

- 1) C'est quoi un ket ?

Comment définir et décrire l'état d'un système ?

Est-ce que le ket suffit pour décrire totalement un système physique à un instant donné t ?

En mécanique quantique, un état physique est représenté par un vecteur d'état dans un espace vectoriel complexe E . Suivant Dirac, nous appellerons un tel vecteur un ket et le noterons $|\psi\rangle$. D'après le premier postulat, ce ket contient toute l'information sur l'état physique ; tout ce que nous sommes autorisés à demander à propos de cet état est contenu dans le ket. Premier Postulat (état quantique) : l'état d'un système physique à un instant donné t est défini par la donnée d'un ket $|\psi(t)\rangle$ appartenant à un espace des états E .

Les états $|\psi\rangle$ et $c|\psi\rangle$, où $c \neq 0$, représentent le même état physique. En d'autres termes, seule la "direction" dans l'espace vectoriel est significative. Le terme de "rayon" est parfois employé au lieu de "vecteur".

- 2) Quelle est le premier postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 1 de la mécanique quantique ?

Qu'est-ce qu'un état quantique ?

Premier Postulat (état quantique) : l'état d'un système physique à un instant donné t est défini par la donnée d'un ket $|\psi(t)\rangle$ appartenant à un espace des états E .

- 3) Quelle est le deuxième postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 2 de la mécanique quantique ?

Quelle est le principe de la correspondance en mécanique quantique ?

Deuxième Postulat (principe de correspondance) : Toute grandeur physique mesurable est décrite par un opérateur agissant dans l'espace des états. Cet opérateur est une observable.

- 4) Quelle est le troisième postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 3 de la mécanique quantique ?

C'est quoi le postulat de la mesure dans la mécanique quantique ?

Troisième Postulat (postulat de la mesure) : la mesure d'une grandeur physique représentée par une observable A sur un système ne peut fournir que l'une des valeurs propres de l'opérateur A .

- 5) Quelle est le quatrième postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 4 de la mécanique quantique ?

C'est quoi le postulat de l'interprétation probabiliste dans la mécanique quantique ?

Quelle est le postulat de Born ?

Quatrième Postulat (interprétation probabiliste) : la mesure d'une grandeur physique représentée par une observable A , effectuée sur un système décrit par un état normalisé $|\psi\rangle$ donne le résultat a_n avec la probabilité :

$P_n = \langle a_n | \psi \rangle$ (cas d'un spectre discret et non dégénéré).

$P_n = \sum_n \langle a_n | \psi \rangle$ (cas d'un spectre discret et dégénéré)

- 6) Quelle est le cinquième postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 5 de la mécanique quantique ?

C'est quoi le postulat de réduction du paquet d'ondes dans la mécanique quantique ?

Quelle est le postulat de réduction du paquet d'ondes ?

Cinquième Postulat (réduction du paquet d'ondes) : si la mesure de l'observable A sur un système dans un état $|\psi\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à a_n :

$$\widetilde{P}_n |\psi\rangle / \sqrt{P(a_n)}$$

\widetilde{P}_n : l'opérateur projecteur défini par : $\widetilde{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |a_{n,k}\rangle \langle a_{n,k}|$, g_n étant le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n et $|a_{n,k}\rangle$ ses vecteurs propres associés.

$P(a_n)$: est la probabilité de trouver comme résultat la valeur propre a_n .

7) Quelle est le sixième postulat de la mécanique quantique ?

C'est quoi Le postulat 6 de la mécanique quantique ?

C'est quoi le postulat de l'évolution temporelle de l'état quantique ?

Quelle est l'équation de Schrödinger ?

Sixième Postulat (évolution temporelle) : L'évolution temporelle du ket d'état $|\psi(t)\rangle$ est gouvernée par l'équation de Schrödinger :

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

où l'opérateur Hamiltonien, $H(t)$, qui correspond à l'observable associée à l'énergie totale du système, dépend éventuellement du temps.

Cette équation est l'équation dynamique de la mécanique quantique. Elle signifie simplement que c'est l'opérateur « énergie totale » du système ou Hamiltonien, qui est responsable de l'évolution du système dans le temps.

8) C'est quoi un observable ?

