_s(a) = |\langle a | \psi_s(t) \rangle|^2 = |\langle a | U(t, t_0) | \psi_s(t_0) \rangle|^2$ dans l'image de Schrödinger.
2. $P_H(a) = |\langle a, t | \psi_H \rangle|^2 = |\langle a | U(t, t_0) | \psi_H \rangle|^2$ dans l'image de Heisenberg

or

$$|\psi_H\rangle = |\psi_s(t_0)\rangle$$

ainsi

$$P_s(a) = P_H(a) \quad \text{mêmes probabilités}$$

Pour les valeurs moyennes, on a

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_s(t) &= \langle \psi_s(t) | A_s | \psi_s(t) \rangle \\ &= \langle \psi_s(t_0) | U^\dagger(t, t_0) A_s U(t, t_0) | \psi_s(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi_H | A_H | \psi_H \rangle \\ &= \langle A \rangle_s(t) \end{aligned}$$

On retrouve bien sûr les mêmes valeurs moyennes.

3.2 Opérateur Densité

3.2.1 Trace d'un opérateur

On considère un espace des états doté d'une base $\{|u_i\rangle\}$. Un opérateur quelconque A s'exprime dans cette base ' utilisant la relation de fermeture, sous la forme

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

avec $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$ est un élément de matrice de A . Si $\{|u_i\rangle\}$ est une base propre de A , alors on écrit

$$A = \sum_i a_i |u_i\rangle \langle u_i|$$

où a_i est une valeur propre de A .

On définit la trace d'un opérateur A par

$$\begin{aligned} \text{tr}(A) &= \sum_i A_{ii} = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle \\ &\equiv \text{Somme des éléments diagonaux} \end{aligned}$$

Propriétés :

1. La trace d'un opérateur est indépendante du choix de la base.
2. linéarité : $\text{tr}(\alpha A + \beta B) = \alpha \text{tr} A + \beta \text{tr} B$.
3. $\text{tr}(|\psi\rangle \langle \phi|) = \langle \phi | \psi \rangle$
4. la trace est cyclique : $\text{tr}(ABC) = \text{tr}(BCA) = \text{tr}(CAB)$.

3.2.2 Définition de l'opérateur densité

En mécanique quantique, on fait des prédictions statistiques sur un ensemble. On effectue les mesures sur N systèmes quantiques identiques (atomes ; molécules,...) tous préparés dans le même état physique $|\psi\rangle$ normé. dans ce cas, on dit qu'on a *un ensemble pure*.

Parfois, on ne peut préparer tous les systèmes quantiques dans le même état physique,

mais ce qu'on peut faire c'est de préparer

$$\left\{ \begin{array}{l} n_1 \rightarrow |\psi_1\rangle \\ n_2 \rightarrow |\psi_2\rangle \\ \vdots \\ n_\alpha \rightarrow |\psi_\alpha\rangle \end{array} \right. \text{ les } \{|\psi_\alpha\rangle\} \text{ sont normés mais pas nécessairement orthogonaux}$$

On dit que l'un des systèmes quantiques a une probabilité de

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = \frac{n_1}{N} \rightarrow |\psi_1\rangle \\ P_2 = \frac{n_2}{N} \rightarrow |\psi_2\rangle \\ \vdots \\ P_\alpha = \frac{n_\alpha}{N} \rightarrow |\psi_\alpha\rangle \end{array} \right. \sum_{\alpha} P_\alpha = 1$$

L'ensemble n'est plus décrit par un seul ket $|\psi\rangle$ mais par la donnée de $\{P_\alpha, |\psi_\alpha\rangle\}$. Dans ce cas, on parle de *mélange statistique*.

Remarque : un état pur est un cas particulier d'un mélange statistique pour lequel $P_\alpha = 1 \rightarrow |\psi_\alpha\rangle$

On définit la valeur moyenne d'une grandeur physique A sur un mélange statistique par

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{\alpha} P_{\alpha} \langle A \rangle_{\alpha} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} (\langle \psi_{\alpha} | A | \psi_{\alpha} \rangle) \\ &= \sum_{\alpha} P_{\alpha} \text{tr} (|\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha} | A) \\ &= \text{tr} \left(\sum_{\alpha} P_{\alpha} (|\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha} | A) \right) \text{ car la trace est linéaire} \end{aligned}$$

On définit l'opérateur densité ρ (J. Von Neumann 1972) décrivant un mélange statistique

par

$$\rho = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|$$

ainsi

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$$

cette valeur moyenne est indépendante de la représentation.

Propriétés :

1. $\rho = \rho^{\dagger}$.
2. $\forall |\phi\rangle : \langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0$ on dit que ρ est un opérateur positif.
3. $\text{tr} \rho = 1$.
4. $\text{tr}(\rho^2) \leq 1$.
5. Pour un état pur : $\rho = |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|$ on a : $\rho^2 = \rho, \text{tr}(\rho^2) = 1$.

