Rappel (non exhaustif) du cours pour le TD3

Formalisme de Dirac

Idée : la physique quantique est linéaire et a donc une structure d'algèbre. On formalise tout cela avec les notations de Dirac, qui sont très pratiques.

Extrêmement similaire à l'algèbre de prépa. Différences principales :

- La dimension est en général infinie (ne change pas grand chose en pratique)
- L'espace vectoriel est complexe (espace de Hilbert)
  Faire attention à bien passer au complexe conjugué quand il le faut
- Nouvelles notations ($|\phi\rangle$, $\langle\phi|$, ...). Très utiles, surtout en dimension infinie

Soit $\{|u_i\rangle\}_{i\in\mathbb{N}}$ une base orthonormée de l'espace de Hilbert

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$$

Note : Dans ce cours, toutes les bases seront orthonormées

Notation Dirac	Notation matricielle
ket $\|\phi\rangle = \sum_i \phi_i \|u_i\rangle$	vecteur colonne $\|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \\ \vdots \end{pmatrix}$
bra $\langle\phi\| = \sum_i \phi_i^* \langle u_i\|$	vecteur ligne $\langle\phi\| = (\phi_1^*, \phi_2^*, \dots, \phi_n^* \dots)$

Produit scalaire $\langle\phi|\psi\rangle = \sum_i \phi_i^* \psi_i$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_i \psi_i^* \phi_i = \langle\phi|\psi\rangle^*$$

Norme de $|\phi\rangle$: $\| |\phi\rangle \| = \sqrt{\langle\phi|\phi\rangle} = \sqrt{\sum_i |\phi_i|^2}$

Notation Dirac	Notation matricielle
opérateur $\hat{A} = \sum_{i,j} a_{ij} \|u_i\rangle\langle u_j\|$	matrice $\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & \ddots & \\ \vdots & & a_{mp} \cdots \\ & & \vdots \ddots \end{pmatrix}$

$\{|u_i\rangle\langle u_j|\}_{i,j \in \mathbb{N}}$ est une base des opérateurs.

En matriciel : $|u_i\rangle\langle u_j| = \begin{array}{r} \text{ième ligne} \end{array} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{c} \text{jème colonne} \\ \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots \end{pmatrix} \end{array} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & & \cdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \\ \vdots & 0 & 1 & 0 \cdots \\ \vdots & & 0 & \ddots \\ & & \vdots & \end{pmatrix}$

En particulier : - $\overset{\text{identité}}{\hat{I}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$ (relation de fermeture)

- Si $\hat{A}$ est une matrice diagonale dans $\{|u_i\rangle\}$ ($\Leftrightarrow$ si $\{|u_i\rangle\}$ est une base de vecteurs propres de $\hat{A}$)

Alors $\hat{A} = \sum_i \lambda_i \; |u_i\rangle\langle u_i|$

valeurs propres de $\hat{A}$

Calculer les coefficients d'un ket ou d'un opérateur :

* $|\phi\rangle = \sum_i \phi_i |u_i\rangle \rightsquigarrow \langle u_m|\phi\rangle = \sum_i \phi_i \langle u_m|u_i\rangle$

$\rightsquigarrow \langle u_m|\phi\rangle = \phi_m$

Au final $|\phi\rangle = \sum_i \langle u_i|\phi\rangle \; |u_i\rangle$

* $\hat{A} = \sum_{i,j} a_{ij} \, |u_i\rangle\langle u_j|$

$\rightsquigarrow \langle u_m|\hat{A}|u_p\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} \, \langle u_m|u_i\rangle\langle u_j|u_p\rangle$

$\rightsquigarrow \langle u_m|\hat{A}|u_p\rangle = a_{mp}$

Au final $\hat{A} = \sum_{i,j} \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle \; |u_i\rangle\langle u_j|$

En général deux opérateurs ne commutent pas :

$\hat{A}\hat{B}$ n'est pas toujours égal à $\hat{B}\hat{A}$

$\Leftrightarrow$ le commutateur $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ ne vaut pas forcément 0.