Un observable est un opérateur qui vérifie les propriétés suivantes :

- Il est linéaire.
- Les valeurs propres de A, autrement dit les résultats possibles de l'opération de mesure, doivent être des nombres réels. Ceci est assuré si A est un opérateur hermitien.
- Les vecteurs propres de A doivent former une base orthonormée de l'espace des états. $\{ |u_n^i\rangle \}$ forme une base orthonormée si :

$$\langle u_n^i | u_m^j \rangle = \delta_{ij} \delta_{nm}$$

$$\text{- La relation de fermeture est vérifiée : } \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| = 1$$

9) C'est quoi un opérateur en mécanique quantique ?

C'est un être mathématique qui agit sur une fonction pour donner une autre. Une grandeur physique est représentée par un opérateur ou observable agissant dans l'espace des états. De manière générale, un opérateur A agit sur un ket depuis la gauche, $A \cdot (|\psi\rangle) = A|\psi\rangle$ ce qui donne un autre ket.

10) Qu'est-ce que c'est que les Kets propres ?

Comment définir les kets propres d'un opérateur ?

Quelles sont les kets propres d'un observable ?

Quelles sont les états propres ?

Quelles sont les vecteurs propres d'un opérateur ?

les vecteurs propres décrivent l'état quantique du système immédiatement après la mesure et résultant de cette mesure (voir postulat V : réduction du paquet d'onde). Ce sont les kets propres d'un opérateur A. Ils sont notés $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, $|a_3\rangle$, ... et ont la propriété que

$$A |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle (\forall n)$$

où les a_n sont des nombres complexes. Ces nombres sont les valeurs propres de l'opérateur A. L'ensemble de ces nombres, $\{a_n\}$, constitue le spectre de A.

L'état physique associé à un ket propre est appelé un état propre.

Les états propres de tout observable A sont complets et forment une base orthonormée dans l'espace de Hilbert qui est l'espace des états.

11) C'est quoi un spectre d'un observable ?

On appelle "spectre de l'observable" A, l'ensemble des valeurs propres de A. C'est l'ensemble des valeurs propres associées à la base de E (espace des kets), formée de vecteurs propres de l'observable A.

12) C'est quoi un bra ?

Comment déterminer le bra associé à un ket ?

Qu'est ce que c'est qu'un espace de bras ?

L'espace des bras, un espace vectoriel "dual" à l'espace des kets. Nous postulons qu'à chaque ket $|\psi\rangle$ correspond un bra conjugué, noté $\langle\psi|$ qui est dans l'espace des bras.

L'espace des bras est engendré par des bras propres $\{\langle a_n | \}$ correspondant aux kets propres $\{|a_n \rangle\}$ d'un certain opérateur A. Il y a une correspondance un à un entre l'espace des kets et celui des bras :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\leftarrow CD \rightarrow \langle\psi|, \\ |a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots &\leftarrow CD \rightarrow \langle a_1|, \langle a_2|, \langle a_3|, \dots \\ |\psi\rangle + |\phi\rangle &\leftarrow CD \rightarrow \langle\psi| + \langle\phi|, \\ c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle &\leftarrow CD \rightarrow c_1^* \langle\psi_1| + c_2^* \langle\psi_2| \end{aligned}$$

Où CD correspond à correspondance par dualité.

13) C'est quoi un produit dyadique ?

Le produit dyadique est défini par $|\psi\rangle\langle\phi|$. Ce produit n'a rien à voir avec le produit scalaire. Il correspond à un opérateur agissant dans l'espace des états tandis que le produit scalaire $\langle\phi|\psi\rangle$ est un nombre.

14) C'est quoi un produit tensoriel de deux états ?

Soit les kets $|\psi\rangle \in E$ et $|\phi\rangle \in G$ qui appartiennent à des espaces différents ; le produit $|\psi\rangle|\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ correspond au produit tensoriel de ces deux états.

Notons aussi que pour deux états $|\psi\rangle \in E$ et $|\phi\rangle \in E$ appartenant à un même espace des états, des produits du type : $|\psi\rangle|\phi\rangle$, ou $\langle\psi|\langle\phi|$, n'ont aucun sens et peuvent donc être considérés comme étant "illégaux".

15) C'est quoi un opérateur adjoint ?

Comment calculer l'opérateur adjoint d'un opérateur quelconque ?

