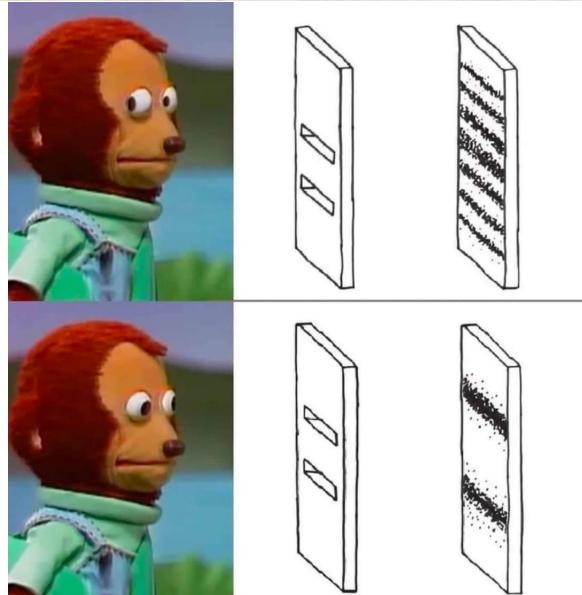


NOTES DU COURS DE MÉCANIQUE QUANTIQUE 2

Baptiste CALVEZ

L3 Physique



en haut : Reddit : r/physicsmemes, Schrödinger's alive !! par u/Helpful_Option_7678

au dessus : Reddit : r/physicsjokes, Double slit guilt par u/Egren

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| 1 OUTILS MATHÉMATIQUES | 11 |
| 1.1 Espace des fonctions d'ondes | 11 |
| 1.1.1 Structure de l'espace \mathfrak{F} des fonctions d'ondes | 11 |
| 1.1.2 Bases orthonormées discrètes dans $\mathfrak{F} : \{u_i(r)\}$ | 12 |
| 1.1.3 Opérateurs linéaires | 13 |
| 1.2 Espace des états : notation de Dirac | 14 |
| 1.2.1 Introduction | 14 |
| 1.2.2 Vecteur « bra » et « ket » | 14 |
| 1.2.3 Opérateur linéaire | 14 |
| 1.2.4 Conjugaison hermitienne | 15 |
| 1.3 Représentation dans l'espace de Dirac | 16 |
| 1.3.1 Introduction | 16 |
| 1.3.2 Relation caractéristique d'une base orthonormée | 17 |
| 1.3.3 Représentation des kets et des bras | 17 |
| 1.3.4 Représentation matricielle d'un opérateur | 17 |
| 1.3.5 Changement de représentation | 18 |
| 1.4 Équation aux valeurs propres | 19 |
| 1.4.1 Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur | 19 |
| 1.4.2 Les Observables | 21 |
| 1.4.3 Ensemble d'observables qui commutent | 22 |
| 2 LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE | 25 |
| 2.1 Énoncé des postulats | 25 |
| 2.1.1 Description de l'état d'un système | 25 |
| 2.1.2 Description des grandeurs physiques | 25 |
| 2.1.3 Mesure des grandeurs physiques | 25 |
| 2.1.4 Évolution du système dans le temps | 28 |
| 2.1.5 Règle de quantification | 28 |
| 2.2 Interprétation des postulats sur les observables et leurs mesures | 29 |
| 2.2.1 Valeur moyenne d'une observable dans un état donné | 29 |
| 2.2.2 Écart quadratique moyen | 30 |
| 2.2.3 Compatibilité des observables | 30 |
| 2.3 Contenu physique de l'équation de Schrödinger | 31 |
| 2.3.1 Propriété générale de l'équation de Schrödinger | 31 |
| 3 LE MAGNÉTISME ATOMIQUE | 37 |
| 3.1 Introduction | 37 |
| 3.2 Magnétisme classique | 38 |
| 3.3 La précession de Larmor | 40 |
| 3.4 Quantification du moment cinétique | 41 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.4.1 | Description de l'appareil | 41 |
| 3.4.2 | Calcul classique de la déviation | 41 |
| 3.4.3 | Résultat et conclusion | 42 |
| 3.4.4 | Description théorique | 43 |
| 3.4.5 | L'observable S_z et l'espace des états du spin | 43 |
| 3.4.6 | Les autres composantes S_x et S_y | 43 |
| 3.4.7 | Évolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme | 44 |
| 4 | OUTILS MATHÉMATIQUES 2 | 47 |
| 4.1 | Introduction de bases n'appartenant pas à \mathfrak{F} | 47 |
| 4.1.1 | Onde plane | 47 |
| 4.1.2 | Rappel sur la transformée de Fourier | 47 |
| 4.1.3 | La base $\{v_p(x)\}$ vérifie la relation de fermeture | 47 |
| 4.1.4 | La généralisation aux fonctions à trois dimensions | 48 |
| 4.2 | La fonction delta | 49 |
| 4.2.1 | Introduction | 49 |
| 4.2.2 | Propriété de la fonction delta | 49 |
| 4.3 | Deux exemples importants de représentations et d'observables | 50 |
| 4.3.1 | Les représentations $\{ r\rangle\}$ et $\{ p\rangle\}$ | 50 |
| 4.4 | Les opérateurs R et P | 53 |
| 4.4.1 | Définition | 53 |
| 4.4.2 | Action de l'opérateur P en représentation $\{ r\rangle\}$ | 53 |
| 4.4.3 | Action de l'opérateur X en représentation $\{ p\rangle\}$ | 54 |
| 4.4.4 | Calcul des commutateurs $[X, P_x]$, $[Y, P_y]$ et $[Z, P_z]$ | 54 |
| 4.4.5 | R et P sont hermitiques | 54 |
| 4.4.6 | Vecteurs propres de R et P | 55 |
| 5 | PRODUIT TENSORIEL | 57 |
| 5.1 | Introduction | 57 |
| 5.2 | Définition et propriétés du produit tensoriel | 57 |
| 5.2.1 | Produit scalaire | 58 |
| 5.2.2 | Produit tensoriel d'opérateurs | 59 |
| 5.2.3 | Notation | 59 |
| 5.3 | Équations aux valeurs propres | 59 |
| 5.3.1 | Valeurs et vecteurs propres d'opérateurs prolongés | 59 |
| 5.4 | Ensemble Complet d'Observables qui Commutent dans \mathcal{E}_1 | 60 |
| 6 | POTENTIEL A UNE DIMENSION CONSTANT PAR MORCEAU | 61 |
| 6.1 | Introduction | 61 |
| 6.2 | Propriété générale des problèmes à une dimension | 62 |
| 6.2.1 | La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée | 63 |
| 6.2.2 | Le théorème de Wronskien | 63 |
| 6.2.3 | Tout état lié à une dimension est non dégénéré | 64 |
| 6.2.4 | Les états liés sont deux à deux orthogonaux entre eux | 64 |
| 6.2.5 | Toute valeur propre de H ne peut être inférieure au minimum de $V(x)$ | 64 |
| 6.3 | Cas des trous symétriques $V(x) = V(-x)$ | 65 |
| 7 | L'OSCILLATEUR HARMONIQUE | 67 |
| 8 | LES ÉTATS NON LIÉS | 83 |

| | |
|---|------------|
| 9 LE MOMENT CINÉTIQUE | 91 |
| 10 LA THÉORIE DES PERTURBATIONS | 117 |
| 11 L'ESSENTIEL DU COURS | 137 |
| 11.1 Outils Mathématiques 1 | 137 |
| 11.2 Les postulats | 137 |
| 11.3 Le magnétisme atomique | 137 |
| 11.4 Outils Mathématiques 2 | 137 |
| 11.5 Produit tensoriel | 137 |
| 11.6 Potentiel à une dimension constant par morceau | 137 |
| 11.7 L'oscillateur harmonique | 137 |
| 11.8 Les états non liés | 137 |
| 11.9 Le moment cinétique | 137 |

PRÉFACE

Ce document est une mise en forme de mes notes de cours, c'est à dire que toutes les abréviations que j'ai utilisé sont remplacées par ce qu'elles abrégeaient. Comme il s'agit de mes notes de cours, des erreurs peuvent s'y être glissée. J'ai également complété mes notes de cours avec des recherches personnelles, qui seront insérées dans des encadrés.

Étant donné la certaines longueur du cours, je propose en fin de ce document un « essentiel du cours », qui consiste principalement à vous donner les formules et phrases importantes du cours avec le numéro de la page pour compléter et retrouver rapidement le passage en question.

Plusieurs parties du cours, notamment des démonstrations, eurent lieu en travaux dirigés. De même, comme dit plus tard, ce cours contient de nombreuses références au « Cohen ». Il s'agit du livre de Claude Cohen-Tannoudji « Mécanique Quantique ».

Aussi, il y a un trou dans le premier chapitre du cours, à l'écriture de ce document.

Ce document a été rédigé en L^AT_EX sur TeXmaker, sous GNU/Linux Ubuntu 20.04 LTS.

CONSTANTES & ABRÉVIATIONS

■ Abréviations :

« cst » : constante.

■ Constantes :

e : nombre d'Euler, où $e \approx 2.781\ 218\ 282\ 459\ 045 \dots$

π : Pi, nombre irrationnel, parfois appelé constante d'Archimède. $\pi \approx 3,141\ 592\ 653\ 589\ 793 \dots$

h : constante de Planck, elle a pour valeur (fixé par convention le 20 mai 2019) $6,626\ 070\ 15 \times 10^{-34}$ J.s. Son unité est le Joule seconde (J.s), et est de dimension $[h] = M.L^2.T^{-1}$. À noter qu'elle est à la base de la définition du kilogramme.

\hbar : constante de Planck réduite, aussi dite constante de Dirac. Elle est égale à la constante de Planck divisé par 2π . Elle est lié au fait qu'en mécanique quantique, il est plus « naturel » de parler en fréquence angulaire que de la fréquence, c'est à dire, s'exprimer en radians par seconde plutôt qu'en hertz. Ce qui a conduit à coupler la constante de Planck avec le facteur 2π . Son unité est $kg.m^2.s^{-1}.rad^{-1}$ et sa dimension est $[\hbar] = M.L^2.T^{-1}.[rad]^{-1}$.

■ Symboles mathématiques :

\mathcal{C} : Ensemble des nombres complexes ($z = a \pm ib$).

cos : fonction cosinus.

d, dt, dx : dérivée, dérivée selon t (généralement le temps), dérivée selon x.

∂ : dérivée partielle.

\in : appartient à.

exp(x) : fonction exponentielle. S'écrit également e^x où e est le nombre d'Euler.

\perp : est perpendiculaire à.

i : nombre imaginaire ($i^2 = -1$).

\sum : somme de (aussi dit sigma de).

sin : fonction sinus.

\Re : partie réelle d'un nombre.

\Im : partie imaginaire d'un nombre.

\propto : est proportionnel à.

INTRODUCTION AU COURS

Comme dit dans la préface, ce document est une retranscription de mes notes du cours de Mécanique Quantique 2, dont les cours magistraux furent assurés par Arfa MONDHER. Ce cours fait suite au cours Mécanique Quantique de Gilles VIEN NGUYEN, qui eu lieu en licence 2 Physique. Ce cours, ou équivalent dans d'autres universités, est un prérequis à ce présent cours. Ces deux cours ont été dispensé à l'Université de Bretagne Occidentale à l'UFR de Sciences & Techniques à BREST.

Avant de parler du contenu du présent, faisons un résumé du cours précédent. Dans le dernier cours, nous avons vu les origines de la mécanique quantique, le comportement ondulatoire classique, allant de la définition de la longueur d'onde à la cohérence, aussi appelé « train d'ondes » en passant par la superposition, les interférences...

Ensuite, le cours précédent est revenu sur l'ensemble des rayonnements électromagnétique situés entre 400 nm et 700 nm, dit visibles, plus simplement : la lumière. Il fut rappelé l'histoire de l'étude de la lumière depuis le XVII^e siècle avec les travaux de Kepler (propagation rectiligne de la lumière) de Descartes (loi de la réfraction) et de Newton. Rapidement, il fut démontré que la lumière possède un comportement de particule mais également un comportement ondulatoire (dualité onde - corpuscule ; mise en évidence par l'expérience des fentes de Young). L'un des points importants dans l'histoire de la mécanique quantique, le rayonnement du corps noir permit d'introduire, dans le cours, des constantes importantes tel que la constante de Planck ($h = 6.6 \times 10^{-34} Js$).

Max Planck fut celui qui introduit la notion de « quanta » d'énergie (d'où la mécanique quantique tire son nom). Le cours poursuit sur les nombreux travaux ayant lieu entre la toute fin du XIX^e siècle et au début du XX^e siècle sur l'atome (avec Thomson, Rutherford et Bohr principalement). Nous revenons ensuite sur la dualité onde-corpuscule où l'on aborde en détail l'expérience des fentes de Young, la notion du paquet d'onde et l'interprétation des inégalités de Heisenberg.

Après que les fondements de la mécanique quantique furent abordés, le cours se pencha ensuite sur la notion très importante en mécanique quantique qu'est la probabilité, par la loi de Malus notamment. Le cours de « Mécanique Quantique » dispensé en licence 2 termine sur des points qui seront vu plus loin dans les premiers chapitres ce présent cours, tel que la notation de Dirac (les bras et les kets), la notion d'hermitien / hermitique, les adjoints, la mesure de grandeurs physiques et l'équation de Schrödinger.

Le cours de « Mécanique Quantique 2 » abordera, quand à lui, les aspects suivants de la discipline : l'espace des fonctions d'ondes, où nous profiterons pour revenir sur la notation de Dirac, les opérateurs hermitiques et les adjoints, pour finir sur les ensembles d'observables qui commutent. Nous verrons ensuite les six postulats de la mécanique quantiques, leurs interprétations physiques, mais aussi nous résoudrons l'équation de Schrödinger. Nous enchaînerons avec

le magnétisme atomique où nous mettrons en évidence le spin.

Puis viendra une pause pour introduire de nouveaux concepts mathématiques, tel que les ondes planes, les transformées de Fourier, la généralisation aux fonctions à trois dimensions et le produit tensoriel. Nous poursuivront en abordant le potentiel à une dimensions constant par morceau, où nous verrons la continuité de la fonction d'onde, le théorème de Wronshien, la dégénérescence ou non des états. De surcroît, nous parlerons de l'oscillateur harmonique, des états non liés et du moment cinétique et nous conclurons ce cours avec la théorie des perturbations, qui sera vu par le biais d'une résolution d'exercice.

Pour conclure cette introduction, je tient à préciser que le cours contient des exercices d'applications qui n'ont pas été reporté dans cette retranscription de cours — car oui, je ne vais quand même pas travailler à la place du prof non plus quoi, faut que vous bossez aussi. En effet, je tient à préciser que cette retranscription du cours n'est juste qu'un support dont la présence en cours magistraux et travaux dirigés est importante, car, par mon expérience, les cours magistraux sont denses en informations.

Chapitre 1

OUTILS MATHÉMATIQUES

1.1 Espace des fonctions d'ondes

Introduction de la fonction d'onde, abrégée en « f.o. ». $\Psi(\vec{r}, t)$ est une fonction d'onde, c'est à dire qu'elle décrit l'état d'un système. Son module $|\Psi(\vec{r}, t)|$ nous donne la densité de présence à l'instant t et au point \vec{r} . De plus $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ nous donne la probabilité de présence à l'instant t en \vec{r} dans l'élément de volume $d^3r = dx dy dz$.

D'où la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

On dit que $\Psi(\vec{r}, t)$ est une fonction d'onde de carré sommable. Donc $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathfrak{L}^2$: elle appartient à un espace de Hilbert. Le sous-espace \mathfrak{F} contient les fonctions d'ondes continues, définies partout et indéfiniment dérivables. Les fonctions d'ondes appartenant au sous-espace \mathfrak{F} ont un sens physique.

1.1.1 Structure de l'espace \mathfrak{F} des fonctions d'ondes

A : \mathfrak{F} est un espace vectoriel

Si $\Psi_1(\vec{r}, t)$ et $\Psi_2(\vec{r}, t)$; et que $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$, nous aurons donc :

$$\lambda_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \Psi_2(\vec{r}, t) \in \mathfrak{F}$$

Pour rappel : $\Psi_1(\vec{r}, t)$ et $\Psi_2(\vec{r}, t)$ sont de carré sommable.

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\lambda_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \Psi_2(\vec{r}, t)|^2$$

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\lambda_1|^2 |\Psi_1(\vec{r}, t)|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(\vec{r}, t)|^2 + \lambda_1^* \lambda_2 \Psi_1(\vec{r}, t) \Psi_2(\vec{r}, t) + \lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1(\vec{r}, t) \Psi_2(\vec{r}, t)$$

Et c'est de carré sommable !

À voir également l'inégalité de Schwarz :

$$\int |\Psi_1^*(\vec{r}, t) \Psi_2(\vec{r}, t)|^2 d^3r \leq \int |\Psi_1(\vec{r}, t)|^2 d^3r \int |\Psi_2(\vec{r}, t)|^2 d^3r$$

Voir également le « Cohen » page 165 chapitre 2 complément A II.

B : Le produit scalaire

A tout couple $\Psi(\vec{r}, t)$ et $\varphi(\vec{r}, t) \in \mathfrak{F}$ associé à un complexe :

$$(\varphi(\vec{r}, t), \Psi(\vec{r}, t)) = \int \varphi(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)d^3r$$

Propriété des produit scalaire :

- Linéaire :

$$(\varphi(\vec{r}, t), \lambda_1\Psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2\Psi_2(\vec{r}, t)) = \lambda_1(\varphi(\vec{r}, t)\Psi_1(\vec{r}, t)) + \lambda_2(\varphi(\vec{r}, t)\Psi_2(\vec{r}, t))$$

- Antilinéaire :

$$(\lambda_1\varphi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2\varphi_2(\vec{r}, t), \Psi(\vec{r}, t)) = \lambda_1^*(\varphi_1(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)) + \lambda_2^*(\varphi_2(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t))$$

Il faut également noter que : $(\Psi, \Psi) \geq 0$ et $\in \mathbb{R}$; $(\Psi, \Psi) = 0 \rightarrow \Psi = 0$; et $\sqrt{(\Psi, \Psi)}$ est la norme de Ψ .

1.1.2 Bases orthonormées discrètes dans \mathfrak{F} : $\{u_i(r)\}$

A : Définition

Soit $\{u_i(\vec{r})\}$ un ensemble de fonctions appartenant à \mathfrak{F} avec $i = 1, \dots, n$. L'ensemble $\{u_i(\vec{r})\}$ est orthonormé si :

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

À noter que δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Symbol de Kronecker, aussi appelé **delta de Kronecker**. Nommé d'après le mathématicien prussien Léopold Kronecker (1823 - 1891). Introduite par ce dernier en 1866, il s'agit d'une fonction de deux variables qui est égale à 1 si celles-ci sont égales, et 0 sinon.

$$\delta_{ij} = \delta_i^j = \delta^{ij} = 1 \rightarrow i = j ; 0 \rightarrow i \neq j$$

Source : https://fr.wikipedia.org/wiki/Symbole_de_Kronecker

L'ensemble $\{u_i(\vec{r})\}$ forme une base dans \mathfrak{F} si toute fonction $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathfrak{F}$ s'écrit de façon unique sous la forme $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_i(i(t)u_i(\vec{r}))$.

B : Composante d'une fonction d'onde sur la base $\{u_i(r)\}$

Cette composante est donnée par le produit scalaire de $\Psi(\vec{r}, t)$ par $u_i(\vec{r})$:

$$C_i(t) = \int u_i^*(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t)d^3r$$

C : Expression du produit scalaire

$\varphi(\vec{r}, t)$ et $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathfrak{F}$

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{r}, t) &= \sum_i C_i(t) u_i(\vec{r}) \\ \Psi(\vec{r}, t) &= \sum_i D_j(t) u_j(\vec{r}) \\ (\Psi, \varphi) &= \int \sum_i C_i^*(t) u_i^*(\vec{r}) \sum_j D_j(t) u_j(\vec{r}) = \sum_{ij} C_i^*(t) D_j(t) \int u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d^3 r\end{aligned}$$

Avec :

$$\begin{aligned}\int u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d^3 r &= \delta_{ij} = \sum_{ij} C_i^*(t) D_j \delta_{ij} = \sum_i C_i^*(t) D_i(t) \\ (\Psi, \Psi) &= \sum_i |D_i(t)|^2\end{aligned}$$

D : Relation de fermeture

Nous établissons ici une relation très importante de la mécanique quantique : la relation de fermeture. Soit $\{u_i(\vec{r})\}$ dans une base \mathfrak{F} , avec $\Psi \in \mathfrak{F}$.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_i C_i(t) u_i(\vec{r})$$

On rappelle que :

$$C_i(t) = \int u_i^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}', t) d^3 r'$$

D'où :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_i \int u_i^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}', t) d^3 r' u_i(\vec{r}')$$

Il faut noter que :

$$\sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}') \text{ se note : } \delta(\vec{r}' - \vec{r}')$$

Et donc nous arrivons à :

$$\sum_i u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}') = \delta(\vec{r}' - \vec{r}')$$

Voilà la relation de fermeture !

1.1.3 Opérateurs linéaires

A : Définition

Un opérateur linéaire est un objet mathématique qui à toute fonction d'onde $\Psi \in \mathfrak{F}$ fait correspondre une autre fonction d'onde $\Psi' \in \mathfrak{F}$. Il est à noter que la correspondance est linéaire.

$$A\Psi(\vec{r}, t) = \Psi'(\vec{r}, t)$$

$$A(\lambda_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \Psi_2(\vec{r}, t)) = A\lambda_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \Psi_2(\vec{r}, t) = \lambda_1 \Psi'_1 + \lambda_2 \Psi'_2$$

B : Produit d'opérateur

Soit A et B deux opérateurs linéaires, leur produit est défini par l'équation :

$$BA\Psi(\vec{r}, t) = B(A\Psi(\vec{r}, t)) = B\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi''(\vec{r}, t)$$

En règle générale : $AB \neq BA$. On appelle commutateur de A et B l'opérateur : $[A, B] = AB - BA$

1.2 Espace des états : notation de Dirac

1.2.1 Introduction

Tout état quantique d'une particule sera caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace abstrait \mathcal{E} appelé espace des états. Pour le reste de ce chapitre, nous développeront le calcul vectoriel dans \mathcal{E} .

1.2.2 Vecteur « bra » et « ket »

A : Élément de \mathcal{E} ket

Il existe un isomorphisme entre les espaces \mathcal{E} et \mathfrak{F} . En effet $\Psi \in \mathfrak{F}$ lui correspond $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$. Ici Ψ représente une fonction d'onde dans \mathfrak{F} . Donc $|\Psi\rangle$ est un vecteur dans \mathcal{E} .

B : Élément de \mathcal{E}^* (\mathcal{E}^* est le dual de \mathcal{E})

A tout ket $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$ lui correspond un bra $\langle\Psi| \in \mathcal{E}^*$. La correspondance est antilinéaire ! $\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle \in \mathcal{E}$ lui correspond $\lambda_1^*\langle\Psi_1| + \lambda_2^*\langle\Psi_2| \in \mathcal{E}^*$

Nota.Bene : À tout bra ne correspond pas forcément un ket, cf. Cohen volume 1 page 111-112.

C : Notation de Dirac pour les produits scalaires

Le produit scalaire de $|\Psi\rangle$ par $|\varphi\rangle$ est donné par $\langle\varphi|\Psi\rangle$.

Nous avons les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\Psi\rangle &= \langle\Psi|\varphi\rangle^* \\ \langle\varphi|\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2\rangle &= \lambda_1\langle\varphi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\Psi_2\rangle \\ (\langle\lambda_1\varphi_1| + \langle\lambda_2\varphi_2|)|\Psi\rangle &= \lambda_1^*\langle\varphi_1|\Psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\Psi\rangle \geq 0 \text{ si } \langle\Psi|\Psi\rangle = 0, \text{ cela nous donne : } \langle\Psi| &= 0 \text{ et } |\Psi\rangle = 0.\end{aligned}$$

1.2.3 Opérateur linéaire

A : object mathématique qui à tout $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$ associe $|\Psi'\rangle \in \mathcal{E}$. $A|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle$. A est linéaire :

$$A(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1A|\Psi_1\rangle + \lambda_2A|\Psi_2\rangle = \lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle$$

Le produit de deux opérateurs A et B est : $BA|\Psi\rangle = B(A|\Psi\rangle) = B|\Psi'\rangle = |\Psi''\rangle$. On rappelle que généralement : $AB \neq BA$. Voici maintenant un exemple d'opérateur linéaire : le projecteur. Par définition, un projecteur sur $|\Psi\rangle$ est donné dans la représentation de Dirac par l'expression :

$$P_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| ; \text{ avec : } \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

À noter également que, pour rappel : $P_\Psi^2 = P_\Psi$. L'action de P_{Psi} sur $|\varphi\rangle$ s'exprime selon l'équation suivante :

$$P_\Psi |\varphi\rangle = |\Psi\rangle \langle \Psi| \varphi\rangle = \langle \Psi| \varphi\rangle |\Psi\rangle = \alpha |\Psi\rangle$$

Avec $\alpha \in \mathbb{C}$ et c'est le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ sur $|\Psi\rangle$.

Projection sur un sous-espace : Soit $\{|\Psi_i\rangle\}$ une base de vecteurs normés et perpendiculaires entre eux, avec $i = \{1, \dots, N\}$. Si on définit P_Ψ le projecteur sur le sous-espace soutenu par la base $\{|\Psi_i\rangle\}$.

$$\begin{aligned} P_\Psi &= \sum_{i=1}^N |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \times \left(\sum_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \right) \\ P_\Psi^2 &= P_\Psi \end{aligned}$$

L'action de P_Ψ sur $|\varphi\rangle$ s'exprime sous l'équation suivante :

$$P_\Psi |\varphi\rangle = \sum_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \varphi\rangle = \sum_i \langle \Psi_i| \varphi\rangle |\Psi_i\rangle = \sum_i \alpha_i |\Psi_i\rangle$$

Avec $\alpha_i \in \mathbb{C}$.

1.2.4 Conjugaison hermitienne

A : Opérateur adjoint A^\dagger d'un opérateur linéaire

Nous avons associé un bra $\langle \Psi |$ à tout ket $|\Psi\rangle$, nous associons un opérateur adjoint A^\dagger à tout opérateur A.



Voici l'obèle. Non, ce n'est pas une croix mais une dague (ou un poignard), ici simple (il existe aussi la dague double : ‡). En anglais, ce symbole s'appelle *dagger*. C'est de part sa ressemblance avec la croix latine (croix chrétienne) que ce symbole est très souvent utilisé pour indiquer une information ayant une relation avec la mort, par exemple pour une date de décès, ou en biologie, une espèce disparue.

En mathématique, une des formes primitives de l'obèle, *l'obélus* ÷ signifie la division.

Source : hptts ://fr.wikipedia.org/wiki/Ob%C3%A8le

A^\dagger est le conjugué hermitique de A. Soit $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle \in \mathcal{E}$ et si $A|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle$ la correspondance entre bra et ket permet de définir l'action de A^\dagger sur $\langle \Psi | / \langle \Psi | A^\dagger = \langle \Psi |$. L'action de A^\dagger sur le bra $\langle \Psi |$ est linéaire au même titre que celle de A sur $|\Psi\rangle$.

$$(\lambda_1 \langle \Psi_1 | + \lambda_2 \langle \Psi_2 |) A^\dagger = \lambda_1 \langle \Psi_1 | A^\dagger + \lambda_2 \langle \Psi_2 | A^\dagger = \lambda_1 \langle \Psi_1 | + \lambda_2 \langle \Psi_2 |$$

Pour rappel : nous savons que $\langle \Psi | \varphi\rangle = \langle \varphi | \Psi \rangle^\times$.

Si nous remplaçons $|\Psi\rangle$ par $|\Psi'\rangle$, nous avons :

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \varphi\rangle &= \langle \varphi | \Psi' \rangle^\times \\ \langle \Psi' | A^\dagger | \varphi \rangle &= \langle \varphi | A | \Psi' \rangle^\times \\ \langle \varphi | A | \Psi \rangle &= \langle \Psi | A^\dagger | \varphi \rangle^\times \end{aligned}$$

B : Propriétés et correspondance entre opérateur et son adjoint

$$\begin{aligned}(A^\times)^\dagger &= A \\ (A + B)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger \\ (\lambda A)^\times &= \lambda^\times A^\dagger \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger\end{aligned}$$

C : Conjugaison hermitique

Il s'agit que si A un opérateur hermitique, avec $A = |v\rangle\langle u|$, alors son adjoint sera $A^\dagger = |u\rangle\langle v|$. Cette relation est démontré en travaux dirigés.

