Chapitre VIII

Formalisme et notation de Dirac

Mécanique Quantique
2021-2022 – Semestre 5 – JUNIA ISEN Lille

David Mele
david.mele@junia.com

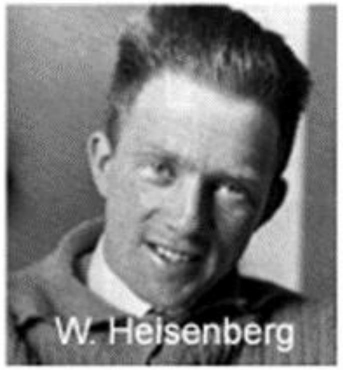
Le but de ce cours

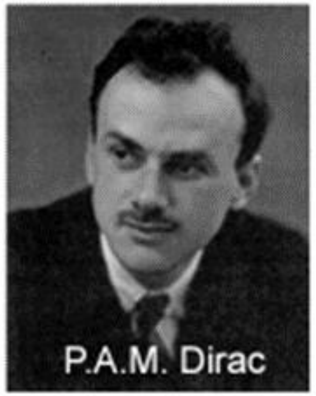
Dégager la structure géométrique de la théorie ondulatoire

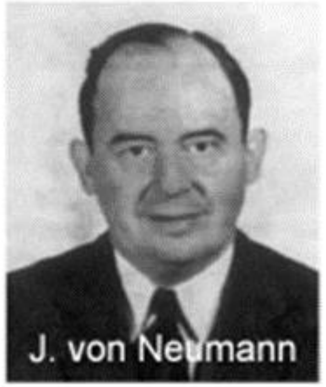
Remplacer l'évolution de fonctions d'onde complexes par des transformation de vecteurs

En déduire une formulation de la mécanique quantique valable pour n'importe quel objet, et pas seulement pour une particule ponctuelle

Formalisme adapté à la fois aux espaces de dimensions infinie (espace des fonctions, position, impulsion…) et aux espaces de dimensions finie (polarisation du photon par ex.).



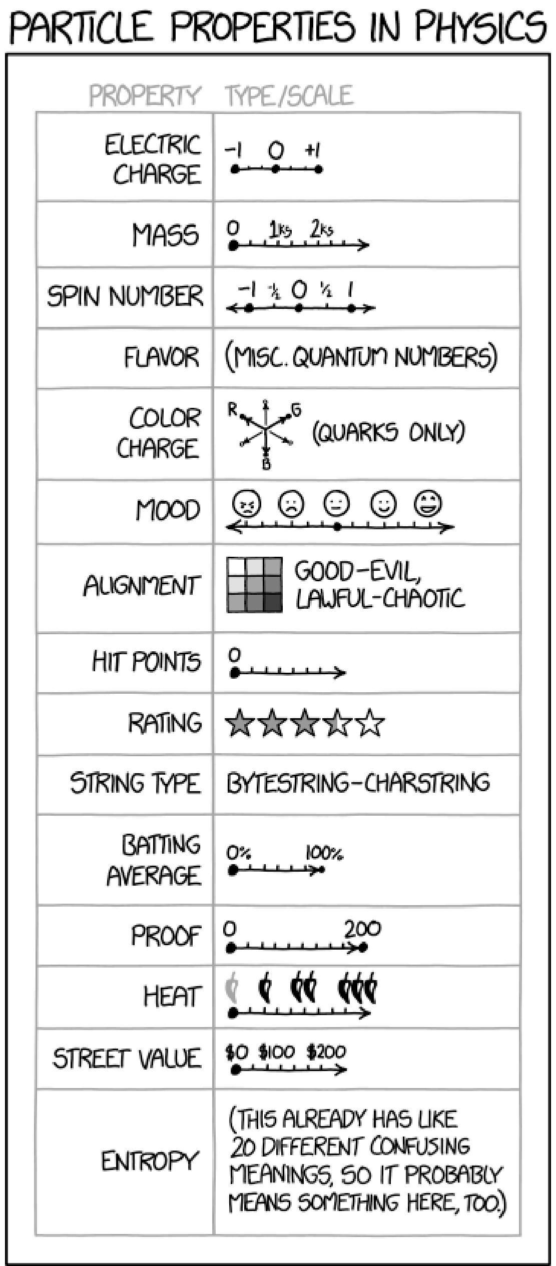




« La théorie quantique est un bel exemple qu'il est possible d'avoir compris un sujet en toute clarté, tout en sachant qu'on ne peut en parler qu'en images et paraboles »

Werner Heisenberg (1901 –1976)

VIII.1 Besoin d'un nouveau formalisme



VIII.1 Besoin d’un nouveau formalisme

A – Motivations

Depuis le début nous avons introduit la fonction d’onde $\Psi(x,t)$ pour décrire la probabilité de trouver la position (variable continue) d’une particule ponctuelle lors d’une mesure.