Un opérateur adjoint est un opérateur sur un espace préhilbertien qui est défini à partir d'un autre opérateur A et que l'on note A^+ . On dit aussi que A^+ est l'adjoint de l'opérateur A. Il vérifie par définition :

$$(|\phi\rangle, A|\psi\rangle) = (A^+|\phi\rangle, |\psi\rangle)$$

$$\text{Ou } \langle\phi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^+|\phi\rangle^*$$

En pratique, si l'opérateur A admet une représentation matricielle, son opérateur adjoint est tout simplement le conjugué de la transposé.

16) Qu'est-ce qu'un opérateur hermitique ?

Donner une définition d'un opérateur auto-adjoint ?

Un opérateur A est hermitique si $A^\dagger = A$. Cad si $\langle\phi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^*$

Un opérateur hermitique a toutes ses valeurs propres réelles et les vecteurs propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Ce qui peut se résumer par : $A^\dagger = A$ et $A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \rightarrow \langle a_n|a_m\rangle = 0$ ($a_n \neq a_m$).

17) Quelles sont les propriétés vérifiées par l'opérateur adjoint ?

$$-(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$-(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$- \text{Si } A|\psi\rangle = |\phi\rangle \text{ alors } \langle\psi|A^\dagger = \langle\phi|$$

- Représentation matricielle de l'opérateur adjoint en base orthonormée :

$$A_{ij}^\dagger = \langle u_i|A^\dagger|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^* = A_{ji}^*$$

18) Quelles sont les propriétés vérifiées par les opérateurs hermitien ?

- les valeurs propres d'un opérateur hermitien A sont réelles.

- Les vecteurs propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.

- Les éléments de matrice d'un opérateur hermitique sont tel que : $A_{ji}^* = A_{ij}$.

Donc les éléments de la diagonales sont réels et les élément symétriques par rapport à la diagonale sont conjugué l'un de l'autre.

19) Quelle est l'adjoint d'un produit dyadique ?

$$D = |\psi\rangle\langle\phi| \Leftrightarrow D^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$$

20) Quelle est La relation de fermeture ?

Quelle est la relation de complétude ?

Quelle est la résolution de l'identité ?

C'est la relation vérifié par les kets base de l'espace des états (ou les états propres) :

Cas discret : $\sum_{n=1}^N |u_n\rangle\langle u_n| = 1$, $\{|u_i\rangle\}$ base

Cas continu : $\int d\xi |\xi\rangle\langle\xi| = 1$, les $|\xi\rangle$ sont les kets bases.

1 est l'opérateur identité dans l'espace des états.

21) Quelle est la représentation matricielle d'un observable/ un opérateur ?

Comment peut-on représenter un observable sous forme d'une matrice carrée ?
Donner la représentation matricielle d'un observable selon mécanique des matrices de Heisenberg ?

Cas discret :

Selon la mécanique des matrices de Heisenberg, un opérateur, par exemple A, peut être représenté par une matrice carrée. En utilisant deux fois la relation de fermeture, cet opérateur peut s'écrire :

$$A = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N |a_n\rangle \langle a_n| A |a_m\rangle \langle a_m|$$

Dans un espace des états à N dimensions il y a N × N nombres de la forme

$\langle a_n | A | a_m \rangle$. On peut arranger ces nombres de manière à former une matrice carrée de taille N × N dont les indices de lignes et colonnes apparaissent de la manière $A_{ij} = \langle a_i | A | a_j \rangle$.

Dans le cas où les $\{|a_i\rangle\}$ sont des kets propres de A, la matrice associée est diagonale.

Et $\langle a_i | A | a_j \rangle = a_i \delta_{ij}$

Cas continu :

Par analogie : $A_{\xi\xi'} = \langle \xi | A | \xi' \rangle$

Si $|\xi\rangle$ est le ket propre de l'observable A et $|\xi\rangle$ sa valeur propre associée, alors

$$\langle \xi | A | \xi' \rangle = \xi \delta(\xi - \xi')$$

22) Quelle est la représentation matricielle d'un Ket ?

Comment peut-on représenter un ket sous forme d'un vecteur ?

Donner la représentation matricielle d'un ket selon mécanique des matrices de Heisenberg ?

