Université Libre de Bruxelles

Synthèse

Mécanique quantique I
PHYS-H-301

Auteur :
Nicolas Englebert

Professeur :
Nicolas Cerf

Année 2015 - 2016

Appel à contribution

Synthèse Open Source

Ce document est grandement inspiré de l'excellent cours donné par Nicolas Cerf à l'EPB (École Polytechnique de Bruxelles), faculté de l'ULB (Université Libre de Bruxelles). Il est écrit par les auteurs susnommés avec l'aide de tous les autres étudiants et votre aide est la bienvenue ! En effet, il y a toujours moyen de l'améliorer surtout que si le cours change, la synthèse doit être changée en conséquence. On peut retrouver le code source à l'adresse suivante

`https://github.com/nenglebert/Syntheses`

Pour contribuer à cette synthèse, il vous suffira de créer un compte sur *Github.com*. De légères modifications (petites coquilles, orthographe, ...) peuvent directement être faites sur le site ! Vous avez vu une petite faute ? Si oui, la corriger de cette façon ne prendra que quelques secondes, une bonne raison de le faire !

Pour de plus longues modifications, il est intéressant de disposer des fichiers : il vous faudra pour cela installer LaTeX, mais aussi *git*. Si cela pose problème, nous sommes évidemment ouverts à des contributeurs envoyant leur changement par mail ou n'importe quel autre moyen.

Le lien donné ci-dessus contient aussi le `README` contient de plus amples informations, vous êtes invités à le lire si vous voulez faire avancer ce projet !

Licence Creative Commons

Merci !

Chapitre 1

Notation de Dirac

Inclure les notes de Terence

1.1 Vecteurs d'état et espace de Hilbert

Le *vecteur d'état* se dénomme *ket* et est noté :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \quad & \in \mathcal{E} \\ & \in \mathcal{E}_H \end{aligned} \tag{1.1}$$

où $\mathcal{E}$ est l'espace des états et $\mathcal{E}_H$ l'espace de Hilbert. Notons que $\mathcal{E} \subset \mathcal{E}_H$. Par abus de langage, nous désignerons souvent l'espace des états comme étant l'espace de Hilbert, ce qui n'est en toute rigueur pas exact ($\mathcal{E}_H$ contient des états non-physiques). L'espace de Hilbert est un espace complet (si on définit une suite d'état, celle-ci convergera vers un état) muni d'un produit scalaire (défini à la section suivante).

Pourquoi définir un vecteur d'état ? En physique classique l'état d'un système ne pose pas de problèmes particuliers. A l'inverse, en physique quantique, la notion même pose déjà un problème, contraignant l'utilisation de vecteurs d'état. La raison physique de leur utilisation vient au principe d'incertitude d'Heisenberg. En effet, il nous est impossible de décrire la particule par le couple position/impulsion d'où la motivation à l'utilisation de ces vecteurs.

A la base de la physique, le **principe de superposition** nous dit que la combili (de coefficients complexes) de deux vecteurs d'états, soit deux kets, est de nouveau un ket, soit un état 100% admissible.

$$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{E}, \qquad |\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle \equiv \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \qquad \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \tag{1.2}$$

Il s'agit de la *linéarité de la physique quantique* avec laquelle on peut, par exemple, décrire le phénomène d'interférences.

1.2 Produit scalaire entre deux kets

Le produit scalaire entre deux kets se note

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle \tag{1.3}$$

Les propriétés de bases de ce produit scalaires sont bien connues :

$$
\begin{array}{lll}
\bullet\ \langle\psi|\psi\rangle & = 0 & \\
\bullet\ \langle\psi_1|\psi_2\rangle & = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* & \\
\bullet\ \langle\psi|\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2\rangle & = \lambda_1\langle\psi_1|\psi_2\rangle+\lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad \forall\lambda_i\in\mathbb{C}. & \text{Linéarité (à gauche)} \\
\bullet\ \langle\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2|\psi\rangle & = \langle\psi|\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2\rangle^* & \text{Antilinéarité (à gauche)} \\
 & = (\lambda_1\langle\psi|\psi_1\rangle+\lambda_2\langle\psi|\psi_2\rangle)^* & \\
 & = \lambda_1^*\langle\psi_1|\psi\rangle+\lambda_2^*\langle\psi_2|\psi\rangle & \\
\bullet\ \|\psi\| = \|\,|\psi\rangle\,\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} > 0 & &
\end{array}
\tag{1.4}
$$

Il est intéressant de s'intéresser à la *"représentation"* d'un ket au sein d'un espace de Hilbert. Considérons l'exemple suivant (qui reviendra souvent).