1.3 Représentation dans l'espace de Dirac

1.3.1 Introduction

Choisir une représentation, c'est choisir une base orthonormée dans l'espace des états \mathcal{E} . Dans une représentation, les kets, les bras et les opérateurs prennent une forme matricielle à coefficients complexes. Les kets deviennent des matrices colonnes, les bras deviennent des matrices lignes et les opérateurs deviennent, quand à eux, des matrices carrées.

Par exemple :

$$|\Psi\rangle = \begin{Bmatrix} K_1 \\ K_2 \end{Bmatrix}$$

$$\langle\varphi| = \{B_1 \quad B_2\}$$

$$A = \begin{Bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{Bmatrix}$$

Un autre exemple, avec des chiffres :

$$|\Psi\rangle = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$$\langle\varphi| = \{0 \quad 1\}$$

$$A = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ i & 2/3 \end{Bmatrix}$$

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{Bmatrix} 1 \\ i \end{Bmatrix}$$

$$\langle G| = \frac{1}{\sqrt{2}} \{i \quad 1\}$$

1.3.2 Relation caractéristique d'une base orthonormée

A : La relation d'orthonormalisation

Un ensemble $\{|u_i\rangle\}$ est orthonormée si ses éléments vérifient les relations $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$.

B : La relation de fermeture

Soit $\{|u_i\rangle\}$ constitue une base si tout les vecteur de \mathcal{E} s'écrit de façon unique sur les éléments de cette base. Soit $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$; $|\Psi\rangle = \sum_i C_i |u_i\rangle$. Avec $C_i = \langle u_i | \Psi \rangle$: d'où $|\Psi\rangle = \sum_i \langle u_i | \Psi \rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \Psi \rangle$. A noter que : $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = I$. Et donc nous obtenons : $|\Psi\rangle = I |\Psi\rangle$. Il est à noter que I désigne l'opérateur identité.

1.3.3 Représentation des kets et des bras

A : Représentation d'un ket

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ le ket est représenté par une colonne matrice, ses coefficients sont donnés par le produit scalaire du ket sur les vecteurs de la base. $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$.

$$|\Psi\rangle = \begin{Bmatrix} \langle u_1 | \Psi \rangle \\ \langle u_2 | \Psi \rangle \\ \langle u_3 | \Psi \rangle \end{Bmatrix}$$

B : Représentation d'un bra

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ le bra est représenté par une matrice ligne, ses coefficients sont données par le produit scalaire du bra sur les vecteurs de la base. $\langle \Psi | \in \mathcal{E}$.

$$\langle \Psi | = \{ \langle \Psi | u_1 \rangle \quad \langle \Psi | u_2 \rangle \quad \langle \Psi | u_3 \rangle \}$$

1.3.4 Représentation matricielle d'un opérateur

A : Représentation de A par une matrice carrée

Soit A un opérateur dans la base $\{|u_i\rangle\}$. La représentation par une matrice des coefficients $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$ où i est sur la ligne et j sur la colonne.

$$[A] = \begin{Bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{Bmatrix}$$

B : Représentation matricielle du ket $|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$

$\{|U_i\rangle\}$ est une représentation. On projette cette équation sur un vecteur quelconque $|U_i\rangle$.

$$\begin{aligned}\langle U_i | \Psi' \rangle &= \langle U_i | A | \Psi \rangle \\ \langle U_i | \Psi' \rangle &= \sum_j \langle U_i | A | U_j \rangle \langle U_j | \Psi \rangle \\ C'_i &= \sum_j A_{ij} C_j\end{aligned}$$

Écriture matricielle :

$$\begin{Bmatrix} C'_1 \\ C'_2 \\ C'_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{Bmatrix}$$

C : Représentation matricielle de l'adjoint A^\dagger de A

Rappelons :

$$\begin{aligned}\langle \varphi | A | \Psi \rangle^* &= \langle \Psi | A^\dagger | \varphi \rangle \\ \langle \varphi | A | \Psi \rangle &= \langle \Psi | A^\dagger | \varphi \rangle^*\end{aligned}$$

Si maintenant, nous commutons tous les A_{ij} :

$$A_{ij} = \langle U_i | A | U_j \rangle = \langle U_j | A | U_i \rangle^\dagger = A_{ji}^\dagger$$

On passe de la matrice A à celle de son adjoint par la conjugaison complexe et par la permutation des indices (permutations des coefficients par symétrie en diagonale principale). Si A est hermitique : $A = A^\dagger$.

1.3.5 Changement de représentation**A : Position du problème**

Considérons deux bases différentes $\{|U_i\rangle\}$ et $\{|t_k\rangle\}$ discrètes. Le changement de base nécessite le calcul des composantes $\langle U_i | t_k \rangle$ de chacun des kets de la nouvelle base dans l'ancienne. Nous posons $S_{ik} = \langle U_i | t_k \rangle$. Si S^\dagger est son adjoint, son symbole matricielle est : $S_{ki}^\dagger = S_{ik}^*$. On rappelle que $\langle U_i | t_k \rangle^* = \langle t_k | U_i \rangle$.

B : Transformer les composantes d'un ket

Soit $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$ et $\{|U_i\rangle\}$ une représentation dans l'espace des états de Dirac. Considérons que nous connaissons les composantes de $|\varphi\rangle$ dans cette base et nous voulons connaître ses composantes dans une autre représentation $\{|t_k\rangle\}$. Nous savons déjà que $|\Psi\rangle = \sum C_i |U_i\rangle$. Pour connaître les composantes de $|\Psi\rangle$ dans la nouvelle base, nous faisons le projecteur sur tous ses vecteurs. Nous obtenons : $\langle t_k | \Psi \rangle = \sum C_i \langle t_k | U_i \rangle$.

C : Transformation d'un bra

Soit $\langle \Psi | \in \mathcal{E}^*$ et $\langle \Psi | = \sum_i C_i^* \langle U_i |$. $\{|U_i\rangle\}$ et $\{|t_k\rangle\}$ sont deux représentations : $\langle \Psi | t_k \rangle = \sum_i C_i \langle U_i | t_k \rangle$. Supposons que : $|\Psi\rangle = \sum_{k=1} b_l |t_k\rangle$. Donc : $b_k^* = \sum_i C_i^* S_{ik}$.

D : Transformation des éléments de matrices

Soit A un opérateur linéaire et supposons que nous connaissons ses éléments de matrices dans la représentation $\{|U_i\rangle\}$: A'_{ij} . On peut connaître les éléments de matrice dans cette opérateur dans toute autre représentation $\{|t_k\rangle\}$ par exemple.

$$\begin{aligned} A_{kl} &= \langle t_k | A | t_l \rangle = \langle t_k | \sum_i |U_i\rangle \langle U_i | A \sum_j |U_j\rangle \langle U_j | t_l \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \langle t_k | U_i \rangle A_{ij} \langle U_j | t_l \rangle \\ &= \sum_i \sum_j S_{ik}^* A_{ij} S_{jl} \\ &= \sum_{ij} S_{ki}^* A_{ij} S_{jl} \\ &= \sum_{ij} S_{ik}^* A_{ij} S_{jl} \end{aligned}$$

1.4 Équation aux valeurs propres

1.4.1 Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur

Définition : On dit que $|\Psi\rangle$ est un ket propre de l'opérateur linéaire A s'il vérifie que l'équation : $A |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle$ avec $\lambda \in \mathbb{C}$. C'est l'équation aux valeurs propres d'un opérateur linéaire. L'ensemble des valeurs propres de A s'appelle le spectre de A .

Remarque : Si $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de A , alors $\alpha |\Psi\rangle$ avec $(\alpha \in \mathbb{C})$ l'est aussi et avec la même valeur propre.

Pour enlever l'indétermination, on normalise $|\Psi\rangle$. Cependant, tout ket est déterminer à une phase près. Une valeur propre est dite simple ou non dégénérée quand il lui correspond un seul vecteur propre. Une valeur propre est dite dégénérée s'il lui correspond deux ou plusieurs vecteurs propres indépendants. Si λ est dégénérée g fois, alors il lui correspond g vecteurs propres indépendants. Ainsi, l'ensemble des kets de valeurs propres de A associé à λ constitue un espace vectoriel de dimension g appelé sous espace propre de la valeur propre λ .

Remarque : En prenant le couple conjuguée de l'équation : $A |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle$ on obtient $\langle \Psi | A^\dagger = \lambda^* \langle \Psi |$. $|\Psi\rangle$ vecteur propre de A de λ ; et $|\Psi\rangle$ vecteur de A^\dagger de λ^* . Si A est hermitique : $A = A^\dagger$, alors $\lambda = \lambda^*$. À noter que λ est réel.

A : Recherche des valeurs propres d'un opérateur

On projette l'équation aux valeurs propres sur les vecteurs de la représentation $\{|U_i\rangle\}$.

$$\begin{aligned}\langle U_i | A | \Psi \rangle &= \lambda \langle U_i | \varphi \rangle \\ \langle U_i | A \sum_j |U_j\rangle \langle U_j | \Psi \rangle &= \lambda C_i \\ \sum_j \langle U_i | A | U_j \rangle C_j &= \lambda C_i \\ \sum_j (A_{ij} - \lambda C_{ij}) C_j &= 0\end{aligned}$$

C'est un système d'équation homogène.

B : L'équation caractéristique

Le système d'équation énoncé précédemment est homogène et linéaire, il admet une solution si et seulement si le déterminant des coefficients est nul : $\Delta(\mathcal{A} - \lambda I) = 0$.

\mathcal{A} est la matrice $N \times N$, avec ($N = \dim A$) et dont les éléments sont A_{ij} et I matrice identité. Cette équation est dite caractéristique ou séculaire. Sa résolution donne le spectre de l'opérateur A . On peut expliciter par la formule :

$$\left\{ \begin{array}{ccc} A_{11} - \lambda & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} - \lambda \end{array} \right\} = 0$$

Cette équation est de degré N en λ (de degré 3 en λ dans notre exemple) et admet N racines réelles ou imaginaires, distinctes (ou simple) confondues (dégénérées).

Remarque : Arrivé à ce stade, nous connaissons le $S_p(A)$. Le prochain effort, c'est le calcul des vecteurs propres.

B : Détermination des vecteurs propres

Choisissons une valeur propre λ_0 solution de l'équation séculaire et posons l'équation :

$$A |\Psi\rangle = \lambda_0 |\Psi\rangle$$

En dimension 3, nous posons :

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres permet de trouver les composantes du vecteur propre $|\Psi\rangle$. Deux cas peuvent se présenter :

1) λ_0 est une valeur propre simple, dans ce cas, l'équation caractéristique comporte $\lambda = \lambda_0(N - 1)$ équation indépendante et avec N composantes inconnues.

Le calcul donne une infinité de solution et tous les coefficients peuvent être déterminer de façon unique en fonction de l'un d'eux qui peut-être fixé arbitrairement.

Rappel : Il est important de normaliser le vecteur propre solution du problème.

2) λ_0 est une valeur propre. q ($q > 1$). Dans ce cas, l'équation aux valeurs propres conduit à $(N - q)$ équation indépendante.

La résolution de ce système nous donne q vecteur propre indépendante. Nous avons traité le cas d'un opérateur hermitique car la dégénérescence d'une valeur propre hermitique est toujours égale à la dimension de son espace propre.

1.4.2 Les Observables

A : Propriétés des valeurs propres d'un opérateur hermitique

Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles, donc : soit A est hermitique, soit $|\varphi\rangle$ est son vecteur propre. $A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$; où λ est la / les valeur(s) propre(s) de A. $\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle$. Maintenant, nous prenons le complexe conjugué :

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle^* = \lambda^*\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^\dagger|\Psi\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda$$

Et donc, A est hermitique, $|\Psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ sont ses vecteurs propres associés à λ et μ respectivement ($\lambda \neq \mu$).

$$\begin{aligned} A|\Psi\rangle &= \lambda|\Psi\rangle \text{ et } \langle\Psi|A = \lambda\langle\Psi| \\ A|\varphi\rangle &= \mu|\varphi\rangle \text{ et } \langle\varphi|A = \mu\langle\varphi| \\ \langle\varphi|A|\Psi\rangle &= (\langle\varphi|A)|\Psi\rangle = \langle\varphi|(A|\Psi\rangle) = \mu\langle\varphi|\Psi\rangle = \langle\varphi|\Psi\rangle\lambda \\ (\mu - \lambda)\langle\varphi|\Psi\rangle &= 0 ; \mu = \lambda \end{aligned}$$

D'où : $\langle\varphi|\Psi\rangle = 0$, et donc que $|\varphi\rangle \perp |\Psi\rangle$.

B : Définition d'une observable

Nous avons vu que les vecteurs propres d'un opérateur est hermitique, forment une base et supposons que \mathcal{E} est de dimensions N (finie). Soit A est hermitique, ses valeurs propres forment un spectre discret : a_n avec $n = 1, 2, \dots, N$.

Soit g_n le degré de dégénérescence de a_n . Si $g_n = 1$, a_n est une valeur propre simple, $g_n = 2$, a_n est une valeur propre double. Nous notons que $|\Psi_n^i\rangle$ ($i = 1, \dots, g_n$) les vecteurs linéairement indépendants choisis dans le sous-espace $\mathcal{E}_n \subset \mathcal{E}$.

Avec : $A|\Psi_n^i\rangle = a_n|\Psi_n^i\rangle$.

Nous avons démontré que les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Soit $|\Psi_n^i\rangle \rightarrow a_n$ et $\langle\Psi_n^i|\Psi_n^j\rangle = 0$ ($a_n \neq a_n^j$).

À l'intérieur de chaque sous-espace \mathcal{E}_n , on peut toujours choisir les kets $|\Psi_n^i\rangle$ orthonormé : ($\langle\Psi_n^i|\Psi_n^j\rangle = \delta_{ij}$).

En faisant ainsi dans chaque sous-espace, nous obtenons un système perpendiculaire de vecteurs propres de A vérifiant la relation $\langle \Psi_n^i | \Psi_n^j \rangle = \delta_{nm} \cdot \delta_{ij}$ et dont les dimensions sont égales à celle de \mathcal{E}_n . Par définition, un opérateur hermitique A est un observable si les vecteurs propres associés à des valeurs propres forment une base complète dans l'espace des états. On peut alors écrire :

$$II = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^{g_n} |\Psi_n^i\rangle \langle \Psi_n^i|$$

Avec g_n la dégénérescence de la valeur propre a_n . On peut aussi définir le projecteur sur le sous-espace \mathcal{E}_n .

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

À noter que n est fixé.

Les formes vectorielles de A :

$$A = \sum_{n=1}^N a_n P_n$$

a_n sont des valeurs propres de A.

1.4.3 Ensemble d'observables qui commutent

A : Trois théorèmes importants

Premier théorème : Si deux opérateurs A et B commutent et soit $|\Psi\rangle$ vecteur propre de A (de B) alors $B|\Psi\rangle$ ($A|\Psi\rangle$) est vecteur propre de A (de B) avec le même vecteur propre.

Démonstration : Supposons deux opérateurs A et B avec $AB = BA$; supposons que $|\Psi\rangle$ vecteur propre de A avec a_n valeurs propres $A|\Psi\rangle = a_n|\Psi\rangle$

$$AB|\Psi\rangle = BA|\Psi\rangle = Ba_n|\Psi\rangle = a_nB|\Psi\rangle$$

$$A(B|\Psi\rangle) = a_n(B|\Psi\rangle)$$

D'où $B|\Psi\rangle$ est le vecteur propre de A sur a_n .

Corollaire : Si a_n est une valeur propre simple, tous les vecteurs propres associés à a_n sont colinéaires. Ainsi $B|\Psi\rangle$ est colinéaire à $|\Psi\rangle$ sur $B|\Psi\rangle = b|\Psi\rangle$ d'où $|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de B. Si a_n est une valeur propre dégénérée, on peut dire $B|\Psi\rangle \in \mathcal{E}_n$ de A. \mathcal{E}_n est le sous-espace de a_n : pour tout $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}_n$. On dit que \mathcal{E}_n est invariant sous l'action de B.

Deuxième théorème : Si deux observables A et B commutent. Si $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont deux vecteurs propres de A avec des valeurs propres différentes a_1 et a_2 alors l'élément de matrice :

$$\langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$$

$$\langle \Psi_1 | [A, B] | \Psi_2 \rangle = 0 ; \text{ où commutent } [A, B] = 0$$

$$(\langle \Psi_1 | A)B | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_1 | B(A | \Psi_2 \rangle) = 0$$

$$a_1 \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle - a_2 \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$$

$$(a_1 - a_2) \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$$

$$a_1 \neq a_2$$

$$\langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$$

$$\langle \Psi_1 | AB | \Psi_2 \rangle = 0$$

$$\langle \Psi_1 | BA | \Psi_2 \rangle = 0$$

Troisième théorème : Si deux observables commutent, on peut toujours construire une base perpendiculaire de l'espace des états, constituée de vecteurs propres communs de A et B. On sait que : si A est observable et $\{|U_n^i\rangle\}$ est une base de ses vecteurs propres avec $n = 1, 2, \dots, N$ et $i = 1, 2, \dots, g_n$ et B commute avec A, on sait que : - le sous-espace \mathcal{E}_n est invariant par B ; - $\langle V_n^i | B | U_n^i \rangle = 0$ si $n \neq n'$.

On ne sait pas si $n = n'$, alors la valeur de $\langle V_n^i | B | U_n^i \rangle = ?$.

Comment construire la base de vecteur propre ?

On écrit la matrice de B dans la base de vecteurs propres de A. On veille à ranger les vecteurs propres de A par blocs associés à une même valeur propre. Ce qui permet d'obtenir une matrice de B qui est orthogonale par blocs :

| | $\mathcal{E} U_1^1\rangle U_1^2\rangle$ | $\mathcal{E} U_2^1\rangle U_2^2\rangle$ | $\mathcal{E} U_3^1\rangle U_3^2\rangle$ |
|-----------------|---|---|---|
| \mathcal{E}_1 | | 0 | 0 |
| \mathcal{E}_2 | 0 | | 0 |
| \mathcal{E}_3 | 0 | 0 | |

$|U_1^1\rangle, |U_1^2\rangle$ sont associées à a_1 dégénéré g_1 fois.
 $|U_2^1\rangle, |U_2^2\rangle$ sont associées à a_2 dégénéré g_2 fois.
 $|U_3^1\rangle, |U_3^2\rangle$ sont associées à a_3 dégénéré g_3 fois.

De cela, deux cas se distinguent :

1) la valeur propre a_n est non dégénérée,

$a_n \longrightarrow |U_n\rangle$ et $|U_n\rangle$ est le vecteur propre de B.

2) Si a_n est une valeur propre dégénérée, le bloc qui représente B dans \mathcal{E}_n est non diagonal car $\{|U_n^i\rangle\}$ ne sont pas des vecteurs propres de B. On rappelle que toute combinaison linéaire des vecteurs propres de la base $\{|U_n^i\rangle\}$ est vecteur propre de A associé à a_n . Le travail consiste à diagonaliser chaque bloc, la nouvelle base obtenue est ainsi forcément une base propre de A et B.

B : Ensemble complet d'observable qui commutent (Ecoc)

Si A est une observable dont les valeurs propres ne sont pas dégénérées, alors A est un **Ensemble Complet d'Observables qui Commutent** à lui tout seul. La désignation d'une valeur propre de A identifie un vecteur unique de la base de vecteur propre de A à une phase près. Supposons qu'une valeur propre de A est dégénérée, A n'est pas un ensemble complet d'observables qui commutent.

Pour construire un ensemble d'observable qui commutent, on prend une autre observable B, qui commutent avec A. On cherche la base de vecteurs propres commune à A et B. Les deux observables A et B forment un ensemble complet d'observables qui commutent, si les données d'un couple de valeurs propres de A et B simultanément (a_n, b_n) désigne un seul et unique vecteur propre de la base commune de A et B.

Si ce n'est pas le cas, on prend une troisième observable, qui commute avec A et avec B, et on refait le même travail de recherche de la base commune A, B et C. Et on regarde si le triplet (a_n, b_n, c_n) désigne un seul et unique vecteur propre de la récente base commune.

Par définition, un ensemble d'observable A, B, C est appelé ensemble complet d'observable qui commutent si :

- toutes les observables commutent deux à deux ;
- la donnée d'un groupe de valeurs propres de toute les observables A, B, C suffit pour déterminer un vecteur commun à un facteur propre.

Chapitre 2

LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

2.1 Énoncé des postulats

2.1.1 Description de l'état d'un système

Premier postulat : À un instant E_0 fixe, l'état quantique d'un système physique est définie par la donnée d'un ket $|\Psi\rangle$ appartenant à l'espace des états.

Remarque : Deux kets proportionnelles représentants le même état physique : $|\varphi\rangle = \alpha |\varphi\rangle$. L'espace des états est un espace vectoriel d'où le postulat implique la superposition (le principe).

$$|\varphi_1\rangle \text{ et } |\varphi_2\rangle \in \mathcal{E}$$

$$|\Psi\rangle = \alpha |\varphi_1\rangle + \beta |\varphi_2\rangle \in \mathcal{E}$$

Considérons le ket $|\varphi\rangle = \alpha |\varphi_1\rangle + \beta |\varphi_2\rangle$, et si maintenant, on considère également le ket $|\varphi'\rangle$.

$$|\varphi\rangle = \alpha \exp(i\theta_1) |\varphi_1\rangle + \beta \exp(i\theta_2) |\varphi_2\rangle \text{ avec } \theta_1 \neq \theta_2 + 2k\pi$$

$$|\varphi\rangle \neq |\varphi'\rangle \text{ or : } |\varphi\rangle = |\varphi'\rangle \text{ si } \theta_1 = \theta_2 \text{ modulo } 2\pi$$

2.1.2 Description des grandeurs physiques

Deuxième postulat : Toute grandeur physique mesurable est décrite par un opérateur agissant dans l'espace des états du système physique, cet opérateur est une observable.

Remarque : Un *état* est un *vecteur*, une *grandeur physique* est une *observable* !

2.1.3 Mesure des grandeurs physiques

A : Troisième postulat

La mesure physique d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable correspondante. Ici, on fait la distinction entre le phénomène physique A et l'observable A.

B : Principe de la décomposition spectrale

Considérons un système dans l'état $|\Psi\rangle$ et $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Soit une grandeur physique A décrit par A . On sait que la mesure de A donne une des valeurs propres de A . La prédiction du résultat est probabiliste, elle dépend de l'état $|\Psi\rangle$ du système. Penchons nous alors sur le calcul de la probabilité.

Premièrement : regardons le cas où toutes les valeurs propres sont simples, c'est à dire que $\{A\}$ est un ensemble complet d'observables qui commutent. Soit $\{|u_n\rangle\}$ la base de vecteurs propres de A .

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \quad \forall n$$

On sait (A est observable) que :

$$I = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \text{ et } \forall |\Psi\rangle \in \mathcal{E}$$

$$|\Psi\rangle = I|\Psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n|\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle$$

On postule que la probabilité $P(a_n)$ de trouver a_n comme résultat de la mesure de A est donnée par la relation $P(a_n) = |C_n|^2$. Nous avons vu en licence 2 que $\{|u_n\rangle\}$ est une base dans \mathcal{E} , si $|\Psi\rangle = \sum C_n |u_n\rangle$. L'amplitude de probabilité de trouver le système dans l'état $|u_n\rangle = A_n$.

$$A_n = \langle u_n | \Psi \rangle = C_n$$

La probabilité de trouver le système dans l'état $|u_n\rangle$.

$$P_n = |A_n|^2 = |C_n|^2$$

Deuxièmement : regardons le cas où certaines valeurs propres sont dégénérées. A est observable et $\{|u_n^i\rangle\}$ est la base de vecteurs propres de A . On sait que :

$$I = \sum_n \left(\sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \right)$$

g_n étant le degré de dégénérence de la valeur propre a_n . i varie de 1 à g_n pour chaque n.

$$\forall i \quad A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$$

Pour n fixe $\{|u_n^i\rangle\}$ forme une base dans le sous-espace \mathcal{E}_n propre de a_n . On définit :

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

Le projecteur sur le sous-espace \mathcal{E}_n et $|\Psi_n\rangle$ comme état la partie $|\varphi\rangle$ qui appartient à \mathcal{E}_n :

$$|\Psi_n\rangle = P_n |\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \Psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} G_n^i |u_n^i\rangle \quad (\text{n étant fixé})$$

La probabilité $P(a_n)$ de trouver a_n comme résultat de la mesure de A est donnée par :

$$P(a_n) = \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_n^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \langle \Psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} C_n^{i*} C_n^i = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i|^2$$

Quatrième postulat

Lorsque l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre a_n de l'observable $A g_n$ correspondante vaut :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \Psi \rangle|^2$$

g_n est le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n et $\{|u_n^i\rangle\}$ avec $i = 1, \dots, g_n$, un système perpendiculaire de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre \mathcal{E}_n associé à la valeur propre a_n de A.

Remarque : Si a_n est simple, on ignore l'exposant : $P(a_n) = |\langle u_n | \Psi \rangle|^2 = |C_n|^2$.

$$\text{Si } |\Psi\rangle \text{ est non normée : } P(a_n) = \sum_n |C_n^i|^2.$$

C : Réduction du paquets d'ondes

Considérons un système à l'instant t dans l'état $|\Psi\rangle$ et on se propose de mesurer une grandeur physique \mathcal{A} . Si la mesure donne a_n comme résultat et que cette valeur est non dégénérée, on postule immédiatement après la mesure que le système se trouve dans l'état $|u_n\rangle$ vecteur propre de l'observable A associé à a_n .

Si on considère que la valeur propre a_n est dégénérée g_n fois et que $P_n = \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$ est le projecteur sur le sous-espace propre de a_n : \mathcal{E}_n (sous-espace de vecteurs propres de A associé à a_n) l'état du système immédiatement après la mesure est décrite par l'étape :

$$|\Psi_n\rangle = \frac{P_n |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}}$$

Avec $\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}$ la constante de normalisation.

$$|\Psi_n\rangle = \frac{\sum_i^{g_n} C_n^i |u_n^i\rangle}{\sqrt{\sum_i^{g_n} |C_n^i|^2}}$$

Cinquième postulat

Si la mesure de la grandeur physique \mathcal{A} sur un système dans l'état $|\Psi\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système immédiatement après mesure est la projection normée :

$$\frac{P_n |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}}$$

de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à a_n .

Exemple simple :

Supposons la base $(|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle)$ de l'observable H de matrice :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{Bmatrix} \text{ où } \hbar\omega_0 \text{ est réel.}$$

Soit $|\Psi\rangle = \alpha_1 |u_1\rangle + \alpha_2 |u_2\rangle + \alpha_3 |u_3\rangle$ l'état du système. Après une mesure de H donnant $\hbar\omega_0$ comme résultat, le système se trouve immédiatement dans l'état $|u_1\rangle$. Après une mesure de H donnant $2\hbar\omega_0$ comme résultat, le système se trouve immédiatement dans l'état :

$$|\Psi\rangle = \frac{\alpha_2 |u_2\rangle + \alpha_3 |u_3\rangle}{\sqrt{|\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2}}$$

2.1.4 Évolution du système dans le temps

Sixième postulat

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\Psi\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger :

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

$H(t)$ est l'observable associé à l'énergie totale du système. H est appelé l'opérateur hamiltonien du système.

2.1.5 Règle de quantification

Énoncé : Comment construire un opérateur en mécanique quantique d'une grandeur physique \mathcal{A} déjà définie en mécanique classique ?

Par exemple : $l_n = ypz - zpy$; $V(r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \dots$

On se limite au cas d'une particule sans spin et soumise à un potentiel scalaire, dans ce cas, on ne tient compte que des coordonnées spatiales. Ainsi :

- à la position $\vec{r}(x, y, z)$ de la particule, on associe l'observable $\vec{R}(X, Y, Z)$
- à l'impulsion $\vec{p}(px, py, pz)$ de la particule, on associe l'observable $\vec{P}(PX, PY, PZ)$

Les composantes de \vec{R} et \vec{P} vérifient les relations de commutations.

$$[R_i, R_j] = 0 ; [P_i, P_j] = 0 ; [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

À une grandeur physique $\mathcal{A}(\vec{r}, \vec{p}, t)$, on lui associe en mécanique quantique l'observable $A(\vec{R}, \vec{P}, t)$ et on respecte les règles de commutation.