Selon la mécanique des matrices de Heisenberg, les kets sont représentés par des vecteurs colonnes :

$$\text{Cas discret : } |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |a_n\rangle = \begin{pmatrix} c_1 = \langle a_1 | \psi \rangle \\ c_2 = \langle a_2 | \psi \rangle \\ c_3 = \langle a_3 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Cas continu : $|\psi\rangle = \int d\xi \langle \xi | \psi \rangle |\xi\rangle = \int d\xi \psi(\xi) |\xi\rangle$, $\psi(\xi)$ étant la fonction d'onde associée à l'état $|\psi\rangle$.

23) Quelle est la représentation matricielle d'un Bra ?

Comment peut-on représenter un Bra sous forme d'un vecteur ?

Donner la représentation matricielle d'un bra selon mécanique des matrices de Heisenberg ?

Selon la mécanique des matrices de Heisenberg, les bras sont représentés par des vecteurs lignes :

$$\text{Cas discret : } \langle \phi | = (\langle \phi |)^+ = \sum_{n=1}^N d_n^* \langle a_n | = (d_1^* \quad d_2^* \quad d_3^* \dots)$$

Cas continu : $\langle \psi | = \int d\xi \langle \psi | \xi \rangle \langle \xi | = \int d\xi \psi^*(\xi) \langle \xi |$, $\psi(\xi)$ étant la fonction d'onde associée à l'état $|\psi\rangle$.

24) Quelle est la représentation matricielle d'un produit dyadique ?

Quelle est la représentation matricielle d'un produit de ket * bra ?

Un produit dyadique est un opérateur qui peut être représenté par une matrice carrée :

$$\text{Cas discret : } |\psi\rangle \langle \phi| = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} (d_1^* \quad d_2^* \quad d_3^* \dots) = \begin{pmatrix} c_1 d_1^* & c_1 d_2^* & \dots \\ c_2 d_1^* & c_2 d_2^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Cas continu : $|\psi\rangle \langle \phi| = \dots\dots\dots$

25) Quelle est la probabilité de trouver comme résultat de mesure une valeur propre ?

En effectuant une mesure, quelle est sont les résultats possibles ?

Lorsque le système se trouve dans un état $|\psi\rangle$ normé, une mesure d'une grandeur physique du système représenté par l'observable A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'observable mesurée. La probabilité de trouver comme résultat la valeur propre a_n est :

$$P_n = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \quad (4\text{ieme postulat})$$

26) Après la mesure, le système se trouve à quel état quantique ?

Une mesure de A projette le système dans l'un des états propres de A. Elle change donc l'état du système (voir le 5ieme postulat).

Etant donnée un système physique dans un état $|\psi\rangle$ avant la mesure, nous ne savons pas à l'avance dans lequel des différents états propres $|a_n\rangle$ le système va être projeté à la suite de la mesure. Nous postulons toutefois que la probabilité de se trouver projeté dans un $|a_n\rangle$ particulier est donnée par :

$$\text{Probabilité de mesurer } a_n = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

Toute mesure ultérieure donne la même valeur propre avec une probabilité 1. En effet : $P(a_n) = |\langle a_n | a_n \rangle|^2 = 1$

27) Quelle est la probabilité de trouver une deuxième fois une valeur propre ?

Une fois la mesure donne comme résultat une valeur propre, quelle est la probabilité de la retrouver une autre fois ?

Une fois la mesure d'une grandeur physique donne comme résultat la valeur propre a_n , toute mesure ultérieure donne la même valeur propre avec une probabilité 1. En effet, immédiatement après la mesure le système est projeté sur l'état propre associé $|a_n\rangle$. Ainsi $P(a_n) = |\langle a_n | a_n \rangle|^2 = 1$

28) Comment calculer l'espérance quantique par rapport à un état ?

Quelle est valeur moyenne mesurée ?

On définit l'espérance quantique de A par rapport à l'état $|\psi\rangle$ par :

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Il s'écrit aussi :

Cas discret : $\langle A \rangle = \sum_{n=1}^N a_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2$ = La somme des valeurs propres mesurés multiplié par la probabilité de les obtenir.

Cas continu :

En théorie quantique, on utilise aussi des opérateurs dont le spectre n'est pas discret, comme l'opérateur de position X en mécanique quantique. Cet opérateur ne possède pas de valeurs propres, mais a un spectre complètement continu. Dans ce cas, le vecteur $|\psi\rangle$ peut être écrit comme une fonction à valeurs complexes $\psi(x)$ sur le spectre de X. La valeur moyenne de l'opérateur de position s'écrit alors

$$\langle X \rangle = \int dx \psi(x)^* x \psi(x) = \int dx |\psi(x)|^2 x$$

En général : $\langle A \rangle = \int d\vec{r}^3 \psi(\vec{r}, t)^* x [A \psi(\vec{r}, t)]$

29) Quelle est l'écart quadratique moyen ?