Exemple
Considérons un espace de Hilbert de dimension n. Les vecteurs d'états, les ket, ne sont rien d'autres que des vecteurs colonnes dans cet espace de dimension n. Soit

$$
|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \qquad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \qquad u_1, v_i \in \mathbb{C} \tag{1.5}
$$

Le produit scalaire entre ces deux ket est donné par

$$
\langle v|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i^* u_i = \underbrace{(v_1^*\ v_2^*\ \dots\ v_n^*)}_{(*)} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{1.6}
$$

On va définir $(*)$ comme étant un *"complémentaire au ket"*, $\langle v|$ que l'on nomme *bra*. Ce bra appartient à un espace dual, ce qui est le sujet de la section suivante.

1.3 Espace dual $\mathcal{E}^*$, vecteur "bra"

Le bra est une forme linéaire : c'est une application qui va depuis l'espace des état (ou de Hilbert, pas de différence dans ce cours) vers $\varphi(\psi)$, un nombre complexe.

$$
\varphi : |\psi\rangle \in \mathcal{E} \rightsquigarrow \varphi(|\psi\rangle) \ \in \mathbb{C} \tag{1.7}
$$

Cette forme linéaire fait correspondre à chaque état un nombre complexe. La superposition est également vérifiée d'où le "linéaire".

$$
\varphi(|\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2\rangle) = \lambda_1\varphi(|\psi_1\rangle)+\lambda_2\varphi(|\psi_2\rangle) \qquad \forall\lambda_1,\lambda_2\in\mathbb{C} \tag{1.8}
$$

où $\varphi \in \mathcal{E}^*$.

Il semble dès lors intéressant d'introduire un nouvel "objet" :

$$
\begin{cases} \varphi \in \mathcal{E}^* \\ \langle\varphi| \end{cases} \tag{1.9}
$$

Il s'agit de l'ensemble de toutes les formes linéaires, ensemble qui forme un espace dual. L'intérêt réside dans un isomorphisme : on peut associer à chaque état de l'espace des états un bra de l'espace dual.

Ceci étant dit, il faut caractériser et montrer comment cette application agit sur les espaces.

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}, \qquad \underline{\varphi(|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle} \tag{1.10}$$

Cette application peut ainsi être écrite comme un produit scalaire. Il s'agit de la forme linéaire φ qui s'applique à ψ et qui donne un nombre complexe. Il existe une autre façon de voir ceci. On peut le voir comme le produit scalaire entre deux ket ou encore comme un bra (forme linéaire qui appliquée à un ket qui donnera un complexe) et un ket.

Comme précisé, il s'agit d'une forme **linéaire** :

$$\begin{aligned}\varphi(|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle) &= \langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle \\ &= \lambda_1 \langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2 \langle\varphi|\psi_2\rangle \\ &= \lambda_1\varphi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2\varphi(|\psi_2\rangle)\end{aligned} \tag{1.11}$$

L'espace dual est également un espace de Hilbert : toutes les propriétés de linéarité seront retrouvées. Ainsi, toute combili (complexe) de forme apparentent à $\mathcal{E}^*$ forme une troisième forme appartenant à $\mathcal{E}^*$.

$$\text{Si } \langle\varphi_1|, \langle\varphi_2| \in \mathcal{E}^*, \text{ alors } \lambda_1 \langle\varphi_1| + \lambda_2 \langle\varphi_2| \in \mathcal{E}^* \qquad \forall\lambda_i \in \mathbb{C} \tag{1.12}$$

On peut ainsi démontrer que $\mathcal{E}^*$ est un espace vectoriel.

$$\begin{aligned}\forall |\psi\rangle : (\lambda_1 \langle\varphi_1| + \lambda_2 \langle\varphi_2|) |\psi\rangle &= \lambda_1 \langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2 \langle\varphi_2|\psi\rangle \\ &= \lambda_1 \langle\psi|\varphi_1\rangle^* + \lambda_2 \langle\psi|\varphi_2\rangle^* \\ &= (\lambda_1^* \langle\psi|\varphi_1\rangle + \lambda_2^* \langle\psi|\varphi_2\rangle)^* \\ &= \langle\psi|\lambda_1^*\varphi_1 + \lambda_2^*\varphi_2\rangle^* \\ &= \langle\lambda_1^*\varphi_1 + \lambda_2^*\varphi_2|\psi\rangle\end{aligned} \tag{1.13}$$

Nous avons donc bien un espace vectoriel (ce qui est clairement visualisable dans l'équation ci-dessous). La dernière relation applique un certain bra à n'importe que ψ. En terme de bra, on peut alors écrire

$$\underline{\lambda \langle\varphi_1| + \lambda_2 \langle\varphi_2| = \langle\lambda_1^*\varphi_1 + \lambda_2^*\varphi_2|} \qquad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \tag{1.14}$$

On vient de voir qu'à n'importe quel bras je peux associer un ket. Il serait dès lors intéressant de trouver le ket correspondant à ce bra. Mais avant, on va définir la notion d'opérateur s'appliquant dans l'espace de Hilbert.