En réalité cette fonction d’onde transporte bien plus d’information et il est donc nécessaire d’introduire un nouveau formalisme pour aller au-delà et traiter:

- Des degrés de liberté qui se ramènent à une variable discrète

Charge d’une particule

$+$ ou $-$

Polarisation du photon

$\leftrightarrow$ ou $\updownarrow$

Spin de l’électron

$\uparrow$ up ou $\downarrow$ down

Etat d’un Qbit

0 ou 1

Saveur du neutrino

ν_e , ν_μ ou ν_τ

Couleur de charge des gluons

●, ● ou ●

Chat dans un boite

 mort ou  vivant?

Etat quelconque

A, B, C ou D

- Des systèmes à plusieurs particules

VIII.1 Besoin d'un nouveau formalisme

B – Rappels des chapitres précédents

Une **observable** est l'équivalent en mécanique quantique d'une grandeur physique en mécanique classique, comme la position, la quantité de mouvement, énergie cinétique ou potentielle, le spin, la polarisation, etc…

La probabilité pour les résultats de mesure d'une grandeur A est donnée par:

- Les états propres et valeurs propres de l'operateur $\hat{A}$ associé à l'observable A :

$$\boxed{\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x)}$$

(ex: $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$)

Les valeurs propres a_n sont les résultats de mesures possible

Les vecteurs propres ψ_n forme la base orthonormée des fonctions propres

- Pour tout ψ on une superposition d'états possibles on a:

$$\boxed{\psi(x) = \sum C_n\psi_n(x)}$$

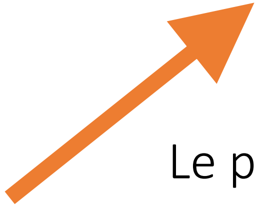
avec $\sum|C_n|^2 = 1$ et C_n coéfficient complexe

- La probabilité $P(a_n)$ de trouver le résultat a_n est:

$$\boxed{P(a_n) = |C_n|^2}$$

VIII.2 Notation de Dirac

A – Qu'est ce qu'un vecteur?



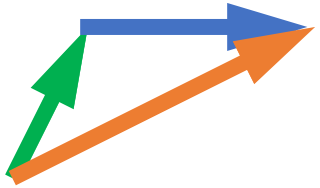
Le physicien

$\vec{V}$ ...et parfois $\boldsymbol{V}$ (en gras) ou v^{μ} (indice)

Le mathématicien

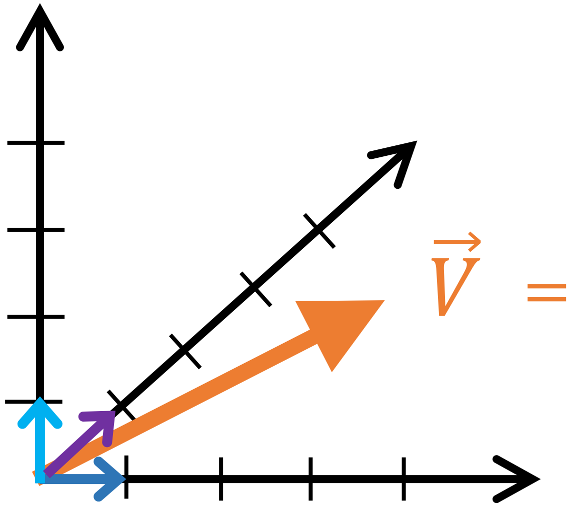
$$\begin{bmatrix}4\\2\\0\end{bmatrix}$$

L'informaticien



$$\vec{V} + \vec{W} = \begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}3\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}4\\2\end{bmatrix}$$

$\mathbb{R}^3$



$$\vec{V} = \begin{bmatrix}4\\2\\0\end{bmatrix} = \mathbf{4}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix} + \mathbf{2}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix} + \mathbf{0}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