$\hat{A}^\dagger$ est l'opérateur adjoint (= conjugué hermitique) de $\hat{A}$.

Définition : $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle^* \quad \forall (\psi, \phi)$

Représentation matricielle : transposé + conjugué de $\hat{A}$

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots \\ a_{12}^* & \ddots & \\ \vdots & & \end{pmatrix}$$

i.e. $\hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} a_{ji}^* |u_i\rangle\langle u_j|$

Quelques relations utiles : $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$

$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$

Note : le conjugué hermitique d'un ket $|\phi\rangle$ est le bra $\langle\phi|$

Truc de calcul 1 : Passer n'importe quelle expression de Dirac au conjugué hermitique :

On remplace : - $\hat{A}$ par $\hat{A}^\dagger$ pour les opérateurs

- $|\phi\rangle$ par $\langle\phi|$ et $\langle\phi|$ par $|\phi\rangle$ pour les vecteurs

- c par c^* pour les complexes

et on inverse l'ordre des éléments

Exemple : $\hat{A} = \sum_{i,j} a_{ij} |u_i\rangle\langle u_j| \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} a_{ij}^* |u_j\rangle\langle u_i|$

Truc de calcul 2 : Tout se passe bien en notation de Dirac

Exemple : $|\varphi\rangle\langle\psi||\alpha\rangle$ peut se lire de manière équivalente

- l'opérateur $|\varphi\rangle\langle\psi|$ agit sur le ket $|\alpha\rangle$

- le ket $|\varphi\rangle$ est multiplié par le scalaire $\langle\psi|\alpha\rangle$

(i.e. $\langle\psi|\alpha\rangle |\varphi\rangle$)

Lien avec la physique

- L'état d'un système est représenté par un ket $|\phi\rangle$.

- A chaque grandeur physique on associe un opérateur auto-adjoint (= hermitien) appelé observable

Grandeur physique $A \rightsquigarrow$ opérateur $\hat{A}$ t.q. $\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$

Matriciellement cela veut dire que les coefficients diagonaux sont réels et que les coefficients non diagonaux sont complexes conjugués :

$$a_{ii} \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad a_{ij}^{*} = a_{ji}$$

<u>Résultat mathématique 1</u> : Il existe toujours une base orthonormée d'un opérateur auto-adjoint et ses valeurs propres sont réelles.

Si on note : - λ_i les valeurs propres
- $|\lambda_i\rangle$ les vecteurs propres

On peut décomposer n'importe quel ket sur la base des $|\lambda_i\rangle$:

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

Mesure en physique quantique

Si on effectue une mesure de A, on peut uniquement mesurer une de ses valeurs propres.

Si le système est dans l'état $|\phi\rangle$, la probabilité de mesurer λ_i est $|c_i|^2 = |\langle\lambda_i|\phi\rangle|^2$

(Si la valeur propre λ_i est dégénérée, la probabilité devient $\sum_{\substack{j \\ \text{t.q. } \lambda_i=\lambda_j}} |c_j|^2 = \sum |\langle\lambda_j|\phi\rangle|^2$)

Valeur moyenne de la mesure si le système est dans l'état $|\phi\rangle$:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle$$

Réduction du paquet d'onde : Immédiatement après la mesure, le système est projeté sur le vecteur propre correspondant à la valeur propre mesurée:

$$|\varphi\rangle_{\text{après}} = \underbrace{|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|}_{\text{projecteur sur } |\lambda_i\rangle} |\varphi\rangle_{\text{avant}} = c_i|\lambda_i\rangle \quad \Big(\underbrace{\frac{c_i}{|c_i|}|\lambda_i\rangle}_{\text{après renormalisat}^{\circ}} \Big)$$

Résultat mathématique 2 : Deux observables commutent si et seulement si il existe une base commune de diagonalisation.

Deux grandeurs physiques qui commutent sont dites compatibles