Si on considère à titre d'exemple : $\mathcal{A}(n, p_1) = \vec{r} \cdot \vec{p} = xpx + ypy + zpz$

Nous aurions en mécanique classique : $\vec{r} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{r}$

Mais en mécanique quantique : $\vec{R} \cdot \vec{P} \neq \vec{P} \cdot \vec{R}$!

Ainsi : $(\vec{P} \vec{R})^\dagger = \vec{R}^\dagger \vec{P}^\dagger = \vec{R} \vec{P} \neq \vec{P} \vec{R}$, d'où les produits $\vec{R} \vec{P}$ et $\vec{P} \vec{R}$ ne sont pas hermitiques.

On ajoute donc aux postulats une règle de symétrisation. Par exemple, l'observable associée au produit $\vec{r} \vec{p} t$ est $\frac{1}{2} (\vec{R} \vec{P} + \vec{P} \vec{R})$ qui est hermitique.

Règle de symétrisation : L'observable A qui décrit une grandeur physique \mathcal{A} définit classiquement s'obtient en remplaçant, dans l'expression convenablement symétrisée de \mathcal{A} , \vec{r} et \vec{r}' par des observables \vec{R} et \vec{R}' respectivement.

2.2 Interprétation des postulats sur les observables et leurs mesures

2.2.1 Valeur moyenne d'une observable dans un état donné

La prédiction du quatrième postulat s'exprime en probabilité. La valeur moyenne de l'observable A dans l'état $|\Psi\rangle$ est donnée par le symbole $\langle A \rangle_\Psi$ qui est la moyenne des résultats obtenus en effectuant N mesures de A sur des systèmes qui se trouvent tous dans le même état. Considérons le cas où A a un spectre discret. Sur N mesure de A , on obtient $N(a_n)$ fois le résultat a_n :

Théoriquement : $P(a_n) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N(a_n)}{N}$ avec $\sum_{n=1}^N N(a_n) = N$

La valeur moyenne : $\langle A \rangle_\Psi = \sum_n a_n P(a_n)$

Or, d'après le quatrième postulat :

$$P(a_n) = \sum_i |\langle u_n^i | \Psi \rangle|^2$$

$$\langle A \rangle_\Psi = \sum_n a_n \sum_i \langle u_n^i | \Psi \rangle \langle \Psi | u_n^i \rangle$$

De plus, nous savons que :

$$A |u_n^i\rangle = a_n |u_n^i\rangle \text{ et } \langle u_n^i | A = a_n \langle u_n^i |$$

$$\langle A \rangle_\Psi = \sum_{ni} \langle \Psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | A | \Psi \rangle$$

La base $\{|u_n^i\rangle\}$ est complet et vérifie la relation de fermeture.

$$I = \sum_{ni} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$$

$$\langle A \rangle \Psi = \langle \Psi | \sum_{ni} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| A | \Psi \rangle$$

$$\langle A \rangle \Psi = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$$

Reprendons l'exemple de tout à l'heure.

$$\langle H \rangle \Psi = (a_1^\times, a_2^\times, a_3^\times) \begin{Bmatrix} \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar\omega_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{Bmatrix}$$

$$|\Psi\rangle = \alpha_1 |u_1\rangle + \alpha_2 |u_2\rangle + \alpha_3 |u_3\rangle$$

$$\langle H \rangle \Psi = (a_1^\times, a_2^\times, a_3^\times) \begin{Bmatrix} \hbar\omega_0 & \alpha_1 \\ 2\hbar\omega_0 & \alpha_2 \\ 2\hbar\omega_0 & \alpha_3 \end{Bmatrix} = \hbar\omega_0\alpha_1 + 2\hbar\omega_0(|\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2)$$

2.2.2 Écart quadratique moyen

$\Delta A = \sqrt{-\langle A \rangle^2 + \langle A^2 \rangle^2}$ est la grandeur qui représente la dispersion des résultats de mesures de l'observable A autour de la moyenne.

Attention : $\langle A \rangle^2$: valeur moyenne de A au carré ; $\langle A^2 \rangle$: valeur moyenne du carré de A .

$$\Delta A \approx \sigma \text{ en statistique}$$

En statistique, V est la variance :

$$V = \frac{n_1(x_1 - m)^2 + n_2(x_2 - m)^2 + \dots}{N} \quad \sigma = \sqrt{V}$$

En mécanique quantique :

$$\sigma = \sqrt{V} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$V = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 + \langle A \rangle^2 - 2A \langle A \rangle \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

2.2.3 Compatibilité des observables

Voir également les pages 231, 232 et 233 du Cohen.

Rappel : Considérons deux observables A et B qui commutent, A et B ne forment pas un ensemble complet d'observables qui commutent.

La relation de permutation affirme qu'il existe une base commune de A et B . De ce fait, chaque couple de valeurs propres à A et B (a_n, b_n) correspond au moins à un vecteur de la base commune. Si A et B forment un ensemble complet d'observables qui commutent, la conjecture précédente donnent à tout couple (a_n, b_n) correspond un seul et unique vecteur de la base commune.

Énoncé de la règle : lorsque deux observables commutent, la mesure de l'une suite à la mesure de l'autre ne fait pas perdre les informations fournies par la première mesure.

Schéma : supposons que A est une observable qui commute avec B , nous avons alors un système dans l'état $|\Psi\rangle$, a_n est valeur propre de A associé à $|u_n\rangle$.

$$|\Psi\rangle \left| \begin{array}{c} A \\ |u_n\rangle \\ (a_n) \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} A \\ |u_n\rangle \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} B \\ |u_n\rangle \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} A \\ |u_n\rangle \end{array} \right|$$

L'ordre dans lequel on mesure les observables est sans importance. Ces observables sont compatibles.

2.3 Contenu physique de l'équation de Schrödinger

2.3.1 Propriété générale de l'équation de Schrödinger

A : Déterminisme

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle$$

Cette expression indique que la connaissance de l'état d'un système à un instant t suffit pour connaître son état à tout moment ultérieur (H étant connu).

B : Le principe de superposition

Le principe déterministe peut être généralisé à toute combinaison linéaire de kets de l'espace des états. Par exemple :

$$|\Psi\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle$$

C : Conservation de la norme d'un ket

Soit $|\Psi(t)\rangle$ un ket de l'espace des états, sa norme est constante. La norme $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle\Psi(t)| \right) |\Psi\rangle + \langle\Psi(t)| \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle\Psi(t)|H^\dagger|\Psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle\Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle = 0$$

$$H = H^\dagger$$

D'où :

$$\frac{d}{dt} \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 0$$

D : Évolution de la valeur moyenne d'une observable

Regardons le lien avec la mécanique classique. Soit A une observable et $|\Psi(t)\rangle$ est un état normé d'un système physique. La valeur moyenne de A dans l'état $|\Psi(t)\rangle$: $\langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle$. Elle dépend du temps par l'intermédiaire de $|\Psi(t)\rangle$ et aussi par $A(t)$ dans certaines situations. $A(t)$ dépend explicitement du temps. On se propose d'évaluer l'évolution en fonction du temps de $\langle A(t) \rangle \Psi$.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle \Psi &= \left(\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) A |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | \frac{dA}{dt} |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | A \left(\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right) \\ \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle \Psi &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | A |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | \frac{dA}{dt} |\Psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | AH |\Psi(t)\rangle\end{aligned}$$

Définition : la constante du mouvement de toute observable qui ne dépend pas du temps et qui commute avec H .

Remarque : A est une constante du mouvement : $\frac{d}{dt} \langle A \rangle \Psi = 0$

E : Cas d'un système conservatif

On appelle système conservatif tout système dont l'hamiltonien est indépendant du temps.
Remarque : pour un système conservatif, l'hamiltonien est une constante du mouvement.

F : Résolution de l'équation de Schrödinger

Considérons un système physique, H est son hamiltonien. Soit E_n avec $n = 1, \dots, N$ sont les valeurs propres de H associées aux kets propres $|u_n^i\rangle$ avec $i = 1, \dots, g_n$ (les valeurs propres a_n sont en générales dégénérées et H n'est pas un ensemble complet d'observables qui commutent).

Soit $|\Psi(t)\rangle$ un ket de l'espace des états.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i \sum_n C_n^i(t) |u_n^i\rangle$$

En projetant l'équation de Schrödinger sur les kets propres de H $\{|u_n^i\rangle\}$, on a :

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} \langle u_n^i | \Psi(t) \rangle &= \langle u_n^i | H | \Psi(t) \rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \langle u_n^i | \sum_{ni} C_n^i(t) | u_n^i \rangle &= \langle u_n^i | H | \sum_{ni} C_n^i(t) | u_n^i \rangle\end{aligned}$$

De plus, nous savons que :

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

Donc :

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_n^i(t) = E_n C_n^i(t)$$

En étant réel, car H est observable :

$$C_n^i(t) = C_n^i(t_0) \exp \left(\frac{-iE_n}{\hbar}(t - t_0) \right)$$

Si l'on connaît $|\Psi(t = t_0)\rangle$, on sera alors capable de prédire $|\Psi(t)\rangle$ à tout instant.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{ni} C_n^i(t_0) \exp \left(\frac{-iE_n}{\hbar}(t - t_0) \right) |u_n^i\rangle$$

Cas particulier : Si $|\Psi(t_0)\rangle$ est un état stationnaire : par définition, un état stationnaire est un état propre de H (où n est fixé).

Dans le cas où E_n est dégénérée :

$$\begin{aligned} |\Psi(t_0)\rangle &= \sum_i C_n^i(t_0) |u_n^i\rangle \\ |\Psi(t)\rangle &= \sum_i C_n^i(t_0) \exp\left(\frac{-iE_n}{\hbar}(t-t_0)\right) |u_n^i\rangle \\ |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-iE_n\frac{(t-t_0)}{\hbar}\right) \sum_i C_n^i(t_0) |u_n^i\rangle \\ |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-iE_n\frac{(t-t_0)}{\hbar}\right) |\Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Dans le cas où E_n n'est pas dégénérée :

$$\begin{aligned} |\Psi(t_0)\rangle &= |u_n\rangle \\ |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-i\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}\right) |u_n\rangle \end{aligned}$$

$|\Psi(t)\rangle$ et $|\Psi(t_0)\rangle$ décrivent le même état.

Complément : Opérateur d'évolution

L'opérateur d'évolution permet de passer de $|\Psi(t)\rangle$ à $|\Psi(t)\rangle$, on le note : $U(t; t_0)$. Par définition : $U(t; t_0) = I$ (1).

L'équation d'évolution de $U(t; t_0)$ est :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= U(t; t_0) |\Psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} U(t; t_0) |\Psi(t_0)\rangle &= HU(t; t_0) |\Psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} U(t; t_0) &= HU(t; t_0) \quad (2) \end{aligned}$$

Maintenant, si l'on combine les équations (1) et (2), on obtient $U(t; t_0)$ sous cette forme :

$$U(t; t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t' : t_0) dt'$$

Si $t = t_0$, alors $U(t_0; t_0) = I$

$$\frac{d}{dt} U(t; t_0) = -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t; t_0)$$

Si l'on prend le paramètre t_0 comme une variable, nous écrivons :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t; t_1) |\Psi(t_1)\rangle \\ |\Psi(t_1)\rangle &= U(t_1; t_2) |\Psi(t_2)\rangle \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t_1 : t_1) U(t_1; t_2) |\Psi(t_2)\rangle = U(t; t_1) |\Psi(t_2)\rangle \\ U(t; t_2) &= U(t; t_1) U(t_1; t_2) \end{aligned}$$

À noter que l'on peut généraliser la dernière équation :

$$U(t; t_n) = U(t; t_1)U(t_1; t_2) \dots U(t_{n-1}; t_n)$$

Si maintenant l'on prend $t_2 = t$, nous avons :

$$U(t; t) = U(t; t_1)U(t_1; t) = I$$

$$U(t; t_1)^{-1} = U(t_1; t)$$

Calcul de l'opération d'évolution infinitésimal :

$$\begin{aligned} d|\Psi(t)\rangle &= |\Psi(t+dt)\rangle - |\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)|\Psi(t)\rangle dt \\ |\Psi(t+dt)\rangle &= d|\Psi(t)\rangle + |\Psi(t)\rangle = U(t+dt, t)|\Psi(t)\rangle \\ U(t+dt)|\Psi(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar}|\Psi(t)\rangle + |\Psi(t)\rangle = \left(I\frac{-i}{\hbar}H(t)\right)|\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

D'où :

$$U(t+dt, t) = I\frac{-i}{\hbar}H(t)$$

H est hermitien : $H^\dagger = H$

$$U(t+dt, t)^\dagger = I\frac{i}{\hbar}H(t)$$

Si nous multiplions maintenant, au premier ordre :

$$U(t+dt, t)U(t+dt, t)^\dagger = I$$

$U(t+dt, t)$ est unitaire. Sachant qu'on peut subdiviser tout intervalle en une infinité d'intervalle infinitésimal $[t_1, t_1 + dt]$. Nous pouvons écrire :

$$U(t, t_0) = U(t+dt, t_0), U(t_0+dt_0, t_0+dt_0), \dots$$

Le produit de N opérateur unitaires est un opérateur unitaire, d'où $U(, t_0)$ est unitaire. C'est à dire que l'opérateur d'évolution conserve la norme.

Cas d'un système conservatif

H est explicitement indépendant du temps. Dans cette situation, on peut résoudre l'équation d'évolution de $U(t, t_0)$.

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}U(t, t_0) &= HU(t, t_0) \\ U(t, t_0) &= A \exp\left(\frac{-i}{\hbar}H(t-t_0)\right) = \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Si nous voulons connaître l'état d'un système à un instant t , connaissant l'état à l'instant t_0 , nous écrivons (dans le cas où H est indépendant du temps) :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right)|\Psi(t_0)\rangle \\ \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) &= U(t, t_0) \end{aligned}$$

Remarque : dans le complément B II page 167 du Cohen, la fonction d'opérateur : si $F(A)$ est une fonction quelconque de l'opérateur A , d'une manière générale, nous pouvons écrire :

$$F(A) = \sum f_n \frac{A^n}{n!}$$

À noter qu'il s'agit d'une série de Taylor. Par exemple :

$$\exp A = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} A^n}{n!}$$

Si maintenant, nous développons $|\Psi(t_0)\rangle$ sur la base des vecteurs propres de H .

$$\begin{aligned} |\Psi(t_0)\rangle &= \sum_{ni} C_n^i(t_0) |u_n^i\rangle \\ H |u_n^i\rangle &= E_n |u_n^i\rangle \forall i \\ \Psi(t_0) &= \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) |\Psi(t_0)\rangle = \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) \sum_{ni} C_n^i(t_0) |u_n^i\rangle \\ &= \sum_{ni} C_n^i(t_0) \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) |u_n^i\rangle \\ \exp\left(\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right) |u_n^i\rangle &= \sum \left(\frac{-i(t-t_0)}{\hbar}\right) \frac{H^k}{k!} |u_n^i\rangle = \sum \left(\frac{-i(t-t_0)}{\hbar}\right)^k \frac{E_n}{k} |u_n^i\rangle \\ &= \exp\left(\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right) |u_n^i\rangle = \sum_{ni} C_n^i(t_0) \exp\left(\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right) |u_n^i\rangle \end{aligned}$$

Et nous retrouvons la formule obtenue dans le paragraphe précédent !

Chapitre 3

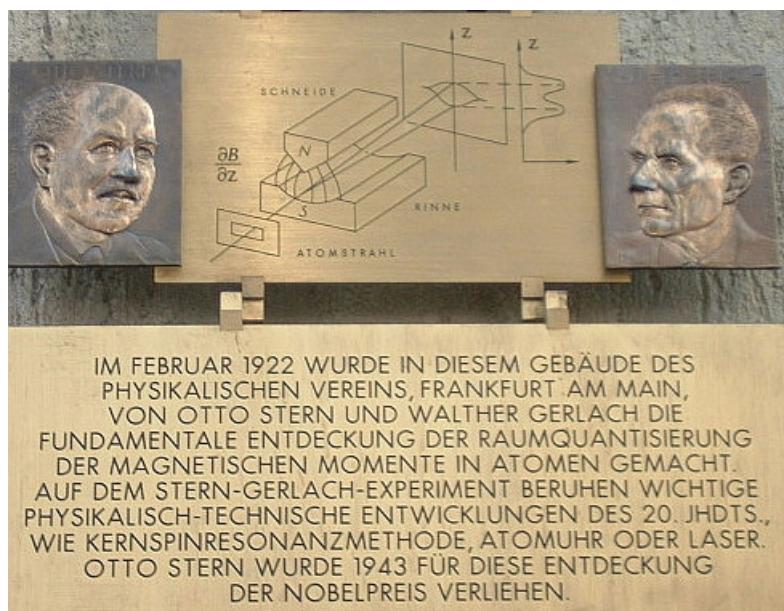
LE MAGNÉTISME ATOMIQUE

3.1 Introduction

Nous allons discuter sur l'expérience de Stern et Gerlach qui apporte la preuve de la quantification cinétique de l'atome.

L'expérience de Stern et Gerlach

Mise au point en février 1922 par Otto Stern (1888 - 1969) et Walther Gerlach (1889 - 1979), elle consiste à faire passer, dans un champ magnétique non uniforme de direction verticale, des atomes d'argent se trouvant dans leur état fondamental (ayant donc un moment cinétique nul et, également, leur moment magnétique orbital nul). Donc, du point de vue classique, le flux ne devrait pas être perturbé par le champ magnétique, or, cette expérience montra que le flux se coupa en deux. Cette expérience mis donc en évidence le spin de l'électron ($+1/2$ ou $-1/2$).



Plaque commémorative de la dite expérience avec les portraits de Otto Stern et Walther Gerlach. La plaque est située au siège de la Physikalische Verien à Francfort-sur-le-Main (Allemagne).

Source : hptts ://fr.wikipedia.org/wiki/Exp%C3%A9rience_de_Stern_et_Gerlach

Nous allons utiliser un calcul classique en se basant sur le modèle planétaire de l'atome (modèle de Bohr). Ce modèle permet de montrer que le calcul classique ne peut décrire le

phénomène de magnétisme quantique.

3.2 Magnétisme classique

La source revient à Ampère¹ en 1811. Pour lui, la brique fondamentale du magnétisme est une boucle de courant ampérien. On utilise le modèle planétaire constitué d'un noyau et d'un seul électron en mouvement circulaire (dans la couche s). Soit un électron de masse m et de charge $-e^2$ ($e \approx 1.602 \times 10^{-19}$ C) autour d'un noyau fixé. Le système est rigide, le mouvement de l'électron résulte de deux forces opposées, centrifuges et électrostatique. Le moment est une constante (mouvement plan). Le mouvement est circulaire de rayon R ; la fréquence de mouvement de l'électron est de 10^{16} Hertz soit 10 PHz (Péta-Hertz). L'application du champ \vec{B} en résulte une force \vec{F} (force de Lorentz) :

$$\vec{F} = e \vec{v} \wedge \vec{B}$$

En deux points, diamétralement opposés, l'électron se trouve soumis à deux forces opposées. Le mouvement interne étant supposé rigide, l'application du champ \vec{B} provoque l'apparition d'un couple qui tend à faire orienter le plan de l'atome de façon à le rendre perpendiculaire à \vec{B} . On rappelle que :

$$\frac{F_l}{F_{el}} \ll 1$$

Le champ \vec{B} provoque une perturbation mineure du système atomique. De ce fait, une grandeur qui était une constante du mouvement (moment cinétique) ne l'est plus. Cependant, comme la perturbation est très faible, sa variation sera très lente. On dit que le moment cinétique \vec{J} va varier dans le temps à cause du champ \vec{B} , c'est la précession de Larmor³.

Mais d'abord, jetons un œil à la géométrie utilisée pour le calcul du moment magnétique. Regardons le passage des coordonnées cartésiennes aux coordonnées cylindriques.

À noter, pour la suite, que : \vec{R} est sur l'axe y et \vec{v} correspond à \vec{U}_φ sur le schéma.

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \begin{Bmatrix} R \cos\varphi \\ R \sin\varphi \\ 0 \end{Bmatrix} ; \quad \vec{v} = \begin{Bmatrix} v \cos(\varphi + \pi/2) \\ v \sin(\varphi + \pi/2) \\ 0 \end{Bmatrix} \\ \vec{F}_l &= \begin{Bmatrix} e v B \cos\varphi \cos\theta \\ e v B \cos\varphi \sin\theta \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} e R \omega B \cos\varphi \cos\theta \\ e R \omega B \cos\varphi \sin\theta \\ -e R \omega B \cos\varphi \sin\theta \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

Le moment vaut donc :

1. André-Marie Ampère (1755 - 1836) est un mathématicien, physicien, chimiste et philosophe français. Son nom a été donné à l'unité du Système International pour l'intensité du courant électrique : l'Ampère (symbole A).

2. C'est la charge élémentaire de l'électron, où e ayant pour valeur : $e = 1.602 \times 10^{-19}$ C (C pour Coulomb). Le proton et l'antiparticule de l'électron, le positron, ont tous les deux la valeur $+e$. *Pour les curieux, la valeur exacte, fixée au 20 mai 2019 est : $e = 1.602\ 176\ 364 \times 10^{-19}$ Coulomb.*

3. Nommée d'après le physicien, mathématicien et homme politique irlandais Joseph Larmor (1857 - 1942). À ne pas confondre avec l'Armor (qui désigne en breton le littoral) et aucun rapport avec Larmor-Plages (56, Morbihan).

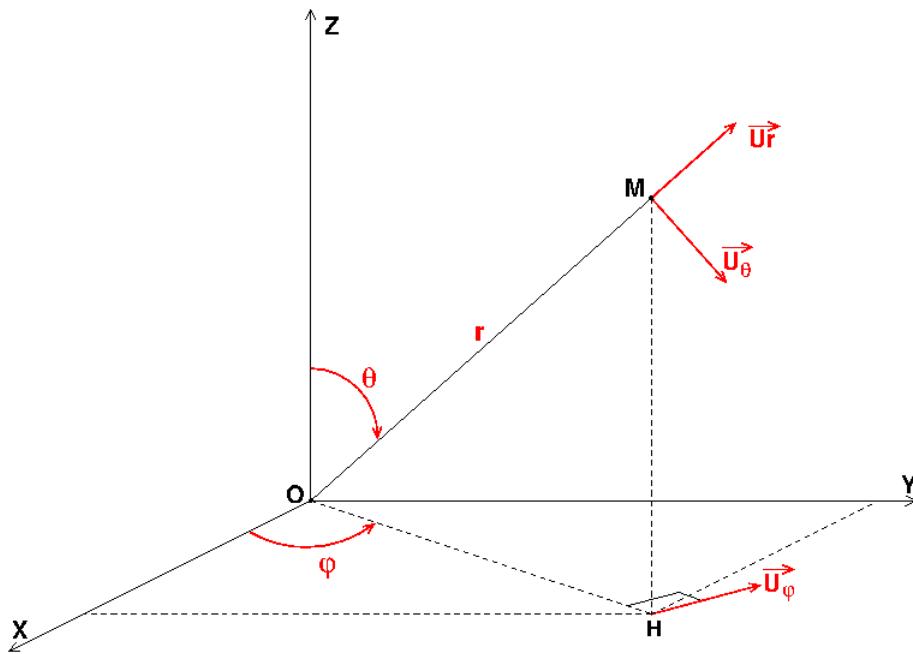


FIGURE 3.1 – Passage des coordonnées cartésiennes aux coordonnées cylindriques.

$$\vec{M} = \vec{R} \wedge \vec{F} = \begin{Bmatrix} -e R^2 B \cos\varphi \sin\varphi \sin\theta \\ e R^2 \cos^2\varphi \sin\theta \\ 0 \end{Bmatrix}$$

En moyenne dans le temps sur le mouvement rapide, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \cos\varphi \sin\varphi d\varphi &= 0 \\ \cos^2\varphi &= \frac{1 + \cos 2\varphi}{2} \\ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e R \omega^2 \cos^2\varphi \sin\theta d\varphi &= \frac{1}{2} e R^2 \omega B \sin\theta \\ \vec{M} &= \{0 \quad \frac{1}{2} e R^2 \omega B \sin\theta \quad 0\} \end{aligned}$$

$\vec{M} \perp \vec{B}$ et $\vec{M} \perp \vec{n}$ et le triède $(\vec{n}, \vec{M}, \vec{B})$ est discret. On introduit $J = mvR = mR^2\omega$, et il est orienté selon Oz. Alors : $\vec{M} = \frac{e}{2m} \vec{J} \wedge \vec{B}$. Plus généralement, pour une particule en mouvement circulaire de charge Q et masse m soumise à un champ \vec{B} sur $\vec{M} = \frac{Q}{2m} \vec{J} \wedge \vec{B}$. Par identification avec $\vec{M} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}$ nous en déduisons que $\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{J} = \gamma \vec{J}$ où γ est le facteur gyromagnétique.

γ le facteur gyromagnétique, aussi appelé rapport gyromagnétique

Il s'agit d'un rapport entre le moment magnétique et le moment cinétique d'une particule. Son unité dans le Système International est le Coulomb par Kilogramme ($C \cdot kg^{-1}$) mais en pratique, il est souvent exprimé en Méghahertz par tesla ($MHz \cdot T^{-1}$), car il est plus commun d'avoir : $\frac{\gamma}{2\pi}$.

Source : https://fr.wikipedia.org/wiki/Rapport_gyromagnétique

Dans notre cas $\gamma < 0$ car $e < 0$. Donc $\vec{\mu}$ le moment magnétique et \vec{J} le moment cinétique sont de sens opposés. Comme $J \approx \hbar$; il est usuel d'avoir l'unité naturelle du moment magnétique :

$$B = \frac{e\hbar}{2m}$$

C'est le magnétisme de Bohr. Ce couple tend à aligner le moment dans la direction du champ magnétique. Quand le système (atome + champ) est isolé, son énergie est constante, et donc θ est constant aussi : c'est pourquoi \vec{J} et $\vec{\mu}$ précessent autour de \vec{B} . Si maintenant, on applique un couple pour changer l'angle θ à $\theta + d\theta$, le travail reçu ou cédé par le système sera :

$$dW = B \sin\theta \, d\theta$$

$$dW > 0 \quad d\theta > 0$$

$$dW < 0 \quad d\theta < 0$$

La variation correspondante de l'énergie du système est égale à :

$$\begin{aligned} dW &= dE = |\mu|B \sin\theta \, d\theta \\ dE &= -d(\vec{\mu} \wedge \vec{B}) \\ E &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} + \text{cst} \end{aligned}$$

L'expression de l'énergie montre que la position d'équilibre stable correspond à l'angle $\theta = 0$. E est très bas. Du point de vue macroscopique, le moment magnétique d'un circuit de surface S est parcouru par un courant I est donnée par l'expression : IS . Pour la boucle atomique : $I = \frac{dq}{dt} = e\nu$ et $S = \pi R^2$. Donc : $IS = e\nu\pi R^2 = \frac{e}{2}2\pi\nu R^2\omega = \frac{e}{2m}mR^2\omega = \frac{e}{2m}\vec{J} = \vec{\mu}$. Les deux définitions sont identiques ! **Remarque** : nous retiendrons que la forme du couplage entre un moment magnétique $\vec{\mu}$ et un champ magnétique \vec{B} est donné par : $V_{moy} = -\mu B$.

3.3 La précession de Larmor

On décrit dans cette partie la dynamique du système (atome + champ magnétique). En présence du champ magnétique \vec{B} et d'après le théorème du moment cinétique.