Il est défini par : $\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

30) C'est quoi un commutateur ?

A et B deux observables, Alors le commutateur : $[A, B] = AB - BA$ (en général $\neq [B, A]$)

31) C'est quoi un anti-commutateur ?

A et B deux observables, Alors l'anti-commutateur $\{, \}$ est défini par : $\{A, B\} = AB + BA$

32) Quelles sont les propriétés vérifiées par le commutateur ?

Un commutateur vérifie les propriétés suivantes:

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

$$[A, A] = 0 \text{ et } [A, 1] = 0$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

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

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

$$[ABC, D] = AB[C, D] + A[B, D]C + [A, D]BC$$

33) Quand est-ce que deux observables sont dites compatibles ?

Deux observables A et B sont dites compatibles lorsqu'elles commutent $[A, B] = 0$, et incompatibles lorsque $[A, B] \neq 0$.

34) Définir la notion de dégénérescence ?

Quand est-ce que une valeur propre est dite dégénérée ?

Supposons que deux (ou plus) kets propres de A qui sont linéairement indépendants aient la même valeur propre ; alors les valeurs propres des deux kets propres sont dites dégénérées.

35) Comment les kets propres d'un observable sont liés aux kets propres d'un autre lorsque les deux observables sont compatibles ?

Deux observables compatibles A et B ont une base commune de kets propres. Autrement dit, un ket propre de A est également un ket propre de B.

36) C'est quoi un ECOC ?

Un ensemble d'observables $\{A, B, C, \dots\}$ est dit ECOC si :

-Toute les observables commutent deux à deux : $[A,B]=[A,C]=[B,C]=\dots=0$

-Les valeurs propres des opérateurs A, B, C, \dots peuvent avoir des dégénérescences mais si l'on spécifie la combinaison (a, b, c, \dots) des valeurs propres, alors le ket correspondant qui est simultanément propre à A, B, C, \dots est spécifié de manière unique.

Autrement dit, à chaque n-uplet (a,b,c,\dots) correspond un seul ket propre commun entre tous les observables.

37) La combinaison linéaire de deux états propres est-elle un état propre ?

Soient deux kets propres associés à la même valeur propre, alors toute combinaison linéaire de ces deux kets est aussi un ket propre pour la valeur.

38) Quelle est la relation d'incertitude ?

Quelle est la relation qui explique les fluctuations quantiques ?

A et B deux opérateurs hermitiques, a et b deux valeurs propres associées à A et B respectivement. La relation d'incertitude s'écrit :

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

Où l'écart-type est défini par : $\Delta a = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} = \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}$
 $\Delta A = A - \langle A \rangle$

39) La condition d'orthogonalité des kets base de l'espace des états ?

Cas discret : $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$

Cas continu : $\langle \xi | A | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi')$

40) L'amplitude de probabilité ?

La fonction d'onde ?

La fonction d'onde associée à l'état $|\psi\rangle$ représente le produit scalaire entre l'état du système $|\psi\rangle$ et l'état propre $|x\rangle$ de l'opérateur position X. $\{|x\rangle\}$ étant une base infinie (car le spectre de l'opérateur X est continu).

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

Elle est considérée comme une amplitude de probabilité, et $|\psi(x)|^2$ une densité de probabilité.

41) Quelles sont les relations de commutation canonique RCC ?

Les relations de commutation canoniques (RCC) sont données par

$$[X_i, X_j] = 0$$

$$[P_i, P_j] = 0$$

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

X_i : Opérateur position selon la direction i.

P_i : Opérateur impulsion selon la direction i.

42) Théorème spectral dans la mécanique quantique ?

L'ensemble des kets propres $\{|\psi_n\rangle\}$ d'un observable forment une base orthonormée de l'espace des états.

43) Quelles est la représentation X ?

En mécanique quantique et dans un espace à une dimension, la représentation X ou réalisation-X est la représentation dans laquelle l'opérateur de position X appliqué au vecteur propre de cette représentation s'écrit :

$$X |x\rangle = x|x\rangle$$

Comme l'opérateur X est hermitien, on peut montrer pour un vecteur d'état que :

$$X|\psi\rangle = x|\psi\rangle$$

Dans cette représentation, l'opérateur impulsion s'écrit : $P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ et donc :

$$P_x|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle$$

43) Quelles est la représentation P ?