3.2.3 Prédiction des probabilités sur un mélange statistique

On considère une observable A caractérisée par $\{a_i, |u_i\rangle\}$ et un mélange statistique décrit par l'opérateur densité ρ . la probabilité de trouver la valeur propre a_i lorsque on mesure A sur ce mélange statistique est

$$P(a_i) = \langle u_i | \rho | u_i \rangle$$

Chapitre 4

Oscillateur harmonique à une dimension

4.1 Introduction

L'oscillateur harmonique est un exemple de base de la mécanique quantique de grande importance. Son utilité se manifeste clairement aussi bien dans les concepts théoriques que dans les modèles pratiques :

1. Du point de vue formelle, l'oscillateur harmonique se présente comme une somme de carré de grandeurs, l'une est conjugué de l'autre, cet aspect là procure à l'oscillateur harmonique un rôle important en théorie quantique champs.
2. L'oscillateur harmonique est une bonne approximation pour tout puits de potentiel au voisinage des « points d'équilibres ». Ce fait permet à l'oscillateur harmonique de décrire convenablement la structure d'un noyau, les vibrations moléculaires,

4.2 Oscillateur harmonique classique

Lorsque une masse m est suspendue à l'extrémité d'un ressort en position horizontal et ne subissant que la force de rappel de ce dernier, son équation de mouvement s'écrit selon le PDF comme suit

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

où k est la constante de raideur du ressort. On peut écrire aussi

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

où $\omega = \sqrt{k/m}$ est la fréquence de l'oscillateur. La solution de cette équation différentielle est de la forme

$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \phi)$$

où x_0 est l'amplitude des oscillations et ϕ la phase initiale quand peut choisir comme étant nulle. Dans ce cas la vitesse de la particule sera donnée par

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = \omega x_0 \cos \omega t$$

Ainsi, l'énergie de la particule peut s'écrire

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 = \text{cste} \end{aligned}$$

on remarque que l'énergie de l'oscillateur ne dépend classiquement que de l'amplitude des oscillations. Il n'y a aucune restriction théorique sur les valeurs qu'elle peut prendre. La plus petite valeur correspond à une particule au repos d'énergie $E = 0$. Nous allons voir que ce

résultat va changer dans le cas quantique.

4.3 Oscillateur harmonique quantique

Le traitement quantique de l'oscillateur harmonique revient en premier lieu à résoudre l'équation de Schrödinger correspondante

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t)$$

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \end{aligned}$$

le problème est stationnaire, alors on peut écrire

$$\psi(x, t) = \exp(-iEt/\hbar) \phi(x)$$

où E est l'énergie de la particule et tel que

$$H\phi(x) = E\phi(x)$$

cette équation aux valeurs propres peut être résolue de deux manières :

1. **résolution analytique** : l'équation aux valeurs propres précédente peut s'écrire

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \phi = 0$$

c'est une équation différentielle du second ordre linéaire et homogène à coefficients

non constants qu'on peut résoudre par la méthode des séries par exemple. Sa solution générale s'écrit en termes de deux solutions particulières linéairement indépendantes

$$\phi(x) = ay_1(x) + by_2(x)$$

on impose à $\phi(x)$ les conditions suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{|x| \rightarrow \infty} \phi(x) = 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 \end{array} \right.$$

2. **résolution algébrique** : cette méthode a été inventée par Dirac, elle utilise des opérations algébriques partant de la relation de commutation fondamentale $[x, p] = i\hbar$. Dans le présent chapitre, nous allons présenter en détail cette méthode.

4.4 Méthode algébrique

On considère l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

$$H\phi(x) = E\phi(x)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

où

$$[x, p] = i\hbar$$

on définit les deux opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} + i \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right) \quad \text{Opérateur d'annihilation}$$
$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} - i \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right) \quad \text{Opérateur de création}$$

On remarque que :

1. a et a^+ sont adimensionnels car $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ a la dimension d'une longueur et $\sqrt{\hbar m\omega}$ a la dimension d'une impulsion.
2. a est l'adjoint de a^+ .
3. a et a^+ sont non hermitiens : ne représentent pas une grandeur physique.

Les relations précédentes s'inversent

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a)$$
$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^+ - a)$$

Si on calcul le commutateur $[a, a^+]$ on trouve

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1$$

Par ailleurs, on peut réécrire l'hamiltonien en termes des opérateurs a et a^+ , on trouve

$$H = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right)$$

On définit l'opérateur N :

$$N = a^+ a \quad \text{opérateur nombre de quanta}$$

cet opérateur est hermitien. L'hamiltonien prend la forme

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

ainsi, connaissant le spectre de N , on directement le spectre de H .