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\mu} \wedge \vec{B} = \frac{e}{2m} \vec{J} \wedge \vec{B}$$

Si $B = 0$ ou $\frac{d\vec{J}}{dt} = 0$, alors \vec{J} est une constante du mouvement. Cette équation décrit un mouvement gyroscopique. Le vecteur \vec{J} , constante en norme, fait un angle constant avec la direction du champ magnétique et tourne autour de cette dernière. Un tel mouvement s'appelle précession. Le vecteur \vec{J} tourne à la pulsation ω_L appelée pulsation de Larmor !

$$\omega_L = |\gamma|B = \frac{|e|}{2m}B = \hbar^{-1}|\mu_B|B$$

Si nous écrivons :

$$\vec{J} \cdot \frac{dJ}{dt} = \vec{J} \cdot \gamma \vec{J} \wedge \vec{B} = 0 = \frac{1}{2} \frac{d}{dt}(J^2)$$

$\|J^2\| = \text{constante}$. Par contre, nous savons que : $\frac{d\vec{J}}{dt} \perp B$. D'où $J_z \| B$ est constant. ($B = (0, 0, B_z)$).

$$\begin{aligned} J^2(t) &= J^2(t=0) \text{ et } J_z(t) = J_z(t=0) \\ \text{D'où } J_x^2(t) + J_y^2(t) &= J^2(t=0) - J_x^2(t=0) \end{aligned}$$

$\vec{J}(t)$ tourne autour de \vec{B} et fait un angle $x.\theta$ avec B . ($\vec{\mu}$ fait un angle θ avec \vec{B}) et $\cos\theta = \frac{J_z(t=0)}{|J|(t=0)}$. Le calcul des composantes $J_x(t)$ et $J_y(t)$: $\frac{dJ_x}{dt} = \gamma BJ_y$ et $\frac{dJ_y}{dt} = -\gamma BJ_x$. En introduisant : $J_+(t) = J_x + iJ_y$ et $J_-(t) = J_x - iJ_y$, nous avons donc :

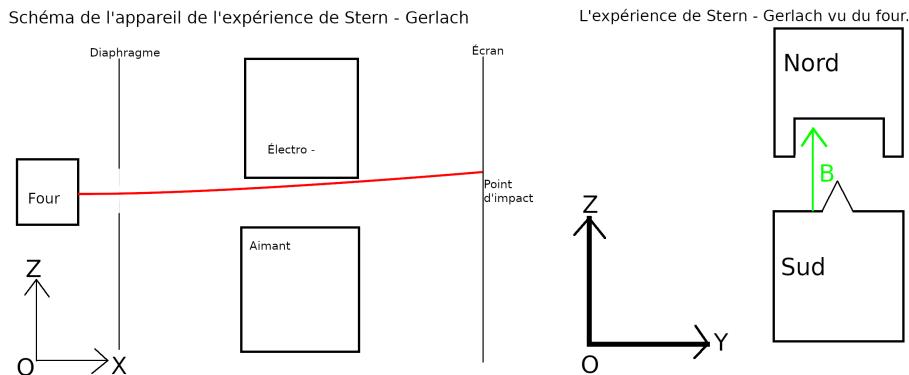
$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}J_+(t) &= i\omega_L J_+(t) \text{ avec } J_+(t) = J_+(t=0) \exp(-i\omega_L t) \\ \frac{d}{dt}J_-(t) &= i\omega_L J_-(t) \text{ avec } J_-(t) = J_-(t=0) \exp(-i\omega_L t)\end{aligned}$$

À noter que : $J_+(0) = J_-(0)$.

3.4 Quantification du moment cinétique

3.4.1 Description de l'appareil

L'expérience de Stern et Gerlach a permis de mettre en évidence la quantification du moment cinétique. Son principe repose sur l'étude de la déviation d'un atome paramagnétique sous l'effet d'un champ magnétique homogène.



B_z est positif : $\frac{\partial B}{\partial z} < 0$ Le plan Oxz est un plan de symétrie. $B_x = 0$; $\frac{\partial B_y}{\partial y} \neq 0$; $\operatorname{div} \vec{B} = 0$.

Mais comment fonctionne cette expérience ?

Les atomes d'argent sont issus d'un four, puis un diaphragme sélectionne les atomes dont la vitesse est parallèle à Ox. Ensuite, les atomes traversent une zone où règne un champ magnétique homogène. Le champ magnétique B a les caractéristiques suivantes :

- sa plus grande composante est selon l'axe z ;
- il est le même en tout point d'un parallèle à l'axe x.

3.4.2 Calcul classique de la déviation

Les atomes d'argent sont neutres et à l'état fondamental. Ils possèdent un moment magnétique permanent $\vec{\mu}$. Dans la zone où règne le champ magnétique, les atomes d'argent se trouvent soumis à une force :

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}W \quad ; \quad W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Remarque : pour un atome, il y a deux origines de l'existence d'un moment magnétique $\vec{\mu}$:

- le moment des électrons autour du noyau qui donnent lieu au moment cinétique orbital ;
- le moment cinétique intrinsèque, appelé le spin.

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J} \quad ; \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad ; \quad \vec{\mu} = \gamma (\vec{L} + \vec{S})$$

Avec \vec{L} le moment cinétique orbital et \vec{S} le spin.

À l'entrée de la zone où règne le champ magnétique, les moments cinétiques des atomes d'argent sont orientés de manières aléatoire (θ varie de 0 à π). On étudie l'effet du champ magnétique sur le cas d'un atome dont le moment magnétique a une orientation quelconque. On sait que :

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}}W = -\overrightarrow{\text{grad}}\mu \vec{B}$$

$$\langle \mu_x \rangle = \langle \mu_y \rangle = 0$$

Rappel : $\mu_x \propto \cos(\omega t + \varphi)$ et $\mu_y \propto \sin(\omega t + \varphi)$

\vec{F} a une seule composante selon Oz : $F_z = \mu_z \overrightarrow{\text{grad}}B_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{k}$

B_z est indépendante de x et y. La force exercée sur les atomes d'argent est proportionnel à μ_z . Comme cette force est responsable de la déviation des atomes d'argent, mesurer la déviation revient à mesurer μ_z . Comme $\vec{\mu}$ peut être orienté de manière aléatoire, μ_z peut prendre toutes les valeurs entre $-|\mu|$ et $+|\mu|$, aussi on s'attend à ce que les atomes d'argent se répartissent de manière continue sur l'écran et former une tâche longitudinale selon Oz et symétrique au centre.

3.4.3 Résultat et conclusion

- Les résultats de l'expérience de Stern et Gerlach contredisent les prévisions de la physique classique.
- Ces résultats montrent deux tâches distinctes symétriques au centre de l'écran.

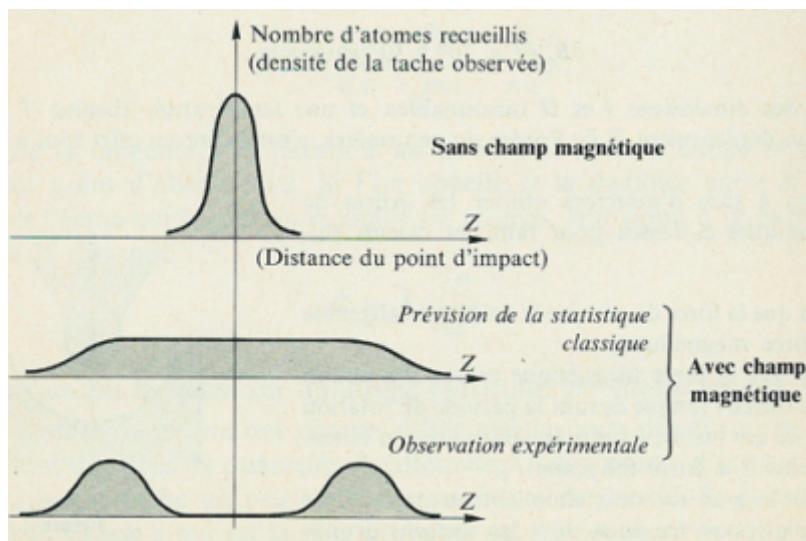


FIGURE 3.2 – Les différents résultats théoriques et expérimental de l'expérience de Stern et Gerlach.

Pour interpréter ces résultats, on distingue entre les degrés de liberté internes (le moment magnétique et son interaction avec le champ...) qu'on doit traiter quantiquement et les degrés de liberté externe (position et impulsions de l'atome dans l'espace) qu'on peut traiter classiquement (*passage vu en TD*).

Les conclusions de l'expérience de Stern et Gerlach nous conduisent à conclure que la projection du moment cinétique selon Oz possède deux valeurs uniquement. Ces valeurs sont distinctes. Le schéma classique est donc erroné !

- μ_z ne peut prendre que 2 valeurs, idem pour J_z .
- μ_z et J_z sont deux grandeurs quantiques.
- Pour le moment, on admet que les valeurs de J_z sont $\pm \frac{h}{2}$ et que le moment cinétique de l'atome d'argent correspond au moment cinétique du spin.

3.4.4 Description théorique

Nous savons déjà (postulat 2) que toute grandeur physique mesurable lui correspond une observable. Cette observable n'est pas forcément un ensemble complet d'observables qui commutent. Ainsi, on associe l'opérateur vectoriel $\vec{S}(S_x, S_y, S_z)$ au spin de l'atome \mathfrak{S} ⁴. S_x , S_y et S_z sont des observables et aussi des ensembles complets d'observables qui commutent.

3.4.5 L'observable S_z et l'espace des états du spin

S_z est l'observable associée à la composante selon Oz du spin atomique \mathfrak{S}_z . Les résultats de Stern et Gerlach montrent que les valeurs propres de S_z sont $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. Nous admettons que ces valeurs propres ne sont pas dégénérées, d'où :

$$\begin{aligned} +\frac{\hbar}{2} &\longrightarrow |z+\rangle = |+\rangle \\ -\frac{\hbar}{2} &\longrightarrow |z-\rangle = |-\rangle \end{aligned}$$

$$S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \text{ et } S_z |-\rangle = \frac{-\hbar}{2} |-\rangle$$

$\{|+\rangle, |-\rangle\}$ forment une base de l'espace des états du spin.

$$\langle +|+ \rangle = \langle -|- \rangle = 1 \text{ et } \langle -|+ \rangle = 0$$

Ainsi, tout état de l'espace des états du spin est décrit comme une superposition de ces deux états.

Soit $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}_s$; $|\Psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$; $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Dans la base $\{|+\rangle; |-\rangle\}$:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

où σ_z est une matrice de Pauli.

3.4.6 Les autres composantes S_x et S_y

S_x est l'observable associée à \mathfrak{S}_x ;

S_y est l'observable associée à \mathfrak{S}_y .

On a :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{Bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{Bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

σ_x et σ_y sont deux autres matrices de Pauli. On peut considérer une composante de \vec{S} selon le sens \vec{u} décrit par (θ et φ).

4. Oui, c'est un S !

$$\vec{u} = \begin{Bmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{Bmatrix}$$

$$S_u = \vec{S} \cdot \vec{u} = \sin\theta \cos\varphi + S_x + \sin\theta \sin\varphi S_y + \cos\theta S_z$$

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \cos\varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \sin\theta \sin\varphi \\ i \sin\theta \sin\varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 \\ 0 & -\cos\theta \end{pmatrix} \right]$$

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Exercice d'application pour la maison :

- chercher les valeurs propres de S_x, S_y, S_z ;
- trouver les vecteurs propres dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$;
- donner chaque matrice dans la base des vecteurs propres.

3.4.7 Évolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme

A : Hamiltonien d'intersection et équation de Schrödinger

Considérons une particule d'un spin $\frac{1}{2}$ plongée dans un champ magnétique uniforme $B_0 \vec{k}$ (selon Oz). Le potentiel d'interaction du moment magnétique avec le champ B est W :

$$W = -\mu B = -\mu_B B_0 = -\gamma S_z B_0$$

Soit $\omega_0 = -\gamma B_0$ ($\gamma < 0$; $\omega_0 > 0$)

$$H = \omega_0 S_z = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_z$$

H ne dépend pas du temps, d'où l'équation de Schrödinger se résume à l'équation aux valeurs propres. On sait que $[H, S_z] = 0$. H et S_z ont les mêmes vecteurs propres.

$$\begin{aligned} H_0 |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} \omega_0 |+\rangle \\ H_0 |-\rangle &= \frac{-\hbar}{2} \omega_0 |-\rangle \end{aligned}$$

S_z est une constante du mouvement : $\frac{d}{dt} \langle S_z \rangle = 0$ et $\langle S_z \rangle = \text{constante}$. Ce n'est pas le cas pour S_x et S_y . Vérifions $[S_x, S_z][S_y, S_z]$ et $[S_x, S_y]$.

Rappel : le choix de l'orientation de B est arbitraire, on peut choisir B selon Ox, Oy ou selon la direction d'un vecteur \vec{u} quelconque. Dans toute les situations H possède deux valeurs propres.

$$\begin{aligned} E_+ &= \frac{\hbar}{2} \omega_0 \\ E_- &= -\frac{\hbar}{2} \omega_0 \end{aligned}$$

Les vecteurs propres dépendent de l'orientation de \vec{B} .

B : Précession de Larmor

Considérons une particule de spin $\frac{1}{2}$ plongée dans un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B_0 \vec{k}$.

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \omega_0 S_z$$

Les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont des vecteurs propres associés aux valeurs propres $+\frac{\hbar}{2}\omega_0$ et $-\frac{\hbar}{2}\omega_0$ respectivement.

Considérons une particule dans l'état $|\Psi(0)\rangle = |U_+\rangle$ où $|U_+\rangle$ est un vecteur propre de S_u associé à $\frac{\hbar}{2}$, idem pour $|U_-\rangle$ mais avec $-\frac{\hbar}{2}$.

$$\begin{aligned} |U_+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} \exp \left(-i \frac{\varphi}{2}\right) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp \left(i \frac{\theta}{2}\right) |-\rangle \\ |U_-\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} \exp \left(-i \frac{\varphi}{2}\right) |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} \exp \left(i \frac{\theta}{2}\right) |-\rangle \end{aligned}$$

À $t = 0$: $|\Psi(t)\rangle = |U_+\rangle$;

À t : $|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp \left(-i \frac{\theta}{2}\right) \exp \left(-i \frac{E_+ t}{\hbar}\right) |U_+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp \left(+i \frac{\varphi}{2}\right) \exp \left(-i \frac{E_- t}{\hbar}\right) |-\rangle$;

Donc : $|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp \left(+i \frac{\varphi + \omega_0 t}{2}\right) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp \left(+i \frac{\varphi + \omega_0 t}{2}\right) |-\rangle$

En comparant $|\Psi(t=0)\rangle$ et $|\Psi(t)\rangle$, nous remarquons que l'orientation du vecteur \vec{u} garde le même écart angulaire avec l'axe Oz. Cependant l'angle φ varie à la pulsation $\omega_0 = |\gamma|B_0$. Cette variation montre que le vecteur \vec{u} et donc l'état $|U_+\rangle$ de S_z précessent autour de Oz (champ magnétique). On retrouve le mouvement prédict par la mécanique classique. Bien évidemment, S_z est une constante du mouvement.

$$\langle \Psi(t) | S_z | \Psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle \Psi(0) | S_z | \Psi(0) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}$$

S_x et S_y ne sont pas des constantes de mouvement. Calcul des valeurs moyennes de $\langle S_x \rangle(t)$ et $\langle S_y \rangle(t)$.

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | S_x | \Psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos(\varphi + \omega_0 t) \\ \langle \Psi(t) | S_y | \Psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t) \end{aligned}$$

Les valeurs propres $\langle S_x \rangle(t)$ et $\langle S_y \rangle(t)$ se comportent comme le prédit la théorie classique, elles précessent autour de l'axe du champ \vec{B} à la pulsation $\omega_0 = |\omega|B_0$.

Chapitre 4

OUTILS MATHÉMATIQUES 2

4.1 Introduction de bases n'appartenant pas à \mathfrak{F}

4.1.1 Onde plane

Une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ (d'impulsion \vec{p}) est décrite par la fonction :

$$V_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right)$$

On remarque que $V_p(x)$ est une fonction qui n'est pas de carré sommable et donc n'appartient pas à \mathfrak{F} .

$\{V_p(x)\}$ est une base continue de fonctions d'ondes planes ; p variant de $-\infty$ à $+\infty$ de manière continue : $\vec{p} \in]-\infty; +\infty[$.

4.1.2 Rappel sur la transformée de Fourier

Soit $\Psi(x)$ est une fonction d'onde, sa transformée de Fourier $\bar{\Psi}(p)$ est définie par :

$$\bar{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(x) \Psi(x) dx$$

la formule inverse :

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} V_p(x) \bar{\Psi}(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \bar{\Psi}(p) dp$$

La dernière relation exprime que toute fonction d'onde $\Psi(t)$ est développable d'une seule manière sur les fonctions $V_p(x)$; l'indice p varie de façon continue.

$\bar{\Psi}(p)$, la transformée de $\Psi(x)$, est la composante de $\Psi(x)$ sur l'onde plane $V_p(x)$. $\bar{\Psi}(p)$ est donnée par le produit scalaire de $\Psi(x)$ sur l'onde plane $V_p(x)$. Dans le cas des bases continue, on remplace la somme par l'intégration sur dp .

4.1.3 La base $\{v_p(x)\}$ vérifie la relation de fermeture

Soit $\delta(x - x_0)$ est la fonction de Dirac.

$$\begin{aligned} \delta(x - x_0) &= 0 \text{ si } x \neq x_0 \\ \delta(x - x_0) &= \infty \text{ si } x = x_0 \end{aligned}$$

Soit $\delta_{x_0}(p)$ est la transformée de Fourier de $\delta(x - x_0)$.

$$\delta_{x_0}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(x) \delta(x - x_0) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) \delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-i\frac{px_0}{\hbar}\right)$$

La formule inverse :

$$\begin{aligned} \delta(x - x_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^2} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{px_0}{\hbar}\right) dp \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i(x - x_0)p) dp \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(x_0) V_p(x) dp \end{aligned}$$

Cette relation constitue la relation de fermeture dans la base $\{V_p(x)\}$.

Calcul du produit scalaire $(V_p(x), V_{p'}(x))$.

$$\begin{aligned} (V_p(x), V_{p'}(x)) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i\frac{(p' - p)x}{\hbar}\right) dx = \delta(p - p') \\ \delta(p - p') &= 0 \text{ si } p \neq p' \\ &= \infty \text{ si } p = p' \end{aligned}$$

Dans un abus de langage, on désigne cette relation comme une relation d'orthonormalisation. On dit aussi que les fonctions $V_p(x)$ sont orthonormées au sens du Dirac.

4.1.4 La généralisation aux fonctions à trois dimensions

$$\begin{aligned} V_p(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right) \\ \Psi(\vec{x}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \bar{\Psi}(p) V_p(\vec{x}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p V_p^*(\vec{x}) V_p(\vec{x}) \\ &= \delta(\vec{x} - \vec{x}') \\ \bar{\Psi}(p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) d^3x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x V_p^*(\vec{x}) V_{p'}(\vec{x}) \\ &= \delta(\vec{p} - \vec{p}') \end{aligned}$$

La correspondance entre la base discrète et la base continue :

$$i \longleftrightarrow p ; \sum_i \longleftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \text{ et } \delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(p - p')$$

4.2 La fonction delta

4.2.1 Introduction

Considérons la fonction $\delta^\varepsilon(x)$ donnée par le schéma :

$$\begin{aligned}\delta^\varepsilon(x) &= \frac{1}{\varepsilon} \text{ si } -\frac{\varepsilon}{2} \leq x \leq \frac{\varepsilon}{2} \\ \delta^\varepsilon(x) &= 0 \text{ si } |x| > \frac{\varepsilon}{2} \\ \varepsilon &\text{ est positif.}\end{aligned}$$

Calculons l'intégrale : $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^\varepsilon f(x)$

$f(x)$ est une fonction bien définie au point $x = 0$. Si ε est suffisamment petit, la variation de $f(x)$ dans l'intervalle $[-\frac{\varepsilon}{2}; \frac{\varepsilon}{2}]$ est négligeable et $f(x) = f(0)$.

Ainsi : $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^\varepsilon(x) f(x) dx = \int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{+\frac{\varepsilon}{2}} \delta^\varepsilon(x) f(x) dx = f(0) \int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{+\frac{\varepsilon}{2}} \delta^\varepsilon(x) dx = f(0)$

L'approximation est d'autant meilleur que ε est petit. Nous pouvons, donc, à la limite $\varepsilon = 0$, définir la fonction $\delta(x)$ (delta) par la relation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0)$$

Cette relation est valable pour toute fonction définie à l'origine. De façon générale, la fonction $\delta(x - x_0)$ est définie, telle que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$$

4.2.2 Propriété de la fonction delta

- $\delta(-x) = \delta(x)$
- $\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$
- $x\delta(x) = 0 / x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y)\delta(x - z) dx = \delta(y - z)$

Considérons un ensemble de fonction de \vec{r}' $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{x}')\}$ repérées par l'indice continue $\vec{r}_0(x_0, y_0, z_0)$ et définie par :

$$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') = \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0)$$

$\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{x}')\}$ représente l'ensemble des fonctions delta centrées aux différentes positions \vec{r}_0 de l'espace (\vec{r}_0 est une variable continue); $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{x}')$ évidemment n'est pas de carré sommable et donc n'appartient pas à \mathfrak{F} .

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\delta(x)|^2 &= \delta(0) \longrightarrow \text{de hauteur } \frac{1}{\varepsilon} \text{ et } \varepsilon \longrightarrow 0 \\ &= \infty\end{aligned}$$

Considérons les égalités suivantes :

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \Psi(\vec{r}_0) d^3 \vec{r}_0 \\ \Psi(\vec{r}_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \Psi(\vec{r}') d^3 \vec{r}'\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') \Psi(\vec{r}_0) d^3 \vec{r}_0 \\ \Psi(\vec{r}_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d^3 \vec{r}' \\ &= (\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}'); \Psi(\vec{r}'))\end{aligned}$$

Les deux dernières relations expriment que toute fonction $\Psi(\vec{r}') \in \mathfrak{F}$ est développable de façon unique sur les fonctions $\xi_{\vec{r}_0}$ (\vec{r}_0 est une variable continue). $\Psi(\vec{r}_0)$ est la composante de $\Psi(\vec{r}')$ sur la fonction $\xi_{\vec{r}_0}$.

Relation de fermeture :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}') \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') d^3 \vec{r}_0 = \delta(\vec{r}' - \vec{r}')$$

Relation d'orthogonalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}') \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') d^3 \vec{r}_0 = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0')$$

Orthogonalisation au sens de Dirac. La correspondance entre la base discrète et la base continue :

$$i \longleftrightarrow \vec{r}_0 ; \sum_i \longleftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r}_0 \text{ et } \delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0')$$

4.3 Deux exemples importants de représentations et d'observables

4.3.1 Les représentations $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$

A : Définition

On associe par définition la fonction :

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

A tout ket correspond naturellement un bra. On admet $\langle \vec{r}_0 |$ et $\langle \vec{p}_0 |$.

B : Relation d'orthogonalisation et de fermeture

Soit $\langle \vec{r}_0 | \vec{r}_0' \rangle$ un produit scalaire.

$$\begin{aligned}\langle \vec{r}_0 | \vec{r}_0' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}') \xi_{\vec{r}_0'}(\vec{r}') d^3 \vec{r}' = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0') \\ \langle \vec{p}_0 | \vec{p}_0' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\vec{p}_0}^*(\vec{p}') V_{\vec{p}_0'}(\vec{p}') d^3 \vec{p}' = \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_0')\end{aligned}$$

Nous avons aussi les relations fondamentales :

$$\begin{aligned}\langle \vec{r}_0 | \vec{r}_0' \rangle &= \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0') ; \langle \vec{p}_0 | \vec{p}_0' \rangle = \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_0') \\ I &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r}_0 | \vec{r}_0 \rangle \langle \vec{r}_0 | \text{ et } I = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{p}_0 | \vec{p}_0 \rangle \langle \vec{p}_0 |\end{aligned}$$

C : Composante d'un ket $|\Psi\rangle$

En représentation $\{|\vec{r}'\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = I |\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0 | \Psi \rangle d^3 \vec{r}_0 \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\vec{r}_0) |\vec{r}_0\rangle d^3 \vec{r}_0$$

et $\Psi(\vec{r}_0) = \langle \vec{r}_0 | \Psi \rangle$

En représentation $\{|p\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = I |\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{p}_0\rangle \langle \vec{p}_0 | \Psi \rangle d^3 \vec{p}_0 \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\vec{p}_0) |\vec{p}_0\rangle d^3 \vec{p}_0$$

et $\Psi(\vec{p}_0) = \langle \vec{p}_0 | \Psi \rangle$

Aussi :

$$\langle \vec{r}_0 | \Psi \rangle = \langle \vec{r}_0 | I | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r}' \langle \vec{r}_0 | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \Psi \rangle \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r}' \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \Psi(\vec{r}') \\ = \Psi(\vec{r}_0)$$

D'où $\Psi(\vec{r}_0)$ est la composante de $|\Psi(\vec{r})\rangle$ sur le ket $|\vec{r}_0\rangle$ qui est un vecteur de la base $\{|\vec{r}'\rangle\}$.

De même :

$$\langle \vec{p}_0 | \Psi \rangle = \langle \vec{p}_0 | I | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{p}' \langle \vec{p}_0 | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \Psi \rangle \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{p}' \delta(\vec{p}' - \vec{p}_0) \Psi(\vec{p}') \\ = \Psi(\vec{p}_0)$$

Si nous prenons maintenant $|\Psi\rangle = |\vec{p}_0\rangle$ une particule dont l'impulsion est \vec{p}_0 et définie avec précision.

$$\langle \vec{r}_0 | \Psi \rangle = \langle \vec{r}_0 | \vec{p}_0 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\vec{p}_0 \cdot \vec{r}_0}{\hbar}\right)$$

C'est la fonction d'une onde plane dont l'étendue est infinie, d'où Δx , Δy et Δz sont infinis. Pour alléger l'écriture, on omet l'écriture de l'indice « 0 » et on note $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$ comme étant les représentations position et impulsion. On rappelle que \vec{r} a trois composantes x, y, z de même que \vec{p} : px, py, pz . Ainsi : $|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle$ et $|\vec{p}\rangle = |px, py, pz\rangle$. Chaque ket est un produit tensoriel de trois kets !

$$|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle = |x\rangle |y\rangle |z\rangle \\ |\vec{p}\rangle = |px\rangle \otimes |py\rangle \otimes |pz\rangle = |px\rangle |py\rangle |pz\rangle$$

Chaque ket : $|\vec{r}\rangle$ et $|\vec{p}\rangle$ est un produit de trois variables continues.

D : Produit scalaire de deux kets

Soit $|\Psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ deux kets de l'espace des états. On peut calculer le produit scalaire dans chacune des représentations.

En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \Psi \rangle &= \langle \varphi | I | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3 \vec{r}\end{aligned}$$

En représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \Psi \rangle &= \langle \varphi | I | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle d^3 \vec{p} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(\vec{p}) \Psi(\vec{p}) d^3 \vec{p}\end{aligned}$$

E : Passage d'une représentation à l'autre

Considérons $|\Psi\rangle$ un ket de l'espace des états.

Dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, on écrit : $\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \Psi(\vec{r})$.

Dans la représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, on écrit : $\langle \vec{p} | \Psi \rangle = \Psi(\vec{p})$.

Le passage d'une représentation à l'autre est facile à réaliser en utilisant la relation de fermeture :

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} | \Psi \rangle &= \Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | I | \Psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle d^3 \vec{p} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \bar{\Psi}(\vec{p}) d^3 \vec{p}\end{aligned}$$

Inversement :

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} | \Psi \rangle &= \langle \vec{p} | I | \Psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \bar{\Psi}(\vec{r}) d^3 \vec{r}\end{aligned}$$

Considérons maintenant un opérateur A . Dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, cet opérateur est donnée par l'expression : $\langle \vec{r}' | A | \vec{r} \rangle$. Dans la représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, ce même opérateur est donnée par l'expression : $\langle \vec{p}' | A | \vec{p} \rangle$.