Il est possible de se représenter de façon plus précise ce qu'est un bra en se souvenant de l'exemple donné avec un espace de Hilbert de dimension n. Dans un tel espace, un bra n'est qu'un vecteur ligne complexe conjugué.

1.3.1 Opérateurs linéaires (agissant dans $\mathcal{E}$)

Un opérateur linéaire est une application qui fait correspondre un ket à un ket, à la différence de la forme qui fait correspondre un ket à un complexe.

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \rightsquigarrow \hat{A} |\psi\rangle \in \mathcal{E} \tag{1.15}$$

Il est coutume d'indiquer les opérateurs linéaires par un chapeau. La sainte superposition reste d'actualité :

$$\hat{A}\,|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\hat{A}\,|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}\,|\psi_2\rangle \tag{1.16}$$

Pas mal de propriétés valent la peine d'être énoncées :

$$\begin{array}{lll} \bullet\ (\hat{A}+\hat{B})\,|\psi\rangle & = \hat{A}\,|\psi\rangle + \hat{B} + |\psi\rangle & \\ \bullet\ (\hat{A}.\hat{B})\,|\psi\rangle & = \hat{A}(\hat{B}\,|\psi\rangle) & \text{Opérateur produit } \hat{A}.\hat{B} \end{array} \tag{1.17}$$

Nous pouvons voir cet opérateur produit comme une notation efficace. Il ne faut cependant pas perdre à l'idée que, en toute généralité, $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ne commutent pas. On définit alors le commutateur :

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0 \tag{1.18}$$

Comme $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont des opérateurs, la différence des opérateurs est toujours un opérateur, le commutateur est bien un opérateur. Il jouit des propriétés suivantes :

$$\begin{array}{ll} \bullet\ [\hat{B},\hat{A}] & = -[\hat{A},\hat{B}] \\ \bullet\ [\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] & = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}] \\ \bullet\ [\hat{A},\hat{B}.\hat{C}] & = \hat{B}.[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}].\hat{C} \end{array} \tag{1.19}$$

On peut montrer qu'un opérateur linéaire peut se représenter comme une matrice. Pour l'illustrer, reconsidérons notre précédent exemple.

Exemple
Soit un espace de Hilbert de dimension n. Soit

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \qquad |v\rangle = \hat{A}\,|u\rangle \quad ; \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{\hat{A}} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

De par cette représentation, on peut aisément comprendre que la non-commutation vient du fait que les différentes lignes et colonnes de $\hat{A}$ ne peuvent être commutées. Intéressons-nous aux éléments de la matrice de cet opérateur.

1.4 "Élément de matrice" d'un opérateur $\hat{A}$

Comme précédemment, définissons un nouvel "objet" :

$$|\psi\rangle \ \text{ et } \begin{cases} |\varphi\rangle & \in \mathcal{E} \\ \langle\varphi| & \in \mathcal{E}^* \end{cases} , \quad \langle\varphi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle = \langle\varphi|\,(\hat{A}\,|\psi\rangle) \tag{1.21}$$

Les parenthèses permettent de voir ça "tel un produit scalaire". Revenons à notre précédent problème : quel est finalement ce ket ? Lors de l'écriture d'un élément de matrice, il serait intéressant de pouvoir le voir comme un opérateur appliqué à un ket. Une autre vision est celle d'un opérateur qui agit sur un bra, définissant un nouveau bra qui cette fois, agit sur ψ. Revenons à notre exemple.

Exemple

Soit

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \qquad \langle v| = (v_1^* \ v_2^* \ \dots \ v_n^*), \qquad \hat{A}\,|u\rangle = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{1.22}$$

Nous avons alors

$$\langle v| \left(\hat{A}\,|u\rangle\right) = \underbrace{(v_1^* \ v_2^* \ \dots \ v_n^*) \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{\langle ?|u\rangle} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{1.23}$$

1.5 Opérateur adjoint

A toute opérateur $\hat{A}$, on peut associer un nouvel opérateur noté $\hat{A}^\dagger$. Soit $|\psi\rangle$:

$$\hat{A} \text{ agit dans } \mathcal{E}; |\psi'\rangle = \hat{A}\,|\psi\rangle \tag{1.24}$$

Chaque ket est associé à un bra ; dans ce cas ci il s'agit de $\langle\psi'|$ et $\langle psi|$. Existe-t-il une relation entre ces bra ? Mais à quoi cet objet correspond-t-il ? Un bra est une forme linéaire, il faut déterminer comment agit ψ' sur n'importe quel ket de l'espace.