4.4.1 Spectre de N

On considère l'équation aux valeurs propres de N

$$N\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha$$

1. premier résultat

N hermitien $\rightarrow \alpha$ réel

2. ϕ_α normée alors

$$\begin{aligned} (\phi_\alpha, N\phi_\alpha) &= \alpha (\phi_\alpha, \phi_\alpha) = \alpha \\ &= (\phi_\alpha, a^+ a \phi_\alpha) = (a\phi_\alpha, a\phi_\alpha) \\ &= \|a\phi_\alpha\|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

ainsi

$$\alpha \geq 0$$

3. Calculons

$$Na\phi_\alpha = a^+aa\phi_\alpha$$

utilisant la relation $[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1 \rightarrow a^+a = aa^+ - 1$ on obtient

$$Na\phi_\alpha = (aa^+ - 1)a\phi_\alpha = (\alpha - 1)a\phi_\alpha$$

ainsi $a\phi_\alpha$ est aussi une fonction propre de N avec la valeur propre $(\alpha - 1)$, ie, $a\phi_\alpha \sim \phi_{\alpha-1}$.

4. Conséquence : On a deux cas possible $\left\{ \begin{array}{l} \alpha \text{ entier positif} \\ \text{ou} \\ \alpha \text{ non entier positif} \end{array} \right.$

supposons que α est non entier positif, alors il existe une entier positif n tel que :

$n \leq \alpha \leq n + 1$ et on

$$\begin{aligned} a\phi_\alpha &\sim \phi_{\alpha-1} \\ a^2\phi_\alpha &\sim \phi_{\alpha-2} \\ &\vdots \\ a^n\phi_\alpha &\sim \phi_{\alpha-n} \\ a^{n+1}\phi_\alpha &\sim \phi_{\alpha-n-1} \end{aligned}$$

on obtient la valeur propre $\alpha - n - 1$ qui est négative, ceci contredit le deuxième résultat,

ainsi

α doit être entier positif

$$\alpha = n = 0, 1, 2, \dots$$

5. Calculons $a\phi_0$

$$\begin{aligned}(\phi_0, N\phi_0) &= 0 \quad (\phi_0, \phi_0) = 0 \\ &= (\phi_0, a^+a\phi_0) = (a\phi_0, a\phi_0) \\ &= \|a\phi_0\|^2 = 0 \\ &\rightarrow a\phi_0 = 0\end{aligned}$$

on ne peut engendrer des valeurs propres négatives.

6. Pour les énergies propres de l'oscillateur harmonique, elle auront la forme

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

dans ce cas les énergies sont quantifiés et la plus petite énergie est non nulle, elle vaut $E_0 = \hbar\omega/2$, on l'appelle l'énergie du point zéro (pas de repos!).

4.4.2 Fonctions propres de H

Cherchons les ϕ_n . Tout d'abord, calculons

$$\begin{aligned}Na^+\phi_n &= a^+aa^+\phi_n \\ &= (n+1)a^+\phi_n\end{aligned}$$

ainsi $a^+\phi_n$ est fonction propre de N avec la valeur propre $(n+1)$, ie, $a^+\phi_n \sim \phi_{n+1}$. On démontre facilement que

$$a^+\phi_n = \sqrt{n+1}\phi_{n+1}$$

aussi

$$a\phi_n = \sqrt{n}\phi_{n-1}$$

on écrit

$$\begin{aligned}\phi_1 &= a^+ \phi_0 \\ \sqrt{2}\phi_2 &= a^+ \phi_1 = (a^+)^2 \phi_0 \\ &\vdots \\ \sqrt{n!}\phi_n &= (a^+)^n \phi_0 \\ \phi_n &= \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} \phi_0\end{aligned}$$

avec a^+ et ϕ_0 on peut avoir toute les fonction propres de H . Calculons ϕ_0

$$\begin{aligned}a\phi_0 &= 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} + i \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right) \phi_0 &= 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} + \frac{\hbar}{\sqrt{\hbar m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \phi_0 &= 0\end{aligned}$$

on a une équation différentielle du premier ordre (facile à résoudre), utilisant la condition denormalisation, la solution est

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

Faisons quelques remarques sur l'oscillateur harmonique

1. Les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmoniques sont non dégénérés. Ceci peut être

démontrer par récurrence partant du fait que cette proposition est vraie pour le niveau fondamental.