Passage d'une représentation à l'autre :

$$\begin{aligned}\langle \vec{r}' | A | \vec{r} \rangle &= \langle \vec{r}' | I A I | \vec{r} \rangle \\ &= \int \int \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | A | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle d^3 \vec{p}' d^3 \vec{p} \\ &= \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \langle \vec{p} | A | \vec{p}' \rangle \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\vec{p}' \cdot \vec{p}'}{\hbar}\right) d^3 \vec{p} d^3 \vec{p}' \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r} - \vec{p}' \cdot \vec{r}'}{\hbar}\right) \langle \vec{p} | A | \vec{p}' \rangle d^3 \vec{p} d^3 \vec{p}'\end{aligned}$$

4.4 Les opérateurs R et P

4.4.1 Définition

On définit l'opérateur \vec{R} par ses composantes X , Y et Z . Son action en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ est définie comme suit :

$$\langle \vec{r} | X | \Psi \rangle = x \langle \vec{r} | \Psi \rangle = x\Psi(\vec{r}) = x\Psi(x, y, z)$$

$$\langle \vec{r} | Y | \Psi \rangle = y \langle \vec{r} | \Psi \rangle = y\Psi(\vec{r}) = y\Psi(x, y, z)$$

$$\langle \vec{r} | Z | \Psi \rangle = z \langle \vec{r} | \Psi \rangle = z\Psi(\vec{r}) = z\Psi(x, y, z)$$

De même, on définit l'opérateur \vec{P} par ses composantes P_x , P_y , P_z . Son action en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$ est définie comme suit :

$$\langle \vec{p} | P_x | \Psi \rangle = P_x \langle \vec{p} | \Psi \rangle = P_x \bar{\Psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_y | \Psi \rangle = P_y \langle \vec{p} | \Psi \rangle = P_y \bar{\Psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_z | \Psi \rangle = P_z \langle \vec{p} | \Psi \rangle = P_z \bar{\Psi}(\vec{p})$$

4.4.2 Action de l'opérateur P en représentation $\{|r\rangle\}$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | P_x | \Psi \rangle &= \langle r | P_x I | \Psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle r | P_x | p \rangle \langle p | \Psi \rangle d^3 \vec{p} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} P_x \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle d^3 \vec{p} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} P_x \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \bar{\Psi}(\vec{p}) d^3 \vec{p} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \bar{\Psi}(\vec{p}) d^3 \vec{p} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \Psi \rangle d^3 \vec{p} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \Psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

4.4.3 Action de l'opérateur X en représentation $\{|p\rangle\}$

$$\begin{aligned}
 \langle p | X | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | X | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \Psi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \Psi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \langle \vec{p} | \Psi \rangle \\
 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \overline{\Psi}(\vec{p})
 \end{aligned}$$

4.4.4 Calcul des commutateurs $[X, P_x]$, $[Y, P_y]$ et $[Z, P_z]$

Nous nous limitons au calcul de $[X, P_x]$ et on se garde le soin de calculer les autres commutateurs à la maison. Posons la quantité :

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r} | [X, P_x] | \Psi \rangle &= \langle \vec{r} | X P_x - P_x X | \Psi \rangle \\
 &= \langle \vec{r} | X P_x | \Psi \rangle - \langle \vec{r} | P_x X | \Psi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \vec{r} | X | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | P_x | \Psi \rangle d^3 \vec{r}' - \langle \vec{r} | P_x (X | \Psi \rangle) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \Psi(\vec{r}') \right) d^3 \vec{r}' - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | X | \Psi \rangle \\
 &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \Psi(\vec{r}) \\
 &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} \Psi(\vec{r}) - \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}) \\
 &= i\hbar \Psi(\vec{r})
 \end{aligned}$$

d'où $\langle \vec{r} | [X, P_x] | \Psi \rangle = i\hbar \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \langle \vec{r} | i\hbar | \Psi \rangle$ et $[X, P_x] = i\hbar$. De même : $[Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar$.

4.4.5 R et P sont hermitiques

Ici, on parle des composantes X, Y, Z et P_x, P_y, P_z !

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | X | \Psi \rangle &= \int \langle \varphi | X | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\
 &= \int x \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \\
 &= \left[\int x \varphi(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}) d^3 \vec{r} \right]^* \\
 &= \langle \Psi | X \varphi \rangle^*
 \end{aligned}$$

D'où $X = X^\dagger$

P_x est aussi hermitique ; démonstration :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi | P_x | \Psi \rangle &= \int \langle \varphi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | P_x | \Psi \rangle d^3 \vec{r} \\
 &= \int \varphi^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \\
 &= \left[- \int \varphi(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(\vec{r}) d^3 \vec{r} \right]^* \\
 &= - \left[\frac{\hbar}{i} \int \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}) - \Psi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \right]^* \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\vec{r}) \Psi(\vec{r})^* d^3 \vec{r} + \frac{-\hbar}{i} \left[\int \Psi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \right]^*
 \end{aligned}$$

D'où $\langle \varphi | P_x | \Psi \rangle = \left[\frac{\hbar}{i} \int \Psi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) d^3 \vec{r} \right]^* = \langle \Psi | P_x | \varphi \rangle^*$

D'où $P_x = P_x^\dagger$. Il en est de même pour $P_y = P_y^\dagger$ et $P_z = P_z^\dagger$.

4.4.6 Vecteurs propres de \mathbf{R} et \mathbf{P}

$$\langle \vec{r} | X | \vec{r}_0 \rangle = x \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = x_0 \text{ voir les propriétés de la fonction delta.}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
 X | \vec{r}_0 \rangle &= x_0 | \vec{r}_0 \rangle \\
 Y | \vec{r}_0 \rangle &= y_0 | \vec{r}_0 \rangle \\
 Z | \vec{r}_0 \rangle &= z_0 | \vec{r}_0 \rangle
 \end{aligned}$$

X, Y, Z sont des ensembles complets d'observables qui commutent.

De même pour l'opérateur \vec{P} .

$$\begin{aligned}
 P_x | \vec{r}_0 \rangle &= P x_0 | \vec{r}_0 \rangle \\
 P_y | \vec{r}_0 \rangle &= P y_0 | \vec{r}_0 \rangle \\
 P_z | \vec{r}_0 \rangle &= P z_0 | \vec{r}_0 \rangle
 \end{aligned}$$

P_x, P_y et P_z sont des ensembles complets d'observables qui commutent.

Chapitre 5

PRODUIT TENSORIEL

5.1 Introduction

Le produit tensoriel est adapté pour traiter des problèmes impliquant des systèmes pouvant interagir. Dans notre cas, on considère les espaces des états \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 . À grande distance, le système global est décrit par les états respectifs de chaque atome. À courte distance, les deux systèmes en forment un seul, dont l'espace des états est décrit par \mathcal{E} .

Le produit tensoriel, exemple basique

Prenons un exemple basique mais détaillé pour comprendre le fonctionnement du produit tensoriel :

Soit les trois vecteurs suivants :

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} \otimes \mathbf{z} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} y_1 z_1 \\ y_1 z_2 \\ y_2 z_1 \\ y_2 z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 y_1 z_1 \\ x_1 y_1 z_2 \\ x_1 y_2 z_1 \\ x_1 y_2 z_2 \\ x_2 y_1 z_1 \\ x_2 y_1 z_2 \\ x_2 y_2 z_1 \\ x_2 y_2 z_2 \end{bmatrix}$$

Source : <https://math-linux.com/latex-26/faq/latex-faq/article/latex-produit-tensoriel>

5.2 Définition et propriétés du produit tensoriel

Soit \mathcal{E}_1 un espace de dimension N_1 .

Soit \mathcal{E}_2 un espace de dimension N_2 .

Par définition : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$.

À tout couple $|\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ et $|\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$, on associe $|\Psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle = |\varphi(1), \varphi(2)\rangle$. Le produit tensoriel est linéaire à la multiplication par un complexe.

$$\lambda |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes \lambda |\varphi(2)\rangle$$

Le produit tensoriel est linéaire par rapport à l'addition de vecteur.

$$|\varphi(1)\rangle \otimes [\lambda_a |\varphi_a(2)\rangle + \lambda_b |\varphi_b(2)\rangle] \longrightarrow \lambda_a |\varphi(1)\rangle |\varphi_a(2)\rangle + \lambda_b |\varphi(1)\rangle |\varphi_b(2)\rangle$$

Si $\{|u_1\rangle\}$ est une base de \mathcal{E}_1 de dimension N_1 .

Si $\{|u_2\rangle\}$ est une base de \mathcal{E}_2 de dimension N_2 .

La base $\{|u_1\rangle \otimes |u_2\rangle\}$ est de dimension de l'espace des états \mathcal{E} de dimension $N_1 \times N_2$.

Soit $|\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ et $|u_i(1)\rangle$ sa base.

$$|\varphi(1)\rangle = \sum a_i |U_i(1)\rangle$$

Soit $|\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$ et $\{U_j(2)\}$ sa base :

$$|\varphi(2)\rangle = \sum b_j |U_j(2)\rangle$$

Donc :

$$|\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

$$|\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle = \sum_{ij} a_i b_j |U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle$$

Il existe des kets $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ et qui ne sont pas un produit tensoriel de deux états appartenant respectivement à \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 .

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle$$

$$C_{ij} \neq a_i b_j$$

Cependant : $\{|U_i(1)\rangle, |U_j(2)\rangle\}$ est la base de vecteurs propres de \mathcal{E} .

5.2.1 Produit scalaire

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_{kl} C_{kl} |U_k(1)\rangle |U_l(2)\rangle$$

$$\langle \varphi | \Psi \rangle = \sum_{ijkl} C_{kl}^* C_{ij} \langle U_l(2) | \langle U_k(1) | U_i(1) \rangle | U_j(2) \rangle$$

$$= \sum_{ij} C_{kl}^* C_{ij} \underbrace{\langle U_l(2) | U_j(2) \rangle}_{\delta_{lj}} \underbrace{\langle U_k(1) | U_i(1) \rangle}_{\delta_{ik}}$$

5.2.2 Produit tensoriel d'opérateurs

Soit $A(1)$ un opérateur agissant sur les kets appartenant à \mathcal{E}_1 . On lui associe $\tilde{A}(\alpha)$ agissant sur \mathcal{E} que l'on appelle le prolongement de $A(1)$ dans \mathcal{E} .

$$\begin{aligned}\tilde{A} |\varphi(1)\rangle |\Psi(1)\rangle &= \left(\tilde{A}(1) |\varphi(1)\rangle \right) |\varphi(2)\rangle \\ &\quad \delta_i |\Psi\rangle \in \mathcal{E} \\ |\Psi\rangle &= \sum_{ij} C_{ij} |U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle \\ \tilde{A}(1) |\Psi\rangle &= \sum_{ij} C_{ij} \left(\tilde{A} |U_i(1)\rangle \right) |U_j(\alpha)\rangle\end{aligned}$$

Le cas est analogue pour un opérateur $B(2)$ agissant sur les kets de l'espace \mathcal{E}_2 , $B(2)$ est associé à $\tilde{B}(\alpha)$ agissant sur \mathcal{E} . Le produit tensoriel $A(1) \otimes B(2)$ est un opérateur linéaire agissant sur \mathcal{E} . Son action sur les kets appartenant à \mathcal{E} est donnée comme suit :

$$A(1) \otimes B(2) |\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij} (A(1) |U_i(1)\rangle) \otimes (B(2) |U_j(2)\rangle)$$

À partir de cette propriété, on peut écrire : $\tilde{A}(\alpha) = A(1) \otimes I$ et $\tilde{B}(\alpha) = B(2) \otimes I$.

Remarque : $[A(1), B(2)] = 0 \forall A$ et B . Le projecteur sur \mathcal{E} . Si P est un projecteur sur le ket $|U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle$:

$$\begin{aligned}P &= |U_i(1)\rangle |U_j(2)\rangle \langle U_i(1)| \langle U_j(2)| \\ &= |U_i(1)\rangle \langle U_i(1)| \otimes |U_j(2)\rangle \langle U_j(2)| \\ &= P_1 \otimes P_2\end{aligned}$$

Il existe des projecteurs qui ne sont pas le produit tensoriel d'un projecteur agissant sur \mathcal{E}_1 pour un autre agissant sur \mathcal{E}_2 .

5.2.3 Notation

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(\alpha)\rangle = |\varphi(1)\rangle |\varphi(\alpha)\rangle = |\varphi(1)\varphi(\alpha)\rangle$$

Mais : $|\varphi(1)\rangle \notin \mathcal{E}$, $|\varphi(\alpha)\rangle$ sans plan !

Ainsi $A(1) \otimes B(2) = A(1)B(2)$

$\tilde{A}(1) = A(1) \otimes I = A(1)$; $\tilde{B} = I \otimes B(2) = B(2)$

On allège l'écriture et on veille à respecter la notation.

5.3 Équations aux valeurs propres

5.3.1 Valeurs et vecteurs propres d'opérateurs prolongés

A : Équations aux valeurs propres de $A(1)$

Soit $A(1)$ est un opérateur dont on connaît les vecteurs propres et les valeurs propres dans \mathcal{E}_1 .

$$A |U_n^i(1)\rangle = a_n |U_n^i(1)\rangle$$

Avec $i = 1, \dots, g_n$. Dans \mathcal{E} , tous les vecteurs de la forme $|U_n^i(1)\rangle |U_n(2)\rangle$ sont des vecteurs propres de $A(1)$ avec la même valeur propre $\forall |U_n(2)\rangle$. Si $\{|U_m(2)\rangle\}$ forme une base dans \mathcal{E}_2 ,

$\{|U_n^i(1)\rangle, |U_m(2)\rangle\}$ forme une base dans \mathcal{E} . D'où, si $A(1)$ est une observable dans \mathcal{E}_1 , $A(1)$ l'est aussi dans \mathcal{E}_i , le spectre de $A(1)$ est le même dans \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 et est de dimension N_2 , alors a_n est $g_n \cdot N_2$ fois dégénéré dans \mathcal{E}_1 . Le projecteur sur le sous-espace de vecteurs propres associé à $a_n P_n$:

$$\begin{aligned} P_n &= \sum_{ij} |U_n^i(1)\rangle |U_m(2)\rangle \langle U_n^i(1)| \langle U_m(2)| \\ &= \sum_{ij} |U_n^i(1)\rangle \langle U_n^i(1)| \otimes |U_m(2)\rangle \langle U_m(2)| \\ &= \sum_{ij} |U_n^i(1)\rangle \langle U_n^i(1)| \otimes \underbrace{\sum_m |U_m(2)\rangle \langle U_m(2)|}_I \end{aligned}$$

car $\{|U_m(2)\rangle\}$ est une base dans \mathcal{E}_2 .

$$P_n = \sum_i |U_n^i(1)\rangle \langle U_n^i(1)|$$

B : Équations aux valeurs propres de $A(1) + B(2)$

Si $A(1)$ est un opérateur dans \mathcal{E}_1 et a_n et $|U_n^i(1)\rangle$ sont ses valeurs propres et vecteurs propres.

$$A(1) |U_n^i(1)\rangle = a_n |U_n^i(1)\rangle$$

Si $B(2)$ est un opérateur hermitique dans \mathcal{E}_2 et b_m et $|U_n^i(2)\rangle$ sont ses valeurs propres et vecteurs propres. $A(1)$ et $B(2)$ commutent pour tout A et B et $\{|U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle\}$ forment une base commune à $A(1)$ et $B(2)$.

$$\begin{aligned} A(1) |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle &= a_n |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle \\ B(2) |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle &= b_m |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle \\ (A(1) + B(2)) |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle &= (a_n + b_m) |U_n^i(1)\rangle |U_n^i(2)\rangle \end{aligned}$$

5.4 Ensemble Complet d'Observables qui Commutent dans \mathcal{E}_1

Soit $A(1)$ est une ensemble complet d'observables qui commutent dans \mathcal{E}_1 de dimension N_2 . Soit $B(2)$ est une ensemble complet d'observables qui commutent dans \mathcal{E}_2 de dimension N_2 .

Dans \mathcal{E}_1 chaque valeur propre de $A(1)$ est N_2 fois dégénérées.

Dans \mathcal{E}_2 chaque valeur propre de $B(2)$ est N_2 fois dégénérées.

Or, le couple (a_n, b_n) désigne un seul vecteur propre que le produit tensoriel des vecteurs propres associés à a_n et b_n respectivement.

Chapitre 6

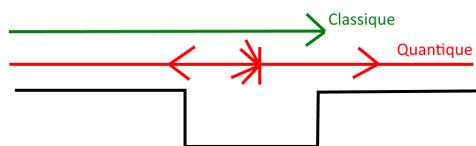
POTENTIEL A UNE DIMENSION CONSTANT PAR MORCEAU

6.1 Introduction

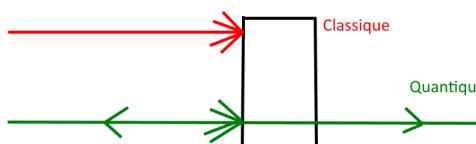
Ce chapitre est consacré à la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas simple à une dimension où les effets quantiques sont spectaculaires. Ces phénomènes se manifestent quand le potentiel $V(x)$ varie sur une distance de l'ordre de la longueur de DeBroglie : c'est le cas où $V(x)$ présente des sauts d'ampleurs finies.

Exemple :

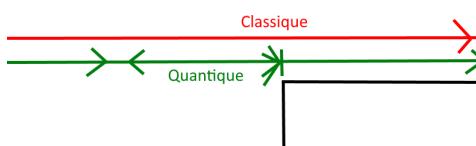
- ▶ une particule incidente sur un puits de potentiel ; quantiquement, la particule peut être réfléchie. Classiquement, les particules passent toujours.



- ▶ une particule incidente avec une petite énergie E_k sur un mur ou une marche de potentiel. Quantiquement, la particule traverse par effet tunnel. Classiquement, la particule rebondit toujours.



- ▶ une particule arrivant sur un mur ou une marche de potentiel avec une énergie E_k suffisamment grande, supérieure à l'énergie E_p (à la « hauteur » de la marche ou du mur). Quantiquement, la particule peut rebondir. Classiquement, elle passe toujours.



Remarque : Dans cette partie, on découvre le lien indissociable entre les conditions imposées à la fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger et l'apparition spontanée de la quantification de l'énergie.

Trois cas sont à étudier : le mur, le puits et la barrière de potentiel.

6.2 Propriété générale des problèmes à une dimension

On s'intéresse uniquement aux états stationnaires, fonctions propres de H . Elles sont de la forme :

$$\Psi(x, t) = \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \Psi(x)$$

L'équation de Schrödinger se résume à l'équation aux valeurs propres. L'équation de Schrödinger : $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$.

On choisit la représentation $\{|x\rangle\}$, on projette l'équation vectorielle sur le bra $\langle x|$:

$$\langle x|H|\Psi\rangle = \langle x|E|\Psi\rangle$$

Ce qui nous donne :

$$\langle x|\frac{p^2}{2m} + V(x)|\Psi\rangle = E \langle x|\Psi\rangle = E\Psi(x)$$

Nous savons également que : $\langle x|P|\Psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x)$

D'où :

$$\begin{aligned} \langle x|\frac{p^2}{2m}|\Psi\rangle &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) \\ \langle x|V(x)|\Psi\rangle &= V(x)\Psi(x) \end{aligned}$$

L'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x)$$

On fait un changement de variable :

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}U(x) \text{ et } E = \frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{E}$$

Étude dimensionnelle :

$$\begin{aligned} [V] &= [E] = [ML^2T^{-2}] \\ [h] &= \frac{[E]}{[\omega]} = [E] \times [T] = [ML^2T^{-1}] \\ [U] &= \frac{[V][M]}{[h]^2} = \frac{[M]}{[E][T][T]} = \frac{[M]}{[ML^2T^{-2}][T]^2} = [L]^{-2} \end{aligned}$$

De même $[\mathcal{E}] = [L^{-2}]$

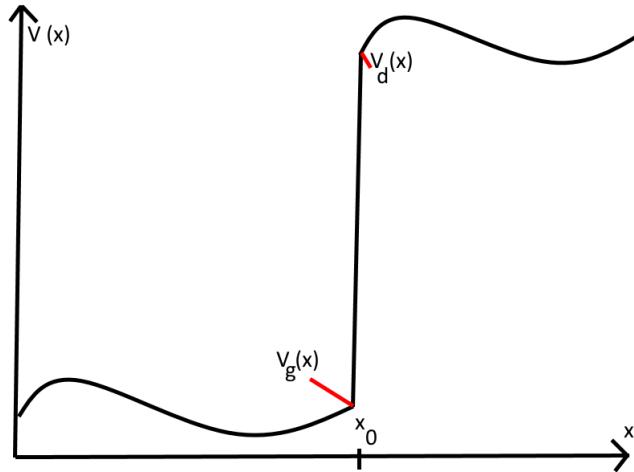
L'équation devient :

$$-\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + (\mathcal{E} - U(x))\Psi(x) = 0$$

C'est une équation de Sturm-Liouville. Une équation linéaire homogène du second ordre. On ne s'intéresse qu'aux solutions de carré sommable. Ces solutions sont des fonctions propres de H .

6.2.1 La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée

Quand $V(x)$ est continu, aucun problème ne se pose pour la continuité de $\Psi''(x)$. Analysons le cas où $V(x)$ présente un saut d'amplitude finie.



Pour étudier $\Psi(x)$ et sa dérivée, on intègre l'équation différentielle au voisinage de x_0 .

$$\Psi'(x_0 - \delta_x) - \Psi'(x_0 + \delta_x) = \int_{x_0 - \delta_x}^{x_0 + \delta_x} (U(x) - \mathcal{E}) \Psi(x) dx$$

À la limite quand δ_x tend vers 0, cela nous donne $\Psi'(x_0 - \delta_x) - \Psi'(x_0 + \delta_x) = 0$. $\Psi'(x)$ est continue au point x_0 où le potentiel effectue un saut d'amplitude finie. La continuité de $\Psi'(x)$ entraîne la continuité de $\Psi(x)$. $\Psi''(x)$ est discontinue, cette propriété apparaît dans l'équation différentielle.

$$\begin{aligned}\Psi''_I(x_0) + (\mathcal{E} - V_g(x_0))\Psi_I(x_0) &= 0 \\ \Psi''_{II}(x_0) + (\mathcal{E} - V_d(x_0))\Psi_{II}(x_0) &= 0 \\ \Psi''_{II}(x_0) - \Psi_{II}(x_0) &= (V_d(x_0) - V_g(x_0))\Psi(x_0)\end{aligned}$$

Car : $\Psi_I(x_0) = \Psi_{II}(x_0)$

Classiquement, la discontinuité de Ψ'' est comprise comme étant une variation instantanée de l'énergie E_k .

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(x) = \frac{\Psi''\hbar^2}{2m} = \langle x | \frac{p^2}{2m} | \Psi \rangle$$

Sachant que $E = E_k + V(x)$; l'énergie mécanique est égale à la valeur propre de H , elle est constante, toute variation brusque de $V(x)$ entraîne la variation de l'énergie E_k , à la hausse comme à la baisse.

Remarque : Nous traiterons à part, en Travaux Dirigés, le cas où $V(x)$ effectue un saut infini : le puits de potentiel infini et le cas où $V(x) = \delta(x)$.

6.2.2 Le théorème de Wronshien

Soit deux fonctions solutions de l'équation de Schrödinger $\Psi_1(x)$ et $\Psi_2(x)$ associées à deux valeurs E_1 et E_2 .

- a) $\Psi_1''(x) + (E_1 - U(x))\Psi_1(x) = 0 \cdot \Psi_2(x)$
b) $\Psi_2''(x) + (E_2 - U(x))\Psi_2(x) = 0 \cdot \Psi_1(x)$

Le Wronshien est défini comme suit :

$$W[\Psi_1(x), \Psi_2(x)] = \Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x) \longrightarrow \begin{Bmatrix} \Psi_1(x) & \Psi_2(x) \\ \Psi_1'(x) & \Psi_2'(x) \end{Bmatrix}$$

On calcule (a) - (b).

$$\Psi_1''(x)\Psi_2(x) - \Psi_2''(x)\Psi_1(x) = (E_1 - E_2)\Psi_1(x)\Psi_2(x)$$

On ajoute et on retranche $\Psi_1'(x)\Psi_2'(x)$ et on intègre l'égalité entre a) et b) ; on trouve :

$$[\Psi_1(x)\Psi_2'(x) - \Psi_1'(x)\Psi_2(x)]_a^b = (E_1 - E_2) \int_a^b \Psi_1(x)\Psi_2(x)dx$$

Cette relation constitue la formulation simplifiée du théorème de Wronshien.

6.2.3 Tout état lié à une dimension est non dégénérée

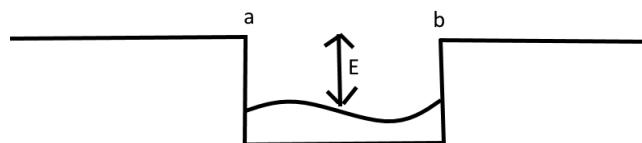
Considérons le cas où : $E_1 = E_2$. On obtient : $[\Psi_1'(x)\Psi_2(x) - \Psi_1\Psi_2'(x)]_a^b = 0$. Comme a et b sont des points arbitraires, on peut affirmer que le « Wronshien » de deux solutions indépendantes associées à une même valeur propre est constante. Or, un état lié est forcément nul à infini, enfin sa fonction d'onde... . D'où le Wronshien à sa définition est forcément nul à infini et prend la même valeur partout pour tout x . $W[\Psi_1(x)\Psi_2(x)] = 0$ d'où $\Psi_1'(x)\Psi_2(x) = \Psi_1(x)\Psi_2'(x)$. La résolution de cette équation est simple :

$$\ln \Psi_1(x) = \ln \Psi_2(x) + k \text{ et } \Psi_1(x) = \alpha \Psi_2(x)$$

D'où la propriété : a une dimension, tout état lié est non-dégénéré !

6.2.4 Les états liés sont deux à deux orthogonaux entre eux

En effet, en choisissant pour a et b les limites du domaine du confinement. Le Wronshien est nul, l'intégrale entre a et b de $\Psi_1(x)\Psi_2(x)dx = 0$; donc $\Psi_1(x) \perp \Psi_2(x)$.

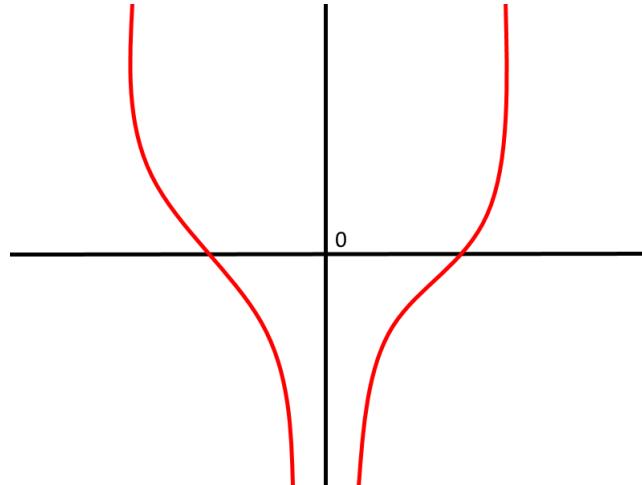


6.2.5 Toute valeur propre de H ne peut être inférieure au minimum de $V(x)$

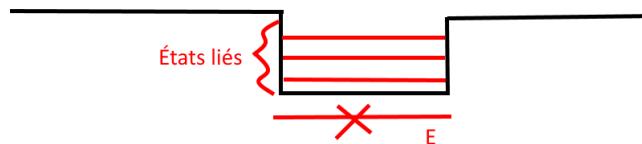
Supposons que $V(x)$ est borné inférieur uniformément et son minimum est V_{min} (ici nous considérons un puits de potentiel fini) et on s'intéresse aux états liés. On suppose que $E < V_{min}$, dans cette solution, l'équation de Schrödinger est :

$$\Psi'' = \underbrace{-E + V(x)}_{>0} \Psi ; -E + V(x) > 0 \text{ et } V(x) > 0$$

Donc Ψ'' et Ψ sont de même signe.



Or les fonctions représentées par ces courbes ne sont pas de carré sommable, ce qui est absurde, donc $E > V(x)$. Pour le puits de potentiel fini :



6.3 Cas des puits symétriques $V(x) = V(-x)$

Rappel sur l'opérateur parité Π . Son action sur une fonction d'onde $\Pi\Psi(x) = \Psi(-x)$ avec $\Pi^2 = I$ et les valeurs propres de Π sont $\lambda = \pm 1$. Les fonctions associées à $\lambda = 1$ sont les fonctions paires : $\Pi\Psi(x) = \Psi(-x) = \Psi(x)$. Les fonctions associées à $\lambda = -1$ sont les fonctions impaires : $\Pi\Psi(x) = \Psi(-x) = -\Psi(x)$. Montrons que Π commute avec $p^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\Pi\Psi(x)) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(-x) = \frac{\hbar}{i} \Psi'(-x)$$

On arrive à : $[\Pi; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}] = 0$.

Testons les commutations entre Π et p^2 :

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi\Psi(x) &= \frac{\hbar}{\partial x^2} \Psi(-x) = -\hbar^2 \Psi''(-x) \\ \Pi \left(-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right) &= -\hbar \Psi''(-x) \end{aligned}$$

Donc $[\Pi; p^2] = 0$.