En mécanique quantique et dans un espace à une dimension, la représentation P ou réalisation- X est la représentation dans laquelle l'opérateur impulsion P appliqué au vecteur propre de cette représentation s'écrit :

$$P_x |p_x\rangle = p_x |p_x\rangle$$

Comme l'opérateur P est hermitien, on peut montrer pour un vecteur d'état que :

$$P_x|\psi\rangle = p_x|\psi\rangle$$

Dans cette représentation, l'opérateur position s'écrit : $X = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$. Et donc :

$$X|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}|\psi\rangle$$

44) Qu'est-ce que c'est que l'énergie du point zéro ?

L'énergie du point zéro, ou énergie du point zéro du vide quantique, est la plus faible énergie possible qu'un système physique quantique puisse avoir ; cela correspond à son énergie quand il est dans son état fondamental, c'est-à-dire lorsque toute autre forme d'énergie a été retirée. C'est une conséquence des fluctuations quantiques qui ne permettent jamais à la particule d'être totalement au repos.

Par exemple, pour l'oscillateur harmonique, l'énergie du point zéro est : $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$.

45) Quelle est le Hamiltonien d'un oscillateur harmonique ?

En mécanique quantique le hamiltonien d'un oscillateur harmonique unidimensionnel s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{1}{2m} P_x^2 + \frac{1}{2} m X^2$$

46) Le spectre en énergie d'un oscillateur harmonique unidimensionnel ?

Le spectre en énergie d'un oscillateur harmonique unidimensionnel :

$$E_0 = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{avec } n \text{ entier positif ou nul}$$

Ce qui montre que les énergies accessibles par l'oscillateur sont quantifiées.

47) C'est quoi l'Hamiltonien ?

L'opérateur de Hamilton, opérateur Hamiltonien ou tout simplement Hamiltonien est un opérateur mathématique possédant de nombreuses applications dans divers domaines de

la physique. Il permet de calculer l'énergie totale E associée au mouvement que décrit la fonction d'onde. Il faut, à cette fin, résoudre l'équation de Schrödinger :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

48) Que représente l'opérateur d'évolution ?

En mécanique quantique, l'opérateur d'évolution est l'opérateur qui transforme l'état quantique au temps t_0 en l'état quantique au temps t résultant de l'évolution du système sous l'effet de l'opérateur hamiltonien.

Par définition :

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

49) Quelles sont les propriétés vérifiées par l'opérateur d'évolution ?

Quelques propriétés de l'opérateur d'évolution :

- $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$.

- L'opérateur d'évolution est unitaire : $U(t, t_0)^\dagger = U(t_0, t)$.

Cette propriété implique que si le ket d'état est normalisé à un instant t_0 alors il le reste $\forall t$.

- Loi de composition : $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$ ($t_2 > t_1 > t_0$).

50) Quelle est l'expression de l'opérateur d'évolution ?

L'opérateur de l'évolution satisfait l'équation de Schrödinger sur l'évolution temporelle (voir le 6ème postulat) :

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

Les solutions de cet équation peuvent être réparties en trois grandes classes :

1. cas où H ne dépend pas du temps : c'est le cas le plus simple.

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

2. cas où H dépend du temps mais $[H(t), H(t_0)] = 0 \forall (t, t_0)$:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')}$$

3. cas où H dépend du temps et : $[H(t), H(t_0)] \neq 0 \forall (t, t_0)$ dans ce cas il n'y a pas d'expression simple pour U .

51) Quelle est l'expression du ket d'état à l'instant t si on connaît son expression à l'état initial ?

Si on suppose que l'opérateur Hamiltonien H ne dépend pas du temps, l'expression de l'opérateur d'évolution U dans la base discrète des kets propres de H noté $\{|E_n\rangle\}$ est :

$$U(t, t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} |E_n\rangle \langle E_n|$$

Ainsi

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |E_n\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} |E_n\rangle$$

52) C'est quoi un état stationnaire ?

Quand est-ce qu'un état est dit stationnaire ?