$$\begin{aligned} \forall\,|\psi\rangle \in \mathcal{E} : \psi'\left(|\varphi\rangle\right) &\equiv \langle\psi'|\varphi\rangle && \text{Prop. p.scal.} \\ &= \langle\varphi|\psi'\rangle^* \\ &= \langle\varphi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle^* && \text{Def. de } \psi',\ \text{def. op. adj.} \\ &= \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger\,|\varphi\rangle && (*) \end{aligned} \tag{1.25}$$

Pour arriver à $(*)$, on peut remplacer $\hat{A}$ par son adjoint si l'on permute les termes et considère le complexe conjugué. La conclusion de tous cela - modulo la définition de l'opérateur adjoint - est que l'on voit que l'on peut réécrire le $\langle\psi'|$ en terme de $\langle\psi|$.

$$\underline{\langle\psi'| = \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger} \tag{1.26}$$

Cette relation ressemble assez fortement à (1.24) ou $\hat{A} \to \hat{A}^\dagger$. De façon générale on peut voir qu'un opérateur linéaire peut être entièrement caractérisé par ses éléments de matrice, exactement comme une matrice est caractérisée par tous ses éléments. Pour parvenir à ce résultat, nous avons utilisé la définition d'un opérateur adjoint :

$$\forall\,|\psi\rangle \ \text{ et } \ |\varphi\rangle \in \mathcal{E}, \qquad \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger\,|\varphi\rangle = \langle\psi|\,\hat{A}\,|\varphi\rangle^* \tag{1.27}$$

Exemple

Comme toujours, prenons notre espace de Hilbert de dimension n.

$$\langle v|\,\hat{A}\,|u\rangle = \underbrace{(v_1^* \ v_2^* \ \dots \ v_n^*) \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{(*)} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{1.28}$$

Le "but" est que $(*)$ devienne notre nouveau bra $(w_1\ w_2\ \dots\ w_n)$:

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11}^* & \dots & a_{1n}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^* & \dots & a_{nn}^* \end{pmatrix}}_{\hat{A}^\dagger} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \tag{1.29}$$

Pour obtenir le bra, nous avons réalisé une opération semblable à celles réalisées en algèbre linéaire, à savoir pris le complexe conjugé de la matrice conjugué après inversion et transposée du vecteur. [1]. L'opérateur adjoint n'est rien d'autre que de la matrice adjointe. Le fait de permuter les lignes et les colonnes ne faisait qu'inverser les bra et ket. Il en découle des propriétés intéressantes :

- $\left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A}$
- $\left(\lambda\hat{A}\right)^\dagger = \lambda^*\hat{A}$
- $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$
- $\left(\hat{A}.\hat{B}\right) = \hat{B}^\dagger.\hat{A}^\dagger$

A titre d'exercice, démontrons la dernière propriété

$$\begin{aligned} \langle\psi|\left(\hat{A}.\hat{B}\right)^\dagger|\varphi\rangle &= \langle\varphi|\hat{A}.\hat{B}|\psi\rangle^* \\ &= \left(\left(\left\langle\varphi\middle|\hat{A}\right\rangle\right)\left(\left\langle\hat{B}\middle|\psi\right\rangle\right)\right)^* \\ &= (\langle\psi|\hat{B}^\dagger)(\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle) \\ &= \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle \end{aligned} \tag{1.30}$$

1.6 Opérateurs hermitiens/auto-adjoints

Par définition

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \tag{1.31}$$

Dès lors

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle &= \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \\ \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^* \underline{\in \mathbb{R}} \end{aligned} \tag{1.32}$$

Énonçons quelques propriétés intéressantes

$$\forall \hat{A},\hat{B} \text{ hermitiens },\quad \begin{array}{ll} \hat{A}+\hat{B} & \text{hermitien} \\ \hat{A}.\hat{B} & \text{hermitien ssi } [\hat{A},\hat{B}] = 0 \end{array} \tag{1.33}$$

On peut justifier la dernière propriété de la façon suivante :

$$\begin{aligned} (\hat{A}.\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger.\hat{A}^\dagger \\ &= \hat{A}^\dagger.\hat{B}^\dagger \quad \text{vrai ssi } [\hat{A}^\dagger,\hat{B}^\dagger] = 0 = -\underbrace{[\hat{A},\hat{B}]^\dagger}_{=0} \\ &= \hat{A}.\hat{B} \end{aligned} \tag{1.34}$$

Le produit position et impulsion n'est pas un opérateur hermitien (ces deux états ne commutent pas) ; ce n'est donc pas une quantité observable en physique quantique.

1. Mieux expliciter plz