Analysons la commutation de Π avec $V(x)$, calcul de $\Pi V(x)\Psi(x) = V(-x)\Psi(-x) = V(x)\Psi(-x)$; $V(x)$ est une fonction paire. Calculons $V(x)\Pi\Psi(x) = V(x)\Psi(-x)$, d'où $[V(x), \Pi] = 0$ et $[H, \Pi] = 0$. Π commute avec H , d'où ils possèdent des fonctions propres communes. Les fonctions propres de H sont aussi des fonctions propres de Π donc elles ont aussi une parité définie : elles sont des fonctions paires ou impaires.

Chapitre 7

L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

Ce chapitre porte sur la bête noire de tout apprenti physicien : l'oscillateur harmonique. Mais ici, dans le cadre de la mécanique quantique !

L'oscillateur harmonique

I Introduction:

Le système le plus simple de l'oscillateur harmonique est décris par une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel ne dépendant que de x et de la forme $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$.

Dans cette situation la particule se trouve attirée vers le centre où le potentiel est minimum par une force de rappel ne dépendant que de x et de la forme: $F = -kx$.

En mécanique classique, le mouvement de la particule est décris par une fonction sinusoidale autour du point $x=0$

$$\text{et de pulsation } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Ce résultat est valable à tout système en mouvement périodique autour de son point d'équilibre.

En fin de cours nous avons l'exemple de la vibration moléculaire

On peut résoudre rigoureusement l'équation de Schrödinger et obtenir les fonctions propres (les fonctions d'onde) et les

valeurs propres (les énergies des états du système étudié).

- L'étude classique consiste à résoudre l'équation fondamentale

de la dynamique d'un système constitué par une masse accrochée à un ressort en mouvement de va et vient autour d'un point d'équilibre. ②

II L'Hamiltonien quantique

1) Propriétés générales:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} k X^2 = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

Les opérateurs X et P vérifient la relation de commutation

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

H étant indépendant du temps, l'étude quantique examine à la résolution de l'équation aux valeurs propres.

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

En représentation $\{\psi_n\}$:

$$\langle n | H | \psi \rangle = E \langle n | \psi \rangle = E \psi(n)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial n^2} \psi(n) + \frac{1}{2} m \omega^2 \psi(n) = E \psi(n)$$

On se rappelle de ces 3 propriétés

- E est toujours positive (voir cours précédent)
- $\psi(n)$ a une portée bien définie (voir cours précédent)
- La spécificité des états liés est finie et chaque valeur propre est non dégénérée (voir cours précédent)

2) Quantification canonique, opérateurs creation et annihilation

2-a) Les opérateurs \hat{X} et \hat{P}

Nous connaissons déjà les opérateurs X et P ; X et P sont hermitiques (cours n°18 fondamentaux de la QM II, bâses continues).

On introduit les opérateurs \hat{X} et \hat{P} pour dimension:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad : \quad \sqrt{\frac{[M][T^{-1}]}{[H][L^2][T^{-1}]}} X = \frac{X}{[L]} : \text{sans dimension}$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \quad : \quad \frac{P}{\sqrt{[H][M][L^2][T^{-1}][T^2]}} = \frac{P}{[H][L][T^{-1}]} : \text{sans dim.}$$

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} [X, P] = i\hbar \times \frac{1}{\hbar} = i$$

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega \hat{X}^2 = \frac{m\hbar\omega}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m\omega \frac{\hbar^2}{m\omega} \hat{X}^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega (\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$$

$$= \frac{1}{2} \hbar\omega \hat{H}$$

$$\text{et } \hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$$

Nous allons chercher des solutions de l'équation aux valeurs propres $\hat{H} |\psi_v\rangle = v |\psi_v\rangle$ avec v est sans dimension, c'est une valeur propre discrète en continu.

2-b) Les opérateurs a , a^\dagger et N

posons $\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$ et $\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a)$

\hat{X} et \hat{P} sont hermitiques au même titre que X et P

a et a^+ ne sont pas hermitiques, l'un est l'adjoint de l'autre.

avec $[a, a^+] = 1$ et $[a^+, a] = -1$ evidemment

$$aa^+ = \frac{1}{2} (x - i\hat{P})(x + i\hat{P}) = \frac{1}{2} (x^2 + \hat{P}^2) + \frac{1}{2} i [x, \hat{P}] \\ = \frac{1}{2} (x^2 + \hat{P}^2) + \frac{1}{2}$$

$$d'a a^+ + \frac{1}{2} = H$$

On introduit l'opérateur $N = aa^+$ avec $N^+ = (aa^+)^+ = a^+a = N$

* Pour rappel $(AB)^+ = B^+ A^+$

Donc, N est hermitique et $H = N + \frac{1}{2}$ et les vecteurs propres de H sont aussi vecteurs propres de N .

* N ne commute pas avec a et a^+

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

$$[N, a^+] = [aa^+, a^+] = a^+ [a, a^+] + [a^+, a^+] a = a$$

Par hypothèse, on modifie l'équation aux valeurs propres en pliquant l'hamiltonien par une autre impliquant N .

On écrit : $N | \psi_v \rangle = v | \psi_v \rangle$

Après résolution de cette dernière, tenant compte que $|\psi_v\rangle$ est vecteur propre de H , nous écrivons le vecteur propre de H en ajoutant $\frac{1}{2}$: le vecteur propre de H est : $(v + \frac{1}{2})$.

$|\psi_v\rangle$ est aussi vecteur propre de H et associé à la valeur propre $v + \frac{1}{2}$.

3) Détermination du spectre:

lemme 1 : Les valeurs propres de l'opérateur N sont positives ou nulles.

dém : Soit $\alpha|\varphi_0\rangle$ vecteur propre de N

Calculons la norme de $\alpha|\varphi_0\rangle$

$$\|\alpha|\varphi_0\rangle\|^2 = \langle\varphi_0|\alpha|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|N|\varphi_0\rangle = \nu$$

la norme est toujours positive ou nulle

lemme 2 : Soit $\alpha|\varphi_0\rangle$ est vecteur propre de N associé à ν

1) si $\nu = 0$ alors le kér $\alpha|\varphi_{0=0}\rangle = 0$

2) si $\nu > 0$ le kér $\alpha|\varphi_0\rangle$ est vecteur propre de N associé à un valeur propre $(\nu - 1)$

Dém : On sait que ν est la norme du vecteur $\alpha|\varphi_0\rangle$

alors si la norme est nulle, le vecteur l'est aussi

Soit $\alpha|\varphi_0\rangle = 0$, $\alpha|\varphi_0\rangle = N|\varphi_0\rangle = 0$

Cette équation est vraie pour tout vecteur nul, il y a des vecteurs propres de N avec la valeur propre $\nu = 0$

Soit $\nu > 0$ et $\alpha|\varphi_0\rangle$ est non nul.

Montrons que $\alpha|\varphi_0\rangle$ est vecteur propre de N et calculons sa valeur propre :

$$[N, \alpha]|\varphi_0\rangle = N\alpha|\varphi_0\rangle - \alpha N|\varphi_0\rangle = -\alpha|\varphi_0\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{d'où } N\alpha|\varphi_0\rangle &= \alpha N|\varphi_0\rangle - \alpha|\varphi_0\rangle = \alpha\nu|\varphi_0\rangle - \alpha|\varphi_0\rangle \\ &= (\nu - 1)\alpha|\varphi_0\rangle \end{aligned}$$

$$N\alpha|\varphi_0\rangle = (\nu - 1)\alpha|\varphi_0\rangle$$

Lemme III : soit $|q_v\rangle$ un vecteur propre de N , non nul

- 1) $a^+|q_v\rangle$ est toujours non nul
- 2) $a^+|q_v\rangle$ est vecteur propre de N associé à la valeur propre $v+1$

Dem :

$$\begin{aligned} 1) \quad \|a^+|q_v\rangle\|^2 &= \langle q_v | a^+ a | q_v \rangle = \langle q_v | a a^+ | q_v \rangle \\ &= \langle q_v | N + 1 | q_v \rangle = v + 1 \end{aligned}$$

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

$$\text{d'où } a a^+ = a a + 1$$

$$\text{et } [a, a^+] = 1 = a a^+ - a^+ a = 1 \text{ et } a a^+ = a^+ a + 1 = N + 1$$

D'après lemme I, v est toujours ≥ 0 , ainsi, on peut dire que $v+1$ est toujours positif, d'où le vecteur $a^+|q_v\rangle$ est toujours non nul quel que soit v (vecteur propre de N).

$$2) [N a^+] |q_v\rangle = a^+ |q_v\rangle$$

$$N a^+ |q_v\rangle - a^+ N |q_v\rangle = a^+ |q_v\rangle$$

$$\begin{aligned} N a^+ |q_v\rangle &= a^+ N |q_v\rangle + a^+ |q_v\rangle = a^+ v |q_v\rangle + a^+ |q_v\rangle \\ &= (v+1) a^+ |q_v\rangle \end{aligned}$$

$$\text{d'où } N a^+ |q_v\rangle = (v+1) a^+ |q_v\rangle$$

$a^+ |q_v\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $v+1$.

4) La spectre de N est constitué d'entiers positifs

Considérons v est demi-entier et w est un vecteur propre de N associé au vecteur propre $|q_v\rangle$

$$\text{d'où } m < v < m+1 \text{ et } m \text{ est entier } m \in \mathbb{N}$$

(7)

Alors, $\alpha^1 \langle \varphi_v \rangle$ est un vecteur propre de N associé à ν

$$\begin{aligned} \alpha^1 \langle \varphi_v \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & \nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \\ \alpha^n \langle \varphi_v \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & \nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

D'après Lemme II

Faisons maintenant agir α sur le ket $\alpha^n \langle \varphi_v \rangle$.

$\nu - n > 0$ d'après l'hypothèse initiale, d'après Lemme II, l'action de α sur $\alpha^n \langle \varphi_v \rangle$ donne un vecteur propre de N non nul et de valeur propre $\nu - n - 1$.

Or $\nu - n - 1$ est négative par hypothèse. ($n < \nu < n+1$)

On constate que si ν est demi-entier, on construit un ket propre de N de valeur propre négative (ce qui n'est pas nul).

D'après Lemme I, les valeurs propres de N sont ≥ 0 . Ainsi, on refait l'hypothèse de ν entier !!

En conclusion: ν est toujours un entier positif ou nul. ($\nu \in \mathbb{N}$)

On prend $\nu = m$

$\alpha^m \langle \varphi_m \rangle$ est vecteur propre non nul de N associé à la valeur propre $m - m = 0$ et $\alpha^{m+1} \langle \varphi_m \rangle = 0$

Alors, l'action répétée de α sur le vecteur $\langle \varphi_m \rangle$ est finie quand m est un entier, sans pour autant obtenir un vecteur propre de N associé à une valeur propre négative.

Si $\alpha^n \langle \varphi_m \rangle$ est un vecteur propre de N associé à la valeur propre nulle.

$a^+(a^n|\Psi_n\rangle)$ est un vecteur propre de H associé à $\frac{1}{2}$

$$(a^+)^2(a^n|\Psi_n\rangle) = \underbrace{\quad}_{\text{=}} = \underbrace{\quad}_{\text{=}} = \underbrace{\quad}_{\text{=}}$$

$$(a^+)^2(a^n|\Psi_n\rangle) = \underbrace{\quad}_{\text{=}} = \underbrace{\quad}_{\text{=}} = \underbrace{\quad}_{\text{=}}$$

Nous avons écrit que $H = N + \frac{1}{2}$ et $H = \hbar\omega H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$

Ainsi, le spectre de H est donné par les valeurs: $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

En mécanique quantique, l'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée. Elle ne peut pas prendre n'importe quelle valeur!

$\tilde{E}_f = (\text{l'énergie de l'état fondamental})$

$$\tilde{E}_f = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (\tilde{E}_f > V_{\min})$$

5 Retour sur les opérateurs a et a^+

Nous avons vu que d'après lemme I, si $|\Psi_0\rangle$ est vecteur de N avec la valeur propre n , $a|\Psi_0\rangle$ est aussi vecteur propre de N avec la valeur propre $n-1$.

On dit que a est un opérateur d'annihilation.

a^+ est un opérateur de création.

Leur action sur un vecteur propre de N ou H fait augmenter (pour a^+) et réduire (pour a) le niveau d'énergie d'un quantum.

III Etats propres de l'hamiltonien

1) La représentation $\{| \Psi_n \rangle\}$

(1 - a) Expression des vecteurs de cette base en fonction de $|\Psi_0\rangle$.

$|\psi_0\rangle$ est le vecteur propre de N et de H associé à la base en la plus faible valeur propre pour chacun des opérateurs.

$$N|\psi_0\rangle = 0 \quad \text{et} \quad H|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\psi_0\rangle$$

On sait d'après lemme II

$\alpha^+|\psi_0\rangle$ est vecteur propre de N et associé à $n=1$
d'où $\alpha^+|\psi_0\rangle = c|\psi_1\rangle$ ($\alpha^+|\psi_0\rangle$ est colinéaire avec $|\psi_1\rangle$)

On peut aussi écrire : $|\psi_1\rangle = \alpha^+ \alpha^+ |\psi_0\rangle$

$$\text{d'où } \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = |\alpha|^2 \langle \psi_0 | \alpha^+ \alpha^+ |\psi_0\rangle = |\alpha|^2 \langle \psi_0 | N+1 |\psi_0\rangle = |\alpha|^2 = 1$$

$$\text{Ainsi } |\psi_1\rangle = \alpha^+ |\psi_0\rangle$$

On peut de même construire $|\psi_2\rangle$

$$|\psi_2\rangle = \alpha_2 \alpha^+ |\psi_1\rangle = \alpha_2 \alpha^2 |\psi_0\rangle$$

$$\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 = |\alpha_2|^2 \langle \psi_1 | \alpha^+ \alpha^+ |\psi_1\rangle = |\alpha_2|^2 \langle \psi_1 | N+1 |\psi_1\rangle = 2 |\alpha_2|^2$$

$$\text{d'où } \alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{Ainsi, } |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha^+ |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha^+ |\psi_0\rangle$$

de même pour $|\psi_3\rangle$; $|\psi_3\rangle = \alpha_3 \alpha^+ |\psi_2\rangle$

$$\langle \psi_3 | \psi_3 \rangle = 1 = |\alpha_3|^2 \langle \psi_2 | \alpha^+ \alpha^+ |\psi_2\rangle = |\alpha_3|^2 \langle \psi_2 | N+1 |\psi_2\rangle$$

$$= |\alpha_3|^2 \cdot 3 \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = |\alpha_3|^2 \times 3$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{\alpha^+ |\psi_2\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{(\alpha^+)^2}{\sqrt{2} \times 3} |\psi_1\rangle = \frac{(\alpha^+)^3}{\sqrt{3!}} |\psi_0\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= \alpha_n \alpha^+ |\psi_{n-1}\rangle \quad \text{et } \alpha = \frac{1}{\sqrt{n}} \\ |\psi_n\rangle &= \frac{\alpha^+}{\sqrt{3}} |\psi_{n-1}\rangle = \frac{(\alpha^+)^2}{\sqrt{n(n-1)}} |\psi_{n-2}\rangle \\ &= \frac{(\alpha^+)^m}{\sqrt{m!}} |\psi_0\rangle \end{aligned}$$

2 Relation d'orthogonalisation et de fermeture

H est hermitique, donc ses vecteurs propres sont orthogonaux

Admettons aussi que H est une observable: $\Pi = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$

Montrons la relation d'orthogonalisation: $\langle \psi_n | \psi_n' \rangle = S_{nn'}$

$$\langle \psi_n | \psi_n' \rangle = \frac{1}{\sqrt{m'! n!}} \langle \psi_0 | \alpha^{n'} (\alpha^+)^{n'} |\psi_0\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{or } \alpha^n (\alpha^+) |\psi_0\rangle &= \alpha (a a^+) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= \alpha^{n-1} (N+1) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \quad \text{et } N(\alpha) |\psi_0\rangle = m'-1 |\psi_0\rangle \\ &= \alpha^{n-1} (m'-1+1) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m' \alpha^{n-1} (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m' \alpha^{n-2} (a a^+) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m' \alpha^{n-2} (N+1) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m' \alpha^{n-2} (m'-2+1) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m' (m'-1) \alpha^{n-2} (\alpha^+) |\psi_0\rangle \\ &= m'! \alpha^{n-m'} |\psi_0\rangle \quad m' > m \\ &= m'! (m'-1)! \dots (m'-m+1) (\alpha^+) |\psi_0\rangle \quad m' > m \end{aligned}$$

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'}$$

On peut que

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'}$$

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'}$$

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'}$$

$$\langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = n! \langle f_0 | V$$

$$\text{car } \langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = 0$$

par tel

$$\langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = 0$$

$$\langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = 0$$

$$\langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = 0 \quad \text{car } \langle f_0 | (\alpha^*)^n = 0$$

$$\text{car } \langle f_0 | \alpha^+ = 0$$

$$\langle \alpha^n (\alpha^*)^n | f_0 \rangle V = n! \langle f_0 | f_0 \rangle V$$

$$\text{et } \langle f_0 | f_0 \rangle = \frac{n!}{\sqrt{n! n!}} \langle f_0 | f_0 \rangle = 1$$

3 Action des divers opérateurs sur les vecteurs propres de H_{eff}

3-a) Action de α , α^* , X et P

$$\alpha | \phi_n \rangle = \alpha | \phi_{n-1} \rangle V$$

$$\langle \phi_n | \alpha \alpha^* | \phi_n \rangle = |\alpha|^2 = m \quad \text{et} \quad \alpha = \sqrt{m}$$

$$\text{d'où } \alpha | \phi_n \rangle = \sqrt{m} | \phi_{n-1} \rangle V$$

$$\alpha^* | \phi_n \rangle = \alpha | \phi_{n+1} \rangle V$$

$$\alpha^* | \phi_n \rangle = \sqrt{n+1} | \phi_{n+1} \rangle V$$

de même

$$\langle \phi_n | \alpha^* = \langle \phi_{n-1} | \sqrt{n}$$

$$\langle \phi_n | \alpha^* = \langle \phi_{n+1} | \sqrt{n+1}$$

(12)

$$\begin{aligned} X |\psi_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{mw}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ + a) |\psi_n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{mw}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P |\psi_n\rangle &= i \sqrt{\frac{m\hbar w}{2}} (a^+ - a) |\psi_n\rangle \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar w}{2}} (\sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle) \end{aligned}$$

3.- b : Éléments de matrice de a , a^+ , X et P

$$\langle \psi_n | a | \psi_n \rangle = \sqrt{n} S_{n, n-1}$$

$$\langle \psi_n | a^+ | \psi_n \rangle = \sqrt{n+1} S_{n, n+1}$$

$$\langle \psi_n | X | \psi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} \left(\sqrt{n+1} S_{n, n+1} + \sqrt{n} S_{n, n-1} \right)$$

$$\langle \psi_n | P | \psi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar w}{2}} \left(\sqrt{n+1} S_{n, n+1} - \sqrt{n} S_{n, n-1} \right)$$

4) Fonctions d'ondes associées aux états stationnaires

Calcul de $\phi_0(n) = \langle n | \phi_0 \rangle$

mons savons que $a|\phi_0\rangle = 0$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}} X + i \frac{P}{\sqrt{m\hbar w}} \right) |\phi_0\rangle = 0$$

en représentation $\{|n\rangle\}$, mons obtenir l'équation

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}} n + i \frac{1}{\sqrt{Vmw}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial n} \right) \phi_0(n) = 0$$

(13)

$$\text{d'au } \left(\frac{m\omega}{\hbar} n + \frac{\sigma}{\hbar n} \right) \varphi_0(n) = 0$$

$$-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2$$

la solution générale de cette équation est $\varphi_0(n) = C e^{-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2}$
par normalisation, nous trouvons la constante C.

Pour rappel : $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$

$$\text{d'au } \varphi_0(n) = \left(\frac{mw}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2}$$

$$\begin{aligned} \varphi_n(n) &= \langle n | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle n | (\hat{a}^\dagger)^n | \varphi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(\frac{mw}{\hbar} n - \sqrt{\frac{\hbar}{mw}} \frac{C}{\sigma n} \right)^n \varphi_0(n) \\ &= \left[\frac{1}{n! 2^n} \left(\frac{\hbar}{mw} \right)^n \left(\frac{mw}{\hbar \pi} \right)^{1/4} \left(\frac{mw}{\hbar} n - \frac{\sigma}{\hbar n} \right)^n \right] e^{-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2} \end{aligned}$$

En utilisant cette formule, nous obtenons toutes les fonctions d'onde solutions de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique

$$\varphi_1(n) = \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{mw}{\hbar} \right)^3 \right]^{1/4} n e^{-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2}$$

$$\varphi_2(n) = \left(\frac{mw}{4\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{2mw}{\hbar} n^2 - 1 \right] e^{-\frac{1}{2} \frac{mw}{\hbar} n^2}$$

IV Discussion physique:

(14)

1) Valeurs moyennes de X et P

$$\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle) \right)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1} \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle \right)$$

$$\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle)$$

$$= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{n+1} \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle - \sqrt{n} \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle \right)$$

$$= 0 \qquad \qquad = 0$$

2) Écart quadratique moyen (ΔX) et (ΔP)

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle$$

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) = \frac{\hbar}{2m\omega} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger)$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1)$$

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | \varphi_n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Delta X \Delta P = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

3. Valeurs moyennes des énergies cinétiques et potentielles

$$\begin{aligned}\langle \varphi_n | V(X) | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta X)^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega (n + \frac{1}{2})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \varphi_n | \frac{P^2}{2m} | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{1}{2m} (\Delta P)^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega (n + \frac{1}{2})\end{aligned}$$

$$\text{d'où } \langle \varphi_n | V(X) | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \frac{P^2}{2m} | \varphi_n \rangle = \frac{\bar{E}_n}{2}$$

Les énergies cinétiques et potentielles sont égales.

Chapitre 8

LES ÉTATS NON LIÉS

(9)

Etat monté : $E > 0$

Équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Dans les régions I et III $V(x) = 0$

l'équation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x)$$

solution dans la région I

$$\psi_I(x) = \underbrace{A_I e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{B_I e^{-ikx}}_{\text{onde réflexion}}$$

$$\psi_{III}(x) = \underbrace{A_{III} e^{ikx}}_{\text{onde transmise}} + \underbrace{B_{III} e^{-ikx}}_{\text{onde réflexion sur l'incidente } x=+\infty}$$

(b)

$B_{\text{III}} = 0$ car aucune particule n'est transmise de $x = +\infty$ en direction du potentiel

La source de particules est en $x = -\infty$

Ainsi

$$\psi_{\text{III}}(n) = A_{\text{III}} e^{ikx}$$

Dans la région II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(n) - V_0 \psi(n) = E \psi(n)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(n) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi(n) = -K^2 \psi(n)$$

$$d'm \psi_{\text{II}}(n) = A_{\text{II}} e^{ikx} + B_{\text{II}} e^{-ikx}$$

$$\text{Avec } K^2 = k^2 + k_0^2 \text{ et } k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

Condition de Raccordement en $x = -\frac{a}{2}$

$$(A_{\text{I}} e^{-ik\frac{a}{2}} + B_{\text{I}} e^{ik\frac{a}{2}}) = A_{\text{II}} e^{-ik\frac{a}{2}} + B_{\text{II}} e^{ik\frac{a}{2}} \text{ (1)}$$

$$ik A_{\text{I}} e^{-ik\frac{a}{2}} - B_{\text{I}} ik e^{ik\frac{a}{2}} = ik A_{\text{II}} e^{-ik\frac{a}{2}} - B_{\text{II}} ik e^{ik\frac{a}{2}}$$

(c)

Ce système d'équations permet d'exprimer A_I et B_I en fonction de A_{II} et B_{II}

d'addition des deux équations donne:

$$2ik A_I e^{-\frac{ik\alpha}{2}} = A_{II} (ik+ik) e^{-\frac{ik\alpha}{2}} + B_{II} (ik-ik) e^{\frac{iK\alpha}{2}}$$

$$A_I = A_{II} \frac{(ik+ik)}{2ik} e^{-\frac{ik\alpha}{2}} + B_{II} \frac{(ik-ik)}{2ik} e^{\frac{iK\alpha}{2}}$$

La soustraction donne:

$$2i B_I ik e^{-\frac{ik\alpha}{2}} = A_{II} (ik-ik) e^{-\frac{ik\alpha}{2}} + B_{II} (ik+ik) e^{\frac{iK\alpha}{2}}$$

$$B_I = A_{II} \frac{(ik-ik)}{2ik} e^{-\frac{ik\alpha}{2}} + B_{II} \frac{(ik+ik)}{2ik} e^{\frac{iK\alpha}{2}}$$

Conditions de superposition au point $n = \frac{\alpha}{2}$

$$\left(A_{II} e^{\frac{ik\alpha}{2}} + B_{II} e^{-\frac{ik\alpha}{2}} = A_{II} e^{\frac{ik\alpha}{2}} \right) \times ik$$

$$ik A_{II} e^{\frac{ik\alpha}{2}} - ik B_{II} e^{-\frac{ik\alpha}{2}} = ik A_{II} e^{\frac{ik\alpha}{2}}$$

dans cette étape j'exprime A_{II} et B_{II} en fonction de A_{III}

(d)

La somme des deux équations donne

$$2ik A_{\underline{II}} e^{\frac{ik\alpha}{2}} = A_{\underline{III}} (ik+ik) e^{\frac{ik\alpha}{2}}$$

$$A_{\underline{II}} = A_{\underline{III}} \frac{(ik+ik)}{2ik} e^{\frac{i\alpha}{2}(k-k)}$$

La soustraction des deux équations donne

$$2ik B_{\underline{II}} e^{-\frac{ik\alpha}{2}} = A_{\underline{III}} (ik-ik) e^{\frac{ik\alpha}{2}}$$

$$B_{\underline{II}} = A_{\underline{III}} \frac{(ik-ik)}{2ik} e^{\frac{i\alpha}{2}(k+k)}$$

Dans ce qui suit, je substitue les expressions de $A_{\underline{II}}$ et $B_{\underline{II}}$ dans les expressions de $A_{\underline{I}}$ et $B_{\underline{I}}$ et aussi, j'exprime $A_{\underline{I}}$ et $B_{\underline{I}}$ en fonction uniquement de $A_{\underline{III}}$.

La substitution donne: von TD escrue 4, Seite 7

$$A_{\underline{I}} = A_{\underline{III}} \frac{e^{\frac{ik\alpha}{2}}}{4k^2K^2} \left[2(k^2+k^2) i \sin ka + 2ikK \cos ka \right]$$

(e)

$$B_{II} = A_{II} \frac{(k^2 - k'^2)}{4k^2 K^2} z_i \sin ka.$$

Si, on introduit la notion de courant de probabilité

$$J(x, t) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[\psi^* \left(\frac{x}{\lambda}, t \right) \psi \right]$$

$$\text{Dans cette loi } \frac{x}{\lambda} T = \frac{x}{\lambda} \frac{d}{dn}$$

$$\begin{aligned} \text{On définit, } J_m &= \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[A_{1l}^* e^{ikx} \frac{t}{\lambda} \frac{d}{dn} A_{1l} e^{ikx} \right] \\ &= \frac{1}{m} \left[A_{1l}^* e^{-ikx} \frac{t}{\lambda} (-ik) A_{1l} e^{ikx} \right] \\ &= \frac{tk}{m} |A_{1l}|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{On définit: } J_{reg} &= \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[B_{1l}^* e^{kx + ikn} \frac{t}{\lambda} \frac{d}{dn} B_{1l} e^{-ikn} \right] \\ &= \frac{1}{m} \left[B_{1l}^* e^{kx} \frac{t}{\lambda} (-ik) B_{1l} e^{-ikn} \right] \\ &= \frac{-tk}{m} |B_{1l}|^2 \end{aligned}$$

(P)

$$\begin{aligned} \text{Imf m } J_t &= \frac{\operatorname{Re}}{m} \left[A_{\bar{II}}^* e^{-ikn} \left(\frac{t}{i} \frac{d}{dn} A_{\bar{II}} e^{ikn} \right) \right] \\ &= \frac{1}{m} \left[A_{\bar{II}}^* e^{-ikn} \left(\frac{t}{i} ik \right) A_{\bar{II}} e^{ikn} \right] \\ &= \frac{tk}{m} |A_{\bar{II}}|^2 \end{aligned}$$

so since pde parket es élément à l'infini ($-\infty$), le
conservatum du courant se écrit

$$J_{\text{inc}} + J_{\text{ref}} = J_{\text{har}}$$

$$\frac{tk}{m} |A_1|^2 - \frac{tk}{m} |B_1|^2 = \frac{tk}{m} |A_{\bar{II}}|^2$$

$$\text{d'où } |A_1|^2 - |B_1|^2 = |A_{\bar{II}}|^2$$

Definition des coefficient de réflexion R et de
transmission T.

$$R = \left| \frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} \right| \quad \text{et} \quad T = \frac{J_{\text{har}}}{J_{\text{inc}}}$$

(g)

Ann:

$$T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} = \frac{16 k^2 K^2}{4(k^2 + K^2)^2 \sin^2 Ka + 16 k^2 K^2 \cos^2 Ka}$$

$$R = \frac{(k^2 - K^2)^2}{4(k^2 + K^2)^2 \sin^2 Ka + 16 k^2 K^2 \cos^2 Ka}$$

Vérifier que $T + R = 1$

finie

Chapitre 9

LE MOMENT CINÉTIQUE

Théorie du Moment Cinétique.