2. Les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmoniques sont équidistants et $\Delta E = \hbar\omega$.
3. On montre que les fonctions propres $\phi_n(x)$ peuvent s'écrire :

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n! x_0}} \exp(-x^2/2x_0^2) H_n(x/x_0)$$

où $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ et $H_n(y)$ est un polynôme d'Hermite. Les polynômes d'Hermite sont définis par

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Les premiers polynômes d'Hermite

$$H_0(y) = 1,$$

$$H_1(y) = 2y,$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2,$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y$$

4.5 Exercices

Exercice 1 :

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de fréquence angulaire

ω . Les opérateurs d'annihilation et de création sont données en termes de x et p par ;

$$a = \frac{x}{\sqrt{2\hbar/m\omega}} + i\frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad , \quad a^+ = \frac{x}{\sqrt{2\hbar/m\omega}} - i\frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}$$

1. Sachant que $[x, p] = i\hbar$, montrer que $[a, a^+] = 1$.
2. Exprimer les opérateurs x et p en fonctions des opérateurs d'annihilation et de création a et a^+ .
3. Trouver l'expression des fonctions d'ondes associées à l'état fondamental et au premier état excité de l'O H.
4. Calculer $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ et $\langle p^2 \rangle$ pour le nième état de l'O H. Vérifier que le principe d'incertitude est satisfait.
5. Calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle pour le nième état de l'O H.

Exercice 2 :

un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de fréquence angulaire ω est décrit à $t = 0$ par la fonction d'onde :

$$\psi(x, 0) = A[3\phi_0(x) + 4\phi_1(x)]$$

où ϕ_0 et ϕ_1 sont les fonctions propres de l'oscillateur harmonique correspondant à l'état fondamental et au premier état excité.

1. Trouver A .
2. Trouver $\psi(x, t)$ et $|\psi(x, t)|^2$.
3. Calculer $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$. Vérifier que le théorème d'Ehrenfest est satisfait.

4. On procède à une mesure de l'énergie de la particule, donner les résultats possibles et la probabilité correspondant à chaque résultat obtenu.

Exercice 3 :

On considère une particule de masse m et de charge q soumise à un potentiel oscillateur harmonique. On place cette particule dans une région où subsiste un champ électrique constant E . L'hamiltonien de la particule aura la forme :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - qEx$$

Résoudre le problème aux valeurs propres de cet hamiltonien (énergies propres et fonctions propres).

Exercice 4 :

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de fréquence angulaire ω occupant l'état fondamental. Soudainement, le fréquence angulaire double de valeur, ainsi $\omega' = 2\omega$. Quelle est la probabilité qu'une mesure de l'énergie donne la valeur $\hbar\omega/2$? Quelle est la probabilité d'obtenir la valeur $\hbar\omega$?

Exercice 5 :

1. Montrer que la fonction d'onde

$$\psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{a^2}{2}(1 + e^{-2i\omega t})\right) + \frac{i\hbar t}{m} - 2axe^{-i\omega t}\right]$$

satisfait l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un oscillateur harmonique de masse m et de fréquence angulaire ω . a est une constante réelle ayant la dimension d'une longueur.

2. Trouver $|\psi(x, t)|^2$.
3. Calculer $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$. Vérifier que le théorème d'Ehrenfest est satisfait.

Chapitre 5

Références

Vous trouvez dans le tableau suivant une liste d'ouvrages de référence en mécanique quantique que vous pouvez consulter à la bibliothèque de l'université de Bejaia.

Dans la préparation de ces notes de cours, je me suis souvent inspiré du livre de Griffiths, celui de Cohen-Tannoudji et du livre de Sakurai.

Titre	Auteur	Cote
Physique quantique : introduction avec exercices	Ngô, Christian	5530.12/68.2
Cours de mécanique quantique : avec 87 exercices corrigés	Ayant, Yves	530.12/40.2
Cours de physique de Berkeley.Vol.4, Physique quantique	Wichmann, Eyvind H.	530.12/15.3
Exercices résolus de mécanique quantique : avec complément de cours	Farges, Jean-Pierre	530.12/09.3
Initiation à la mécanique quantique : approche élémentaire et applications	Belorizky, Elie	530.12/59.2
La mécanique quantique. Tome1, Problèmes résolus	Galitsky, Victor Mikhailovitch.	530.12/41.2
Le cours de physique de Feynman.Vol.5, Mécanique quantique	Feynman, Richard	530.12/14.14
Mécanique quantique	Cohen-Tannoudji, Claude	530.12/51.12
Mécanique quantique. Tome1	Messiah, Albert	530.12/07.2

Autres références :

1. Introduction to quantum mechanics, D. J. Griffiths.
2. Quantum Mechanics, R. Shankar.
3. Introductory quantum mechanics, R. L. Liboff.
4. Modern Quantum Mechanics, J. J. Sakurai.

5. Quantum Mechanics, L. E. Ballentine.
6. Quantum Physics, S. Gasiorowicz.
7. Quantum Mechanics : concepts and applications , N. Zettili.