En physique quantique comme dans le cas classique, un état stationnaire est un état qui n'évolue pas dans le temps. Explicitement, un état est dit stationnaire si sa densité de probabilité $|\psi(t)|^2 = |\langle x|\psi \rangle|^2$ ne dépend pas du temps. $\psi(t)$ étant la fonction d'onde associée à cet état quantique.

Dans le cas d'un système isolé ou soumis à un champ extérieur ne dépendant pas du temps (opérateur hamiltonien indépendant du temps), les kets propres de l'opérateur hamiltonien sont toujours des états stationnaires.

53) Quelle est la moyenne temporelle d'un observable ne dépendant pas du temps?

Quelle est la moyenne temporelle d'un observable dans la représentation de Schrödinger?

Soit $|\psi(t)\rangle$ le ket d'état à un instant arbitraire. Et $\{|E_n\rangle\}$ la base discrète des kets propres de H l'Hamiltonien du système.

Toujours pour une observable Ω qui ne dépend pas explicitement du temps, la moyenne temporelle de Ω est donnée par :

$$\langle \Omega \rangle(t) = \langle \psi(t) | \Omega | \psi(t) \rangle = \sum_k \sum_{k'} c_k(t_0)^* c_{k'}(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k - E_{k'})(t - t_0)} \langle E_k | \Omega | E_{k'} \rangle$$

Deux cas se présentent alors :

- Ω et H sont des observables compatibles : $[\Omega, H] = 0$ Alors, la base des $\{|E_n\rangle\}$ est aussi une base propre de Ω . L'observable Ω est une constante du mouvement. Ceci vient du fait

que : $\langle E_k | \Omega | E_{k'} \rangle = \langle E_k | \Omega | E_k \rangle \delta_{k,k'}$ ce qui implique que, même si $|\psi(t)\rangle$ n'est pas un état stationnaire, la moyenne temporelle ne dépend pas du temps :

$$\langle \Omega \rangle(t) = \sum_k |c_k(t_0)|^2 \langle E_k | \Omega | E_k \rangle = \langle \Omega \rangle(t_0)$$

- Ω et H sont des observables incompatibles : $[\Omega, H] \neq 0$. Dans ce cas, il y a bien des oscillations de la valeur moyenne $\langle \Omega \rangle(t)$ au cours du temps qui font intervenir les pulsations de Bohr du système :

$$\omega_{k,k'} = \frac{E_k - E_{k'}}{\hbar}$$

54) Quelle est la moyenne temporelle d'un observable dans la représentation de Schrödinger?

Le point de vue de Heisenberg consiste à considérer la variation dans le temps des observables plutôt que les états (voir la différence entre la représentation de Schrödinger et la représentation de Heisenberg). Dans ce point de vue la valeur moyenne d'un observable Ω est donnée par :

$$\langle \Omega \rangle(t) = \langle \psi(t) | \Omega | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U(t, t_0)^+ \Omega U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \Omega_H(t) | \psi(t_0) \rangle$$

On définit donc l'opérateur Ω dans le point de vue de Heisenberg :

$$\Omega_H(t) = U(t, t_0)^+ \Omega U(t, t_0)$$

Ce point de vue est très utile en pratique pour évaluer les moyennes temporelles. La démarche est la suivante :

- écrire l'équation de Heisenberg associée à $\Omega_H(t)$ (calcul du commutateur $[\Omega, H]$)

- intégrer les équations de Heisenberg. Il faut prendre garde au fait que les équations de Heisenberg sont des identités opératoriels et donc que les constantes d'intégration sont en fait des opérateurs.

- calculer la valeur moyenne de $\Omega_H(t)$ dans l'état initial.

55) Pulsation de Bohr ?

Les pulsations de Bohr sont défini par :

$$\omega_{k,k'} = \frac{E_k - E_{k'}}{\hbar}$$

Où E_k représente une énergie du système (une des valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien).

56) Fonction d'onde stationnaire ?

Si le système est dans un état stationnaire, cette densité de probabilité ne dépend pas du temps et il est possible d'utiliser la fonction d'onde stationnaire $\psi(r)$ qui dans ce cas ne diffère de $\psi(r, t)$ que par un facteur de phase purement complexe, sans intérêt physique.

57) Quelle est l'équation d'Heisenberg ?