I Introduction

En mécanique classique $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$

\vec{r} est le vecteur position

\vec{p} est le vecteur impulsion

En mécanique quantique $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P}$

\vec{R} est l'opérateur vectorielle position

\vec{P} est l'opérateur vectorielle impulsion

\vec{L} est un opérateur vectorielle qui a 3 composantes

L_x, L_y et L_z .

$$\vec{L} = \begin{matrix} \vec{x} & P_x \\ \vec{y} & P_y \\ \vec{z} & P_z \end{matrix} \quad \begin{aligned} L_x &= Y P_z - Z P_y \\ L_y &= Z P_x - X P_z \\ L_z &= X P_y - Y P_x \end{aligned}$$

X, Y, Z, P_x, P_y et P_z sont des opérateurs hermitiques

d' au, L_x, L_y et L_z sont aussi hermitiques

I-1 Relations de Commutation

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Ces relations peuvent être obtenues à partir des relations de commutation des opérateurs position et impulsion.

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar$$

Remarque:

• Le \hbar dans les commutateurs est nécessaire pour

l'homogénéité

• Le " i " est nécessaire car la règle qui prescrit

les commutateurs des opérateurs hermitiens

est anti-hermitique: ($S^+ = -S^-$)

L est appelé moment cinétique orbital, il est

l'analogie quantique d'un mouvement

classique d'une particule autour d'un

centre fixe.

On désigne par \vec{S} le moment cinétique de Spin:

appelé aussi moment cinétique intrinsèque. Cette grandeur n'a pas d'équivalent classique.

Les composantes de \vec{S} satisfont les mêmes relations de commutation que celles de \vec{L} .

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z; [S_y, S_z] = i\hbar S_x; [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

I-2 Généralisation

Pour la présentation du théorie du moment cinétique en N. Q m introduit un moment cinétique abstrait

qu'on désigne par l'opérateur vectoriel \vec{J} et dont

les trois composantes J_x, J_y et J_z vérifient les relations

de commutation à savoir

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z.$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x$$

$$[J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

Ces relations de commutations peuvent être réduites à la relation :

$$\vec{J} \wedge \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

Autres relations spécifiques aux composantes des opérateurs vectuels: Moments.

En utilisant la relation de commutation,

$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$, calculer les commutateurs $[J_x, J^2]$ et $J_x = J_x, J_y$ et ou J_z

$$[J_x, J^2] = [J_x, J_x^2] + [J_x, J_y^2] + [J_x, J_z^2]$$

$$[J_x, J_x^2] = 0$$

$$\begin{aligned} [J_x, J_y^2] &= J_y [J_x, J_y] + [J_x, J_y] J_y \\ &= i\hbar J_y J_z + i\hbar J_z J_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [J_x, J_z^2] &= J_z [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_z \\ &= -i\hbar J_z J_y - i\hbar J_y J_z \end{aligned}$$

$$\text{Donc } [J_x, J^2] = i\hbar (J_y J_z + J_z J_y - J_z J_y - J_y J_z) = 0$$

de même pour les autres composantes

$$[J_y, J^2] = 0 \quad \text{et} \quad [J_z, J^2] = 0$$

Chaque composante du moment cinétique
commute avec le même.

Page :

4

Remarque: On peut construire une base de vecteurs propres communs à \vec{J}^2 et à l'axe de composition de l'opérateur \vec{J} .

II Théorie générale du moment cinétique

II-1: Les opérateurs J_+ et J_-

Il est commode d'introduire les deux combinaisons remarquables: $J_+ = J_x + iJ_y$ et $J_- = J_x - iJ_y$

J_+ et J_- sont des adjoints l'un de l'autre:

$$\text{d'où } J_+^+ = J_- \text{ et } J_-^+ = J_+$$

Leur produit est hermitique:

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

$$(J_+ J_-)^+ = J_-^+ J_+^+ = J_+ J_-$$

$$(J_- J_+)^+ = J_+^+ J_-^+ = J_- J_+$$

Les relations de commutation impliquant les opérateurs J_+ et J_- :

$$\bullet [J_+, J^2] = [J_x, J^2] + i [J_y, J^2] = 0$$

$$\bullet [J_-, J^2] = [J_x, J^2] - i [J_y, J^2] = 0$$

$$\begin{aligned}
 * [J_3, J_+] &= [J_3, J_n + i J_y] \\
 &= [J_3, J_n] + i [J_3, J_y] \\
 &= i \hbar J_y - i (-i \hbar J_n) \\
 &= i \hbar J_y + \hbar J_n = \hbar (J_n + i J_y) = \hbar J_+
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 * [J_3, J_-] &= [J_3, J_n] - i [J_3, J_y] \\
 &= i \hbar J_y - i (-i \hbar J_n) \\
 &= i \hbar J_y - \hbar J_n = -\hbar (J_n - i J_y) \\
 &= -\hbar J_-
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 * [J_+, J_-] &= [J_n + i J_y, J_n - i J_y] \\
 &= [J_n, -i J_y] + [i J_y, J_n] \\
 &= -i [J_n, J_y] + i [J_y, J_n] \\
 &= -i(i \hbar J_3) + i(-i \hbar J_3) \\
 &= \hbar J_3 + \hbar J_3 = 2\hbar J_3
 \end{aligned}$$

$$* [J_-, J_+] = -2\hbar J_3$$

Außerdem importante

$$J_+ J_- = (J_n + i J_y)(J_n - i J_y)$$

$$= J_n^2 + J_y^2 + i J_y J_n - i J_n J_y$$

$$\begin{aligned}
 J_+ J_- &= J_n^2 + J_y^2 + i(J_y J_n - J_n J_y) \\
 &= J_n^2 + J_y^2 + i[J_y, J_n] \\
 &= J_n^2 + J_y^2 + i(-i\hbar J_3) \\
 &= J_n^2 + J_y^2 + \hbar J_3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_- J_+ &= (J_n - iJ_y)(J_n + iJ_y) \\
 &= J_n^2 + J_y^2 + i(J_n J_y - J_y J_n) \\
 &= J_n^2 + J_y^2 - \hbar J_3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 d'au \quad J_+ J_- &= J^2 - J_3^2 + \hbar J_3 \\
 J_- J_+ &= J^2 - J_3^2 - \hbar J_3
 \end{aligned}$$

$$A_{nn} = J_+ J_- = J_- J_+ + 2\hbar J_3$$

$$J_+ J_- + J_- J_+ = 2(J_n^2 + J_y^2)$$

$$J_n^2 + J_y^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+)$$

$$J^2 - J_3^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+)$$

Remarque : Les 3 composantes J_x, J_y et J_z ont la même espèce (isotropie de l'espace)

Elles sont équivalentes les unes aux autres au sens où il y a une permutation mutuelle tel que

$$J_y = R_{yy} J_x R_{yy}^+$$

On sait que J_x se déduit de J_y par une rotation d'un angle de $\frac{\pi}{2}$ autour de l'axe oz .

Comme J^2 et J_z commutent, ces deux opérateurs ont des vecteurs propres communs que nous désignons par le ket $|jm\rangle$ avec

$$J^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle$$

$$J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle$$

Il est à savoir que J^2 et J_z ne constituent pas en général un ECOC.

II-9 Valeurs propres de J^2 et J_z

Lemme 5 : Si $t^2 J(J+1)$ et m^2 sont les deux propres de J^2 et J_3 respectivement associés au même vecteur propre $|Jm\rangle$, alors

$$-J \leq m \leq J$$

Demi :

$$\begin{aligned} \|J + J|m\rangle\|^2 &= \langle Jm | J - J + J|m\rangle \\ &= \langle Jm | J^2 - J_3^2 - h^2 J_3 | Jm\rangle \\ &= h^2 J(J+1) - h^2 m^2 - h^2 m \end{aligned}$$

$$\text{avec } J(J+1) - m^2 - m \geq 0$$

$$\text{avec } J(J+1) - m^2 - m = (J-m)(J+m+1)$$

$$\text{d'où } J \geq m \text{ et } m \geq -J-1$$

$$-J-1 \leq m \leq J$$

La seconde partie de la démonstration :

$$\begin{aligned} \|J - J|m\rangle\|^2 &= \langle Jm | J + J - J|m\rangle \\ &= \langle Jm | J^2 - J_3^2 + h^2 J_3 | Jm\rangle \\ &= h^2 J(J+1) - h^2 m^2 + h^2 m \\ &= h^2 [J(J+1) - m(m-1)] \end{aligned}$$

$$\text{et } J(j+1) - m(m-1) \geq 0$$

$$\text{Sachant que } J(j+1) - m(m-1) = (J-m+1)(J+m)$$

$$\text{on a } (J-m+1)(J+m) \geq 0$$

$$\text{d'où } m \geq -j \text{ et } m \leq j+1$$

$$-j \leq m \leq j+1$$

En combinant les 2 inégalités:

$$-j+1 \leq m \leq j$$

$$-j \leq m \leq j+1$$

$$\text{Possibilité } -j \leq m \leq j$$

Lemme II: Soit Jf_m un vecteur propre de J^2 et J_3

avec les valeurs propres $\lambda^2 J(j+1)$ et m respectivement.

1) Si $m = -j$ alors $J-1f_m = 0$

2) Si $m > -j$ alors $J-1f_m$ est vecteur propre

de J^2 et de J_3 avec les valeurs propres $\lambda^2 J(j+1)$ et $(m-1)$ respectivement.

Demo: Nous savons que $\|J - |J_m\rangle\|^2 = \hbar^2 J(J+1) - m^2 \hbar^2 + m \hbar^2$

si $J = -m$ le moment s'annule.

$$J(J+1) - m(m-1) = (J-m+1)(J+m)$$

Comme le moment est nul, le vecteur lui-même

$$\text{est nul : } J - |J_m\rangle = \vec{0}$$

On peut écrire aussi :

$$\begin{aligned} J+J - |J_m\rangle &= \hbar^2 J(J+1) - m^2 \hbar^2 + m \hbar^2 |J_m\rangle \\ &= \hbar^2 [J(J+1) - m^2 + m] |J_m\rangle \\ &= \hbar^2 (J+m)(J-m+1) |J_m\rangle \end{aligned}$$

$$\text{si } |J_m\rangle = |J-j\rangle$$

$$\begin{aligned} J+J - |J-j\rangle &= \hbar^2 (J-j)(J-j+1) |J-j\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\text{d'où } J - |J-j\rangle = 0 \text{ et aussi } J - |J-j\rangle = 0$$

Demo: Supposons que J est strictement supérieur à J ($m > -J$)

Nous savons que $[J^2, J_z] = 0$

On écrit ça lors

$$[\hat{J}^2 \hat{J}_-] |J_m\rangle = 0 = \hat{J}^2 \hat{J}_- |J_m\rangle - \hat{J}_- \hat{J}^2 |J_m\rangle = 0$$

Alors, $\hat{J}^2 \hat{J}_- |J_m\rangle = \hat{J}_- \hat{J}^2 |J_m\rangle = \hbar^2 J(J+1) \hat{J}_- |J_m\rangle$

d'où $\hat{J}_- |J_m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}^2 avec la valeur propre $\hbar^2 J(J+1)$

Par ailleurs, savons aussi que :

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_-] = -\hbar \hat{J}_-$$

Alors

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_-] |J_m\rangle = -\hbar \hat{J}_- |J_m\rangle$$

$$\hat{J}_3 \hat{J}_- |J_m\rangle - \hat{J}_- \hat{J}_3 |J_m\rangle = -\hbar \hat{J}_- |J_m\rangle$$

et

$$\hat{J}_3 \hat{J}_- |J_m\rangle = \hat{J}_- \hat{J}_3 |J_m\rangle - \hbar \hat{J}_- |J_m\rangle$$

$$= m\hbar \hat{J}_- |J_m\rangle = \hbar J_- |J_m\rangle$$

$$= \hbar(m-1) \hat{J}_- |J_m\rangle$$

Alors, $\hat{J}_- |J_m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}_3 avec la valeur propre $\hbar(m-1)$.

Page :

12.

Lemme III

Soit $|J_m\rangle$ est vecteur propre de J^2 et J_3 avec les valeurs propres $\hbar^2 J(J+1)$ et $m\hbar$ respectivement.

$$1) \text{ si } J=m \quad J+|J_m\rangle = 0$$

2) si $m < J$, $J+|J_m\rangle$ est un vecteur propre de

$$J^2 \text{ et } J_3 \text{ avec les valeurs propres } \hbar^2 J(J+1) \text{ et } \hbar(m+1)$$

respectivement.

Dém:

$$\begin{aligned} 1) \quad J - J+|J_m\rangle &= J - J_3 - \hbar J_3 |J_m\rangle \\ &= (\hbar^2 J(J+1) - m\hbar^2 - \hbar^2 m) |J_m\rangle \\ &= \hbar^2 (J(J+1) - m(m+1)) |J_m\rangle \end{aligned}$$

$$\text{si } m = J \quad J - J+|J_m\rangle = 0 \quad m J - (J+|J_m\rangle) = 0$$

$$\text{Ainsi } J+|J_m\rangle = 0$$

On peut aussi utiliser le même,

2) On utilise comme point de départ pour la démonstration

$$[J^2, J+] = 0 \text{ et on l'applique au ket } |J_m\rangle$$

$$\text{Puis le commutateur } [J_3, J+] = \hbar J+$$

II-3: Détermination du spectre de J_z^2 et J_z

Nous savons que chaque acteur de J_z m'apporte d'une unité, ainsi $\max - \min = J_z - j = 2j$ est nécessairement un entier pair pour tout résultat moyen suivant: j est soit entier soit demi-entier.

j est entier si $2j$ est pair

j est demi-entier si $2j$ est impair

$$j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

Par ailleurs, comme deux valeurs méthodes doivent être simultanément présentes, les valeurs demeurent reparties symétriquement autour de zéro: au total, pour un j donné, les valeurs propres de J_z sont un nombre $2j+1$ et données par

$$-jh, -(j+1)h, -(j+2)h, \dots, -(j-2)h, -(j-1)h, -jh$$

et le nombre quantique n prend les valeurs:

$$-j, -j+1, -j+2, \dots, -j+2, j-1, j$$

II-4 Représentation standard $\{|\Psi_{jm}\rangle\}$

Considérons \vec{J} un moment cinétique qui agit sur les tels d'un espace E .

On veut construire la base de vecteurs propres

commun à J^2 et J_3 (J^2 et J_3 sont deux observables qui commutent).

Prenons le couple (J^2, J_z) et m_t et cherchons ψ_u

vecteurs propres associés à ces deux valeurs propres.

Ces vecteurs forment un sous espace noté $E(jm)$ de l'espace E et de dim ≥ 1 car généralement J^2 et J_3 ne forment pas un EOC sauf dans des cas particuliers.

Cherchons une base $\{|\Psi_{jm}\rangle\}_{k=1,2,3 \dots g(jm)}$

dans ce sous espace. k enumère les tels de la base ayant les mêmes valeurs de J_z et m .

Si $m \neq j$, on peut imaginer un autre sous espace de l'espace des états que nous notons $E(jm+1)$

Si $m \neq -j$, on peut considérer un troisième sous espace $E(j, m-1)$.

On se propose dans ce qui suit de construire les bases orthonormées respectives des sous espaces $E(j, m+1)$ et $E(j, m-1)$.

On montre d'abord que $J_+ | k j m \rangle$ et $J_+ | l k m \rangle$ sont orthogonaux si $k \neq k'$.

De même que $J_- | k j m \rangle$ et $J_- | k' j m \rangle$ sont orthogonaux si $k \neq k'$.

Nous savons déjà que

$$J_+ J_- = J_- J_+^2 + h J_3^2$$

$$J_- J_+ = J_+ J_-^2 - h J_3^2$$

d'où

$$\langle k j m | J_+ J_- | k' j m \rangle = h (J(J+1) - m + m) \underbrace{\langle k j m | k' j m \rangle}_{\delta_{kk'}}$$

de même

$$\langle k j m | J_- J_+ | k' j m \rangle = h (J(J+1) - m - m) \underbrace{\langle k j m | k' j m \rangle}_{\delta_{kk'}}$$

Considérons alors les $g(j, m)$ vecteurs de $\mathcal{E}(j, m+1)$ donnés par l'équation

$$|k\rangle_{j, m+1} = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} |j, k\rangle_j, m \rangle$$

Ces vecteurs sont orthonormés et forment une base dans $\mathcal{E}(j, m+1)$

De même, les vecteurs

$$|k\rangle_{j, m-1} = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} |j, k\rangle_j, m \rangle$$

forment une base dans le sous espace $\mathcal{E}(j, m-1)$

$$\text{Ainsi, } \dim g(j, m) = g(j, m+1) = g(j, m-1)$$

On procédant de cette méthode, on construit la base de chacun des $2j+1$ $\mathcal{E}(j, m)$ sous espaces, et nous obtenons ce que nous appelons une base standard de l'espace des états.

La relation d'orthogonalisation de fermeture

s'écrit pour une telle base :

$$\langle k_j m | k'_j m' \rangle = S_{kk'} S_{jj'} S_{mm'}$$

$$\sum_j \sum_{k=1}^{g(j)} \sum_{m=-j}^j |k_j m\rangle \langle k_j m| = 1$$

Théorie du moment cinétique

complément.

D: Application au moment cinétique orbital:

D-1: Valeurs et fonctions propres de \vec{L}^z et L_z

D-1-a: Équations aux valeurs propres en $\{|l\rangle\}$
En coordonnées cartésiennes

$$\left. \begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \right\} \text{Les 3 composantes de } \vec{L}$$

En coordonnées sphériques:

$$L_x = i\hbar \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\cos \theta}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \theta \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\sin \theta}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L^2 = -t^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$L_+ = t e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_- = t e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

On rappelle la correspondance entre les coordonnées sphériques et cartesiennes :

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\text{et } dV = dx dy dz = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$\text{avec : } \sin \theta d\theta d\varphi = d\Omega \quad (\text{l'élément d'angle solide})$$

En représentation $\{r, \theta, \varphi\}$ les expressions auxquelles peuvent des opérateurs L^2 et L_z sont respectivement :

$$-t^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = t^2 \ell(\theta, \varphi) \psi(r, \theta, \varphi)$$

et

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = m \psi(r, \theta, \varphi)$$

r n'apparaît dans aucun opérateur différentiel dans les deux équations, il peut être donc traité comme un paramètre. Nous nous tenons compte que des variables θ et φ .
 Nous désignons aussi les fonctions propres communes à L^2 et L_3 par l'expression: $Y_e^m(\theta, \varphi)$.

$$\text{d'où } L^2 Y_e^m(\theta, \varphi) = L^2 \ell(\ell+1) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

$$L_3 Y_e^m(\theta, \varphi) = m h Y_e^m(\theta, \varphi)$$

D-1-b: Valeurs de ℓ et de m .

En remplaçant l'équation aux valeurs propres de L_3 , on peut écrire:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_e^m(\theta, \varphi) = m h Y_e^m(\theta, \varphi)$$

cette éq. diff. montre que $Y_e^m = F_e^m(\theta) e^{im\varphi}$

$$\text{Sachant que } Y_e^m(\theta, \varphi=0) = Y_e^m(\theta, \varphi=2\pi)$$

(φ est l'angle azimuthal)

$$\text{d'où } e^{im2\pi} = 1.$$

Cette égalité montre que dans le cas d'un mouvement périodique orbital m est forcément un entier. L'est aussi un entier.

D-1-c: Principales propriétés des harmoniques sphériques.

- Relations de récurrence.

Nous savons déjà que :

$$L \pm Y_e^m(\theta, \phi) = \pm \sqrt{V_{\ell(\ell+1)} - m(m \pm 1)} Y_e^{m \pm 1}(\theta, \phi)$$

En utilisant les développements analytiques des opérateurs L_+ et L_- on obtient les équations suivantes:

$$e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) Y_e^m(\theta, \phi) = \sqrt{V_{\ell(\ell+1)} - m(m+1)} Y_e^{m+1}(\theta, \phi)$$

$$e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) Y_e^m(\theta, \phi) = \sqrt{V_{\ell(\ell+1)} - m(m-1)} Y_e^{m-1}(\theta, \phi)$$

- Relation d'orthogonalité

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_e^m(\theta, \phi) Y_e^{m'}(\theta, \phi) = 8\pi i S_{mm'}$$

Relativ de Fermatine:

Toute fonction de θ et de φ : $f(\theta, \varphi)$ est développable d'une façon unique sur les harmoniques sphériques et de une façon unique:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell, m} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

$$\text{avec } c_{\ell, m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi}^{\pi} \sin \varphi f(\theta, \varphi) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)^*$$

Les harmoniques sphériques constituent une base dans l'espace E_{S2} des fonctions de θ et φ . Cette propriété se traduit par la relation de Fermatine.

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) Y_{\ell}^{m'}(\theta, \varphi)^* = \frac{1}{\sin \theta} (\delta_{\ell, 0} - \delta_{\ell, 0}) \frac{1}{2\ell + 1} \delta_{m, m'}$$

- Parité et conjugaison complexe:

* Parité:

Rappelons que la symétrie par rapport à l'hypothète traduit par la transformation de x en $-x$, y en $-y$ et z en $-z$.

En condamner sphérique, cette symétrie traduit comme

$$\text{Sur : } r \longrightarrow r$$

$$\theta \longrightarrow \pi - \theta$$

$$\phi \longrightarrow \phi + \pi$$

$$\text{d'où } \prod Y_e^m(\theta, \phi) = \prod_{\theta}^{m} (\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_e^m(\theta, \phi) V_m TD$$

- Complex conjugue :

$$\left[Y_e^m(\theta, \phi) \right]^* = (-1)^m Y_e^{-m}(\theta, \phi) V_m TD$$

fui

Chapitre 10

LA THÉORIE DES PERTURBATIONS

Ce chapitre consiste en une résolution de l'exercice, dont l'énoncé se trouve à la page suivante. Cette résolution a été fourni par le professeur via « Moodle » en format pdf.

3. Une particule de masse m , assujettie à se déplacer dans le plan xOy , a pour hamiltonien :

$$H_0 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2(X^2 + Y^2)$$

(oscillateur harmonique à deux dimensions, de pulsation ω). On veut étudier l'effet sur cette particule d'une perturbation W donnée par :

$$W = \lambda_1 W_1 + \lambda_2 W_2$$

où λ_1 et λ_2 sont des constantes, et W_1 et W_2 ont pour expression :

$$W_1 = m\omega^2XY$$

$$W_2 = \hbar\omega\left(\frac{L_z^2}{\hbar^2} - 2\right)$$

(L_z est la composante sur Oz du moment cinétique orbital de la particule).

Dans les calculs de perturbation, on se limitera toujours au premier ordre pour les énergies et à l'ordre zéro pour les vecteurs d'état.

a. Indiquer sans calculs les valeurs propres de H_0 , leur degré de dégénérence, et les vecteurs propres associés.

Dans la suite, on s'intéressera uniquement au deuxième niveau excité de H_0 , d'énergie $3\hbar\omega$ et trois fois dégénéré.

b. Calculer les matrices représentant les restrictions de W_1 et W_2 au sous-espace propre de la valeur propre $3\hbar\omega$ de H_0 .

c. On suppose $\lambda_2 = 0$ et $\lambda_1 \ll 1$.

Calculer par la théorie des perturbations l'effet du terme $\lambda_1 W_1$ sur le deuxième niveau excité de H_0 .

d. Comparer les résultats obtenus en c au développement limité de la solution exacte, que l'on cherchera en s'inspirant des méthodes développées dans le complément H_V (modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques couplés).

e. On suppose $\lambda_2 \ll \lambda_1 \ll 1$. En considérant les résultats de la question c comme une nouvelle situation non-perturbée, calculer l'effet du terme $\lambda_2 W_2$.

f. On suppose maintenant que $\lambda_1 = 0$ et $\lambda_2 \ll 1$.

Calculer par la théorie des perturbations l'effet du terme $\lambda_2 W_2$ sur le deuxième niveau excité de H_0 .

g. Comparer les résultats obtenus en f à la solution exacte telle qu'elle peut être déduite des considérations du complément D_{VI}.

h. On suppose enfin que $\lambda_1 \ll \lambda_2 \ll 1$. En considérant les résultats de la question f comme une nouvelle situation non-perturbée, calculer l'effet du terme $\lambda_1 W_1$.

La théorie des Perturbations

(Perturbations stattoomiques)

$$\begin{aligned}
 a) \quad H_0 &= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (X^2 + Y^2) \\
 &= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 Y^2 \\
 &= H_{0x} + H_{0y}
 \end{aligned}$$

$$\bar{E}_{mn} = \hbar\omega \left(mn + \frac{1}{2} \right)$$

$$\bar{E}_{my} = \hbar\omega \left(my + \frac{1}{2} \right)$$

$$\bar{E}_n = \hbar\omega \left(mn + my + 1 \right) = \hbar\omega \left(n + 1 \right)$$

$$E_0 = \hbar\omega \rightarrow 1 \text{ for degeneracy}$$

$$\bar{E}_1 = 2\hbar\omega \rightarrow 2 \text{ for degeneracy} \quad n=1 \quad \begin{cases} mn=1, my=0 \\ mn=0, my=1 \end{cases}$$

$$\bar{E}_2 = 3\hbar\omega \rightarrow 3 \text{ for degeneracy} \quad n=2 \quad \begin{cases} mn=2, my=0 \\ mn=1, my=1 \\ mn=0, my=2 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{E}_m = \hbar\omega \left(m+1 \right) \rightarrow (m+3) \text{ for degeneracy} \quad mn = m - my \\
 &\quad \text{d'au mn prend } m+1 \\
 &\quad \text{valeurs: } mn = 0, 1, 2, \dots, m \\
 &\quad \text{et au } (m+1) \text{ vvaleurs.}
 \end{aligned}$$

①

Les vecteurs propres de H_0 sont donnés par le produit tensoriel des vecteurs propres de H_{0x} et de H_{0y} .
 Donc, on peut écrire $|m\rangle = |m_x\rangle \otimes |m_y\rangle = |m_x\rangle |m_y\rangle = |m_x m_y\rangle$
 toutes les écritures sont bonnes.

$|m_x\rangle$ est \vec{v} propre de H_{0x} .

$$|m_y\rangle = = = = H_{0y}.$$

b) Le sous espace propre de $\tilde{E}_2 = 3\hbar\omega_0$ est engendré par les vecteurs propres de \tilde{E}_2 . Ils sont: $|2 0\rangle; |1 1\rangle; |0 2\rangle$

$$|0 2\rangle = |m_x=0, m_y=2\rangle$$

$$|1 1\rangle = |m_x=1, m_y=1\rangle$$

$$|2 0\rangle = |m_x=2, m_y=0\rangle$$

Pour faire ce calcul, on doit exprimer W_1 et W_2 en fonction des opérateurs créations et annihilation: a_n^+ , a_n ; a_y^+ et a_y .

Pour rappel:

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_n^+ + a_n) \quad \text{et} \quad P_n = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a_n^+ - a_n)$$

de même

$$Y = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_y^+ + a_y) \quad \text{et} \quad P_Y = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a_y^+ - a_y)$$

$$\mathcal{W}_i = m\omega XY = \frac{m\omega^2 \hbar}{2m\omega} (a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} (a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)$$

$$\text{avec } [a_x, a_y] = [a_x^+, a_y] = [a_x, a_y^+] = [a_x^+, a_y^+] = 0$$

$$[a_x, a_x^+] = \mathbb{1} = [a_y, a_y^+]$$

$$\mathcal{W}_i = \frac{\hbar\omega}{2} (a_x^+ a_y^+ + a_x^+ a_y + a_x a_y^+ + a_x a_y)$$

$$\mathcal{W}_i |20\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(a_x^+ a_y^+ |20\rangle + a_x^+ a_y |20\rangle + a_x a_y^+ |20\rangle + a_x a_y |20\rangle \right)$$

$\uparrow_{m\omega} \quad \uparrow_{n\omega}$

par rappel : $a^+ |m\rangle = \sqrt{m+1} |m+1\rangle$

$$a^- |m\rangle = \sqrt{m} |m-1\rangle$$

$$a |0\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \text{donc } \mathcal{W}_i |20\rangle &= \frac{\hbar\omega}{2} (a_x^+ a_y^+ |20\rangle + a_x a_y^+ |20\rangle) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\sqrt{3} \sqrt{1} |31\rangle + \sqrt{2} \sqrt{1} |11\rangle) \\ &= \frac{\sqrt{3}\hbar\omega}{2} |31\rangle + \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} |11\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 W_1 |11\rangle &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(a_1^\dagger a_1^+ |11\rangle + a_2^\dagger a_2^+ |11\rangle + a_3^\dagger a_3^+ |11\rangle + a_4^\dagger a_4^+ |11\rangle \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\sqrt{2}\sqrt{2} |12\rangle + \sqrt{2}\sqrt{1} |10\rangle + \sqrt{1}\sqrt{2} |02\rangle + \sqrt{1}\sqrt{1} |00\rangle \right) \\
 &= \hbar\omega |12\rangle + \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} |10\rangle + \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} |02\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} |00\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 W_1 |02\rangle &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(a_1^\dagger a_2^+ |02\rangle + a_2^\dagger a_1^+ |02\rangle + a_3^\dagger a_4^+ |02\rangle + a_4^\dagger a_3^+ |02\rangle \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(a_1^\dagger a_2^+ |02\rangle + a_3^\dagger a_4^+ |02\rangle \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\sqrt{1}\sqrt{3} |13\rangle + \sqrt{1}\sqrt{2} |11\rangle \right) \\
 &= \sqrt{3} \frac{\hbar\omega}{2} |13\rangle + \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} |11\rangle
 \end{aligned}$$

je rappelle que $|12\rangle$, $|13\rangle$ et $|11\rangle$ n'appartiennent pas au

dans l'espace propre de $\tilde{E}_2 = 3\hbar\omega$.

A cette étape, je construis la matrice $[W_1]$: matrice du potentiel W_1
dans la base $\{|12\rangle, |11\rangle, |02\rangle\}$.

Calcul des éléments de matrice:

$$\langle 12 | W_1 | 12 \rangle = 0; \quad \langle 11 | W_1 | 11 \rangle = 0; \quad \langle 02 | W_1 | 02 \rangle = 0$$

$$\text{et } \langle 12 | W_1 | 02 \rangle = 0$$

Les éléments non nuls sont :

$$\langle 201 | W_1 | 111 \rangle = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = \langle 111 | W_1 | 201 \rangle$$

$$\langle 021 | W_1 | 111 \rangle = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = \langle 111 | W_1 | 021 \rangle$$

La matrice de W_1 restreinte à l'espace de vecteurs propres $E_2 = 3\hbar\omega$

$$\begin{pmatrix} \langle 201 | & \langle 111 | & \langle 102 | \\ 0 & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \\ \langle 021 | & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Calcul de la matrice $[W_2]$ restreinte au sous espace propre de $E_2 = 3\hbar\omega$
D'abord, j'exprime L_3 en fonction des opérateurs création et annihilation.

$$L_3 = P_x Y - P_y X$$

je rappelle que $[X, P_x] = [Y, P_y] = i\hbar$ et $[X, P_y] = [Y, P_x] = 0$

$$\begin{aligned} L_3 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} i (a_n^+ - a_n)(a_y^+ + a_y) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} i (a_y^+ - a_y)(a_n^+ + a_n) \\ &= \frac{i\hbar}{2} (a_n^+ - a_n)(a_y^+ + a_y) - \frac{i\hbar}{2} (a_y^+ - a_y)(a_n^+ + a_n) \\ &= \frac{i\hbar}{2} (a_n^+ a_y^+ + a_n^+ a_y - a_n a_y^+ - a_n a_y + a_n^+ a_y^+ + a_n^+ a_y + a_n a_y^+ + a_n a_y) \\ &= i\hbar (a_y a_n^+ - a_n a_y^+) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 L_3^2 &= -\hbar^2 \left(\alpha_y \alpha_n^+ - \alpha_n \alpha_y^+ \right)^2 \\
 &= -\hbar^2 \left(\alpha_y^2 \alpha_n^{+2} + \alpha_n^2 \alpha_y^{+2} - \alpha_y \alpha_n \alpha_n^+ \alpha_y^+ - \alpha_n \alpha_y \alpha_y^+ \alpha_n^+ \right) \\
 &= -\hbar^2 \left(\alpha_y^2 \alpha_n^{+2} + \alpha_n^2 \alpha_y^{+2} - \underbrace{\alpha_n^+ \alpha_n \alpha_y \alpha_y^+}_{N_n} - \underbrace{\alpha_y^+ \alpha_y \alpha_n \alpha_n^+}_{N_y} \right)
 \end{aligned}$$

On rappelle que $[\alpha, \alpha^\dagger] = \alpha \alpha^\dagger - \alpha^\dagger \alpha = 1$ et $\alpha^\dagger \alpha = N$

$$\text{donc } \alpha \alpha^\dagger = N + 1$$

$$\alpha_n \alpha_n^+ = N_n + 1 \quad \text{et } \alpha_y \alpha_y^+ = N_y + 1$$

$$L_3^2 = -\hbar^2 \left(\alpha_y^2 \alpha_n^{+2} + \alpha_n^2 \alpha_y^{+2} - N_n(N_y + 1) - N_y(N_n + 1) \right)$$

$$W_k = \hbar \omega \left[\frac{L_3^2}{\hbar^2} - 2 \right] = \hbar \omega \left[N_n(N_y + 1) + N_y(N_n + 1) - \alpha_n^2 \alpha_y^2 - \alpha_n^2 \alpha_y^2 - 2 \right]$$

Calcul des termes des éléments de matrices

$$W_{22}|11\rangle = \hbar \omega \left[N_n(N_y + 1)|11\rangle + N_y(N_n + 1)|11\rangle - \alpha_n^2 \alpha_y^2 |11\rangle - \alpha_n^2 \alpha_y^2 |11\rangle \right]$$

$$= \hbar \omega \left[2|11\rangle + 2|11\rangle - 2|11\rangle \right] = 2\hbar \omega |11\rangle$$

détails des calculs :

$$N_n(N_y+1)|11\rangle \xrightarrow{a_1^{\dagger} a_2^{\dagger}} |111\rangle = 2|11\rangle$$

$$N_y(N_{n+1})|11\rangle \xrightarrow{a_1^{\dagger} (1+a_1)} |111\rangle = 2|11\rangle$$

$$a_n^{+2} a_y^2 |11\rangle = a_n^{\dagger} a_y \sqrt{2} \sqrt{1} |20\rangle = \sqrt{2} a_n^{\dagger} a_y |20\rangle = 0$$

$$a_y^2 a_n^2 |11\rangle = a_y^{\dagger} a_n \sqrt{1} \sqrt{2} |02\rangle = \sqrt{2} a_y^{\dagger} a_n |02\rangle = 0$$

$$\omega_L |20\rangle = \hbar \omega \left[N_n(1+N_y) + N_y(N_{n+1}) - a_n^{+2} a_y^2 - a_y^2 a_n^2 - 2 \right] |20\rangle$$

$$= \hbar \omega \left[2|20\rangle + 0|20\rangle - 0 - a_n^{+2} a_y^2 |20\rangle - 2|20\rangle \right]$$

$$= -\hbar \omega a_n^{+2} a_y^2 |20\rangle = -\hbar \omega \sqrt{2} \sqrt{1} a_n^{\dagger} a_y |11\rangle$$

$$= -\hbar \omega \sqrt{2} \sqrt{1} \sqrt{2} |02\rangle$$

$$= -2\hbar \omega |02\rangle$$

$$a_n^{+2} a_y^2 |20\rangle = 0 \quad \text{car } a_y |20\rangle = 0$$

$$\omega_L |02\rangle = \hbar \omega \left[N_n(N_y+1) + N_y(N_{n+1}) - a_n^{+2} a_y^2 - a_y^2 a_n^2 - 2 \right] |02\rangle$$

$$= \hbar \omega \left[0|02\rangle + 2|02\rangle - a_n^{+2} a_y^2 |02\rangle - 0 - 2|02\rangle \right]$$

$$= -\hbar \omega a_n^{+2} a_y^2 |02\rangle = -\hbar \omega \sqrt{1} \sqrt{2} a_n^{\dagger} a_y |11\rangle$$

$$= -\hbar \omega \sqrt{2} \sqrt{1} \sqrt{2} |20\rangle = -2\hbar \omega |20\rangle$$

En bilan :

$$W_2 |11\rangle = 2\hbar\omega |11\rangle$$

$$W_2 |20\rangle = -2\hbar\omega |02\rangle$$

$$W_2 |02\rangle = -2\hbar\omega |20\rangle$$

La matrice du potentiel W_2 dans le base : $\{|20\rangle, |11\rangle, |02\rangle\}$

est comme suit :

$$[W_2] = \begin{pmatrix} |20\rangle & |11\rangle & |02\rangle \\ |20\rangle & 0 & -2\hbar\omega \\ |11\rangle & 2\hbar\omega & 0 \\ |02\rangle & -2\hbar\omega & 0 \end{pmatrix}$$

$$= 2\hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

c) $\gamma_2 = 0$ et $\gamma_1 \ll \Delta$

Effet de W_2 sur le niveau d'énergie $\tilde{\epsilon}_2 = 3\hbar\omega$

Nous sommes dans le cas d'un niveau dégénéré (3 fois), notre démarche consiste à diagonaliser la matrice $[W_2]$ et trouver la correction d'énergie à l'ordre 1.

- Calcul des valeurs propres de $[W_2]$:

$$\Delta \left([W_2] - \lambda I \right) = 0 = \begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda^3 + 2\frac{\hbar^2\omega^2}{2} + 2\frac{\hbar^2\omega^2}{2} = 0$$

$$= -\lambda^3 + 2\hbar^2\omega^2 = 0$$

$$= \lambda \left(-\lambda^2 + \hbar^2\omega^2 \right)$$

On obtient, 3 valeurs propres: $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \hbar\omega$ et $\lambda_3 = -\hbar\omega$

Calcul du vecteur propre associé à $\lambda = 0$

Soit $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$ vecteur propre:

$$[W_2] |\psi_0\rangle = 0 |\psi_0\rangle$$

$$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 0 \quad \begin{array}{l} \beta = 0 \\ \alpha + \gamma = 0 \quad \text{et} \quad \alpha = -\gamma \end{array}$$

$$|\psi_0\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |k_0\rangle - |0\omega\rangle \}$$

Calcul du vecteur propre associé à $\lambda = \hbar\omega$

Soit $|\psi_1\rangle$ vecteur propre $|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$

$$[W_2] |\psi_1\rangle = \hbar\omega |\psi_1\rangle$$

$$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \quad \begin{cases} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \beta = \hbar\omega \alpha \quad \beta = \sqrt{2}\alpha \\ \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}(\alpha + \gamma) = \hbar\omega \beta \\ \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \beta = \hbar\omega \gamma \quad \rightarrow \beta = \sqrt{2}\gamma \end{cases}$$

$$\alpha = \gamma$$

$$d'm \quad |\psi_2\rangle = \beta \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} |20\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |11\rangle + \frac{1}{2} |02\rangle$$

Enfin, le vecteur propre associé à $\mathcal{Q} = -\hbar\omega$

$|\psi_2\rangle$ est ce vecteur propre: $|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$

$$[W_1] |\psi_2\rangle = -\hbar\omega |\psi_2\rangle$$

$$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = -\hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \beta &= -\hbar\omega \alpha & \Rightarrow \frac{\beta}{\sqrt{2}} &= -\alpha \\ \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} (\alpha + \gamma) &= -\hbar\omega \beta & \end{aligned} \right\} \alpha = \gamma$$

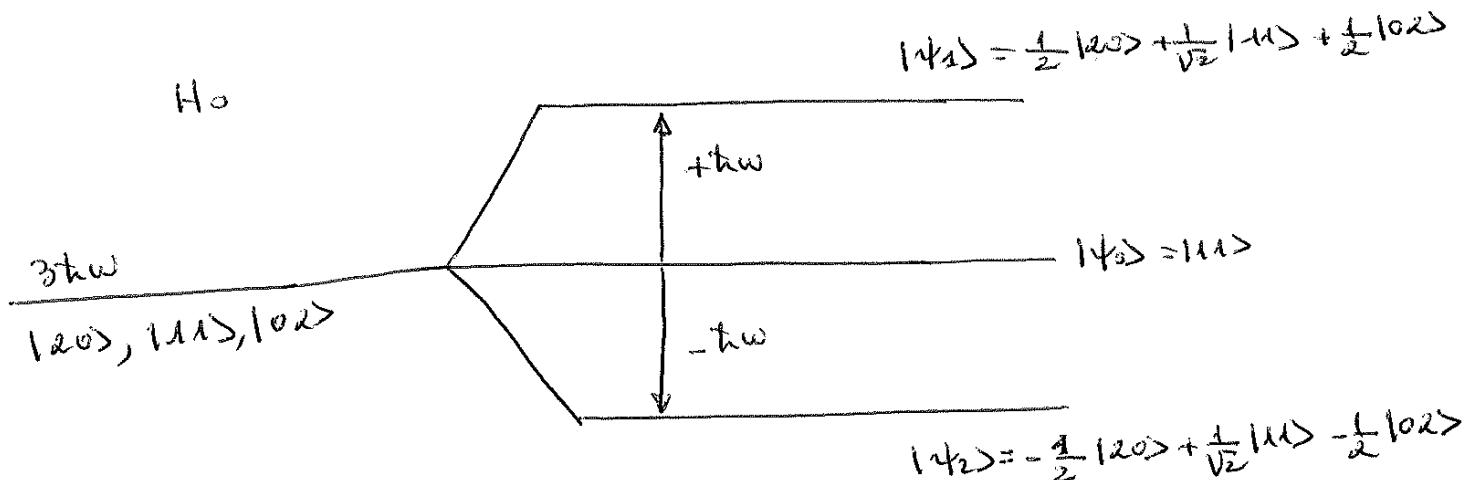
$$\frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \beta = -\hbar\omega \alpha \qquad \frac{\beta}{\sqrt{2}} = -\alpha$$

$$|\psi_2\rangle = \beta \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|\psi_2\rangle = -\frac{1}{2} |20\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |11\rangle - \frac{1}{2} |02\rangle$$

La perturbation W_1 a enlevé complètement la dégénérescence du niveau
 $\tilde{\omega}_2 = 3\hbar\omega$.

Schema



d) Question exercice.

e) On suppose que $\gamma_2 \ll \gamma_1 \ll \hbar$

Dans cette situation, on va calculer l'effet de W_2 en tenant compte déjà de l'effet de W_1 .

Ainsi, on se trouve dans le cas de calcul de perturbation de niveaux non dégénérés. Ces niveaux sont $|\psi_0\rangle = |\bar{1}1\rangle$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}|100\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|111\rangle + \frac{1}{2}|02\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = -\frac{1}{2}|100\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|111\rangle - \frac{1}{2}|02\rangle$$

D'après le cours $\Delta\tilde{\omega} = \langle \psi | W | \psi \rangle$ est la correction apposée par la perturbation W à la valeur propre associée à l'état $|\psi\rangle$ qui est vecteur propre de l'hamiltonien non perturbé.

$$\text{On appr } \Delta E_0 = \langle \psi_0 | W_L | \psi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0 \ -1) \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\hbar\omega \\ 0 & +2\hbar\omega & 0 \\ -2\hbar\omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0 \ -1) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 2\hbar\omega \\ 0 \\ -2\hbar\omega \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (+4\hbar\omega) = +2\hbar\omega$$

$$\Delta E_1 = \langle \psi_1 | W_L | \psi_1 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ 1 \ \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\hbar\omega \\ 0 & +2\hbar\omega & 0 \\ -2\hbar\omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

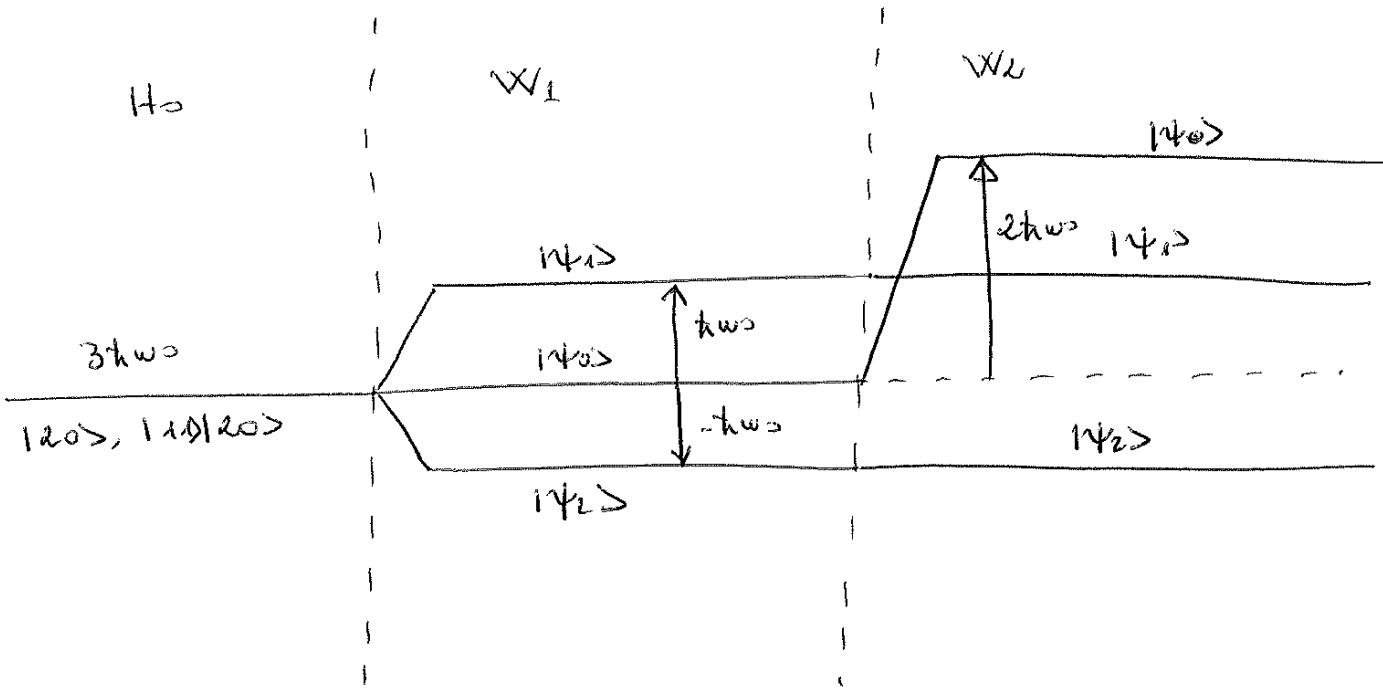
$$= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ 1 \ \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} -2\hbar\omega \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} \\ +2\hbar\omega \\ -\frac{2\hbar\omega}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (-\hbar\omega + 2\hbar\omega - \hbar\omega) \\ = 0\hbar\omega = 0$$

$$\Delta E_2 = \langle \psi_2 | W_L | \psi_2 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \ 1 \ -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\hbar\omega \\ 0 & +2\hbar\omega & 0 \\ -2\hbar\omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \ 1 \ -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} +2\hbar\omega \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} \\ +2\hbar\omega \\ +\frac{2\hbar\omega}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (-\hbar\omega + 2\hbar\omega - \hbar\omega) = 0\hbar\omega \\ = 0$$

Diagramme :



f) On considère maintenant que $\alpha_1 = 0$ et $\alpha_2 \ll 1$

Dans cette situation, la perturbation prend en compte est W_2 .

Le calcul de l'effet de cette perturbation consiste à diagonaliser la matrice de W_2 dans la base des états propres de $\tilde{E}_2 = 3\hbar\omega_0$.

Diagonalisation de $[W_2]$ et calcul de ses vecteurs propres.

$$\Delta([W_2] - \lambda I) = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & -2\hbar\omega_0 \\ 0 & -\lambda + 2\hbar\omega_0 & 0 \\ -2\hbar\omega_0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2(-\lambda + 2\hbar\omega_0) - 4\hbar\omega_0^2(-\lambda + 2\hbar\omega_0)$$

$$= (-\lambda + 2\hbar\omega_0)(\lambda^2 - 4\hbar\omega_0^2)$$

$$= (-\lambda + 2\hbar\omega_0)(\lambda - 2\hbar\omega_0)(\lambda + 2\hbar\omega_0)$$

$\lambda_1 = -2\hbar\omega_0$ est une valeur simple

$\lambda_2 = 2\hbar\omega_0$ est une valeur double. (λ_2 est deux fois dégénérée) 13

Une première remarque; la perturbation W_2 a levé partiellement la dégénérescence du niveau $E_2 = 2\hbar\omega$. Nous avons une fois de plus une dégénérescence partielle. N'oubliez pas que ce n'est pas une dégénérescence complète.

• Calcul des vecteurs propres.

• Vecteur propre associé $\lambda_2 = -2\hbar\omega$

$$|\Psi_1\rangle \text{ est le vecteur } |\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$W_2 |\Psi_1\rangle = -2\hbar\omega |\Psi_1\rangle$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\hbar\omega \\ 0 & 2\hbar\omega & 0 \\ -2\hbar\omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = -2\hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$-2\hbar\omega \gamma = -2\hbar\omega \alpha \quad \alpha = \gamma$$

$$2\hbar\omega \beta = -2\hbar\omega \beta \quad \beta = 0$$

$$|\Psi_1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |20\rangle + |02\rangle \right\}$$

• Vecteurs propres associés à $\lambda = 2\hbar\omega$

J'ai mis un "s" car il y a deux vecteurs propres, et le niveau est de fois dégénéré.

soit $\Psi_{2i} >$ un de ces deux vecteurs

i.e. car $\lambda = 2\hbar\omega$ est dégénérée. ($i = 1 \text{ ou } 2$)

$$\nabla_h |\Psi_{2i}\rangle = 2\hbar\omega |\Psi_{2i}\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\hbar\omega \\ 0 & 2\hbar\omega & 0 \\ -2\hbar\omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 2\hbar\omega \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} -2\hbar\omega \gamma &= 2\hbar\omega \alpha \\ 2\hbar\omega \beta &= 2\hbar\omega \beta \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{deux vecteurs propres} \\ \beta \text{ quelconque} \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \gamma = -\alpha \\ \beta \end{array}$$

$$|\Psi_{21}\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

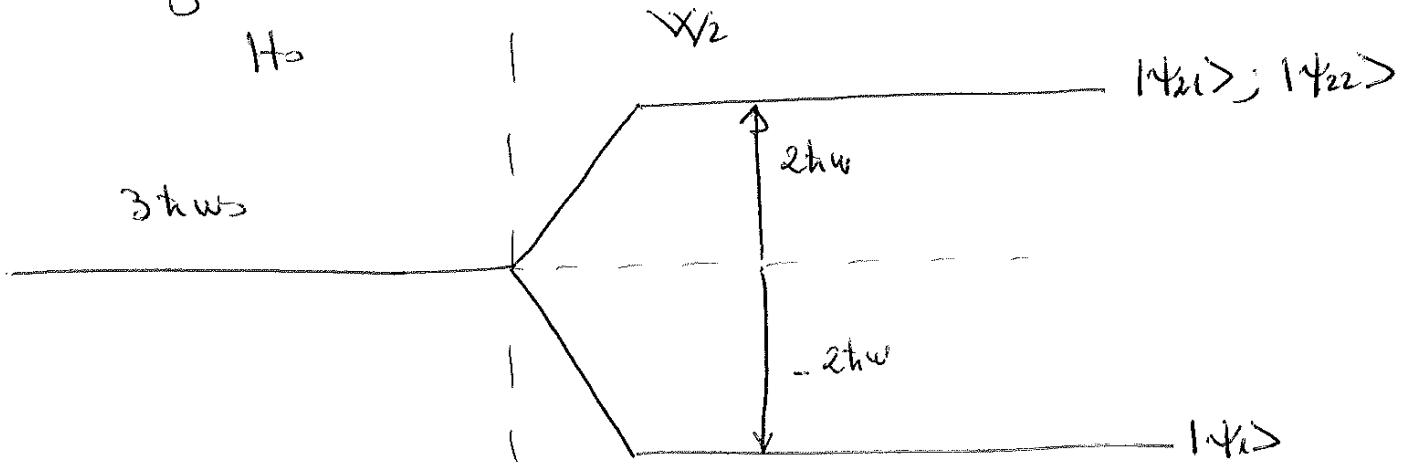
$$|\Psi_{22}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dans cette base

$$|\Psi_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |20\rangle - |02\rangle \}$$

$$|\Psi_{22}\rangle = |11\rangle$$

Diagramme :



$|1\psi_1\rangle$ et $|1\psi_2\rangle$ sont associés à la même énergie corrigée : $\tilde{E}_2 + 2\hbar\omega$.
Nous avons un niveau deux fois dégénéré au deux états enfoncés.
La dégénérescence est partiellement levée.

g) question écartée.

h) $\gamma_1 \ll \gamma_2 \ll \omega$

Dans cette phase, on tient compte de l'effet de W_1 .

On doit faire deux calculs séparés.

• le premier, concerne $|1\psi_1\rangle$ qui est un niveau non dégénéré

$$\Delta\tilde{E}_1 = \langle 1\psi_1 | W_1 | 1\psi_1 \rangle$$

• le second, concerne les niveaux dégénérés $|1\psi_1\rangle$ et $|1\psi_2\rangle$.
Nous allons diagonaliser W_1 dans cette base $\{|1\psi_1\rangle, |1\psi_2\rangle\}$.
Ce calcul nous donnera la correction de l'énergie au premier ordre

Premier calcul.

$$\Delta \bar{E}_1 = \langle \psi_1 | W_1 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + 1) \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + 1) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2\hbar \omega}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\Delta \bar{E}_1 = 0$$

Second calcul.

Calcul des éléments de matrice de W_1 dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

$$|\psi_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |2\rangle - |0\rangle \}$$

$$|\psi_{22}\rangle = |11\rangle$$

On sait que

$$W_1 |\psi_{22}\rangle = W_1 |11\rangle = \hbar \omega |22\rangle + \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} |10\rangle + \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} |02\rangle + \frac{\hbar \omega}{2} |00\rangle$$

(voir par 4) Calcul déjà réalisé.

$$\begin{aligned} W_1 |\psi_{21}\rangle &= W_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |2\rangle - |0\rangle \} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ W_1 |2\rangle - W_1 |0\rangle \} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} \hbar \omega \{ |31\rangle - |13\rangle \} \end{aligned}$$

La matrice de W_1 dans la base $\{|\psi_{21}\rangle, |\psi_{22}\rangle\}$ est nulle.

$$\langle \psi_{21} | W_1 | \psi_{21} \rangle ; \quad \langle \psi_{21} | W_1 | \psi_{22} \rangle = 0$$

$$\langle \psi_{22} | W_1 | \psi_{22} \rangle = 0$$

La correction est nulle.

Ainsi svP. Merci.

fin de l'exercice.

Bohm-Tannoudji Tome 2, Exercice 3

page 191.

Chapitre 11

L'ESSENTIEL DU COURS

- 11.1 Outils Mathématiques 1
- 11.2 Les postulats
- 11.3 Le magnétisme atomique
- 11.4 Outils Mathématiques 2
- 11.5 Produit tensoriel
- 11.6 Potentiel à une dimension constant par morceau
- 11.7 L'oscillateur harmonique
- 11.8 Les états non liés
- 11.9 Le moment cinétique