L'observable $A = A_S$ (l'observable en point de vue de Schrödinger) évolue dans le temps selon l'équation de Heisenberg :

Si A_S et H dépendent du temps t (cas général) :

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H] + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right)_H = [A(t), H]_H + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right)_H$$

Si A_S et H ne dépendent du temps t :

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H] = [A(t), H]_H$$

Où $A_H = U(t, t_0)^+ A U(t, t_0)$ est l'opérateur A en « point de vue de Heisenberg ».

$H_S = H$ l'Hamiltonien du système.

$[A(t), H]_H = U(t, t_0)^+ [A(t), H] U(t, t_0)$ le commutateur dans le point de vue de Heisenberg.

Pour plus d'information voir « Représentation de Heisenberg et représentation de Schrödinger »

58) Opérateur constante de mouvement ?

Lorsque la valeur moyenne d'un opérateur A est constante dans le temps et ce pour tout

état $|\psi\rangle$ ie : $\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = 0$, l'observable physique représentée par l'opérateur A est alors appelée une constante du mouvement et on dit qu'elle est conservée.

59) Donner le théorème d'Ehrenfest ?

L'évolution dans le temps de la valeur moyenne d'un opérateur ?

Le théorème d'Ehrenfest affirme que la dérivée temporelle de la valeur moyenne d'un opérateur A (où l'opérateur qui renvoie la dérivée temporelle de l'observable concerné) est donnée par :

$$\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

où A est un opérateur quantique quelconque et $\langle A \rangle$ sa valeur moyenne.

Le théorème d' Ehrenfest s'obtient en fait par passage à la valeur moyenne par rapport à l'état $|\psi(t_0)\rangle$ dans l'éq de Heisenberg :

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

$$\text{Implique } i\hbar \langle \psi(t_0) | \frac{dA_H(t)}{dt} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | [A_H(t), H] | \psi(t_0) \rangle + \langle \psi(t_0) | \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_H | \psi(t_0) \rangle$$

Et comme,

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U(t, t_0)^+ A U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | A_H | \psi(t_0) \rangle$$

Alors :

$$\frac{d \langle A \rangle(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

60) La relation d'incertitude d'Heisenberg ?

C'est la relation d'incertitude entre l'observateur position X et impulsion P_x :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

61) La différence entre la Représentation d'Heisenberg et Représentation de Schrödinger ?

Supposons que le système évolue dans le temps. Plus précisément, supposons que les $\psi(a_n)$ évoluent dans le temps. L'équation $\langle a_n | \psi \rangle = \psi(a_n)$ indique qu'il y a deux manières équivalentes de décrire l'évolution temporelle du système quantique. Soit on fait évoluer $\langle a_n |$ soit on fait évoluer $|\psi\rangle$. C'est-à-dire, soit on fait évoluer l'observable A (et donc sa base de vecteurs propres) soit on fait évoluer le vecteur d'état $|\psi\rangle$. Ces deux manières équivalentes de décrire l'évolution temporelle sont respectivement la représentation de Heisenberg et la représentation de Schrödinger.

Dans la représentation de Heisenberg :

- L'état $|\psi\rangle$ est constant dans le temps.
- L'observable $A = A_S$ évolue dans le temps selon l'équation de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H] + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_H = [A(t), H]_H + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t} \right)_H$$

Dans la représentation de Schrödinger :

- Les opérateurs sont indépendants du temps.
- L'état $|\psi\rangle$ évolue dans le temps selon l'équation de Schrödinger :

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

62) Le commutateur de l'opérateur position et impulsion ?

$$\begin{aligned} [X_i, P_j] &= i\hbar \delta_{ij} \\ [P_i, X_j] &= -i\hbar \delta_{ij} \\ [P_i, f(X_j)] &= -i\hbar \frac{df(X_j)}{dX_j} \delta_{ij} \end{aligned}$$

$$[X_i, g(P_j)] = i\hbar \frac{dg(P_j)}{dP_j} \delta_{ij}$$

63) Le projecteur en mécanique quantique ?

Soit $\{|u_n\rangle\}$ une base de l'espace des états.

En notation de Dirac, la forme symbolique des projecteurs est :

$$P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$$

La base $\{|u_n\rangle\}$ peut être également une base de kets propres d'un observable qui représente le système. Si la valeur propre u_n est g_n fois dégénérée alors le projecteur sur le sous espace vectoriel engendré par les kets propres associés $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1,\dots,g_n}$ est :

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$