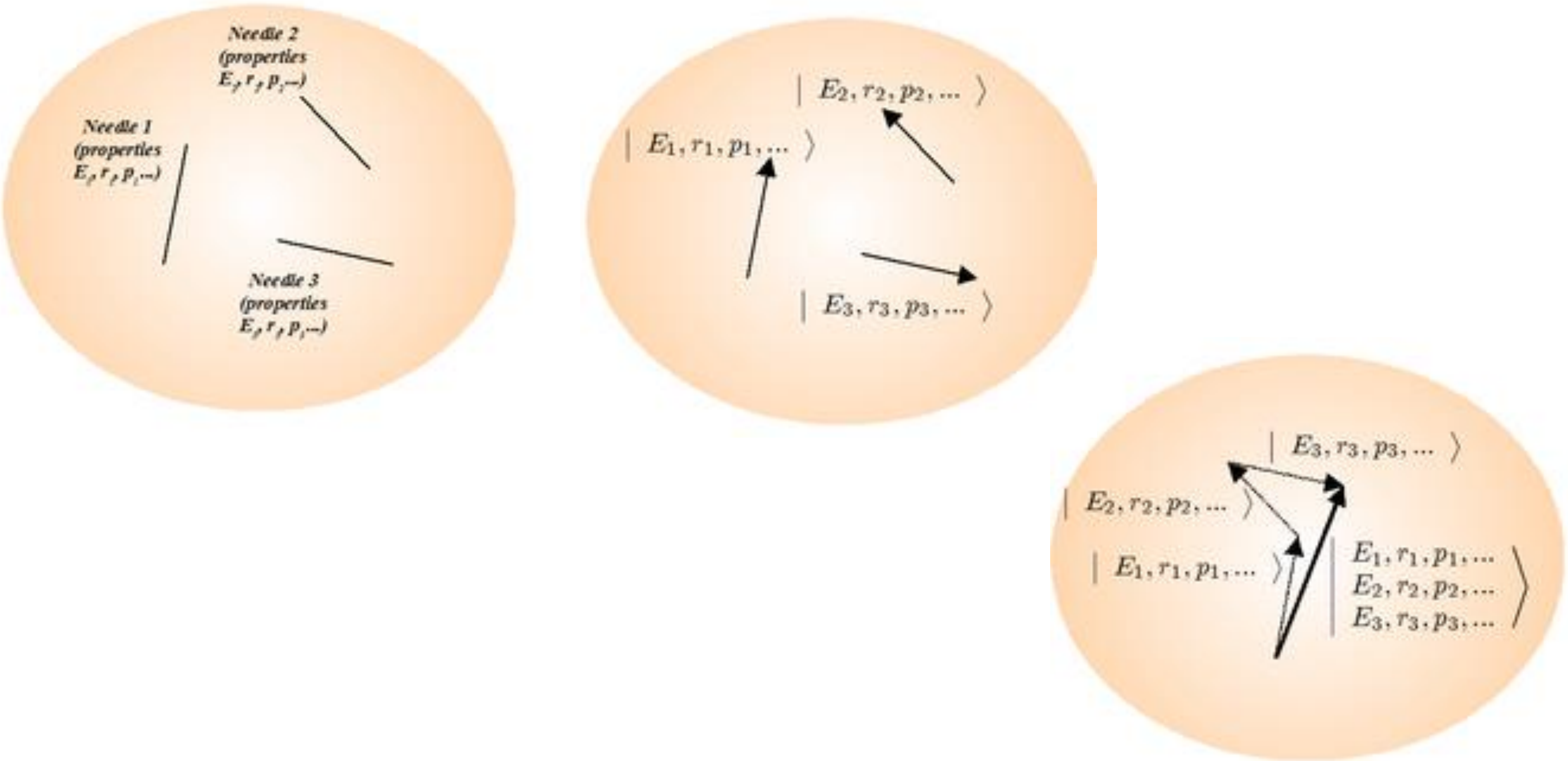
« All we do is draw little arrows… »

Richard P. Feynman, 1985

Moi aussi je suis un vecteur !

$|V\rangle$

Le quanticien



Needle 2
(properties
E, r, p,...)
Needle 1
(properties
E, r, p,...)
Needle 3
(properties
E, r, p,...)
$| E_2, r_2, p_2, \ldots \rangle$
$| E_1, r_1, p_1, \ldots \rangle$
$| E_3, r_3, p_3, \ldots \rangle$
$| E_3, r_3, p_3, \ldots \rangle$
$| E_2, r_2, p_2, \ldots \rangle$
$| E_1, r_1, p_1, \ldots \rangle$
$\left| \begin{matrix} E_1, r_1, p_1, \ldots \\ E_2, r_2, p_2, \ldots \\ E_3, r_3, p_3, \ldots \end{matrix} \right\rangle$

VIII.2 Notation de Dirac

B – Le vecteur d'état ket

Tout **état quantique** d'une particule sera caractérisé par une **vecteur d'état.**

Ce vecteur d'état se note: $|\ \rangle$ qu'on appelle ***vecteur-ket*** ou simplement ***ket***

En notation de Dirac, la fonction d'onde complexe $\boldsymbol{\psi(\vec{r})}$ peut par exemple se réécrire sous la forme d'un vecteur d'état ket : $|\boldsymbol{\psi}\rangle$

notation de Dirac

fonction complexe

Les ket se représentent (comme les vecteurs dans $\mathbb{R}^3$) sous forme d'une **matrice colonne.**

Ex: $|\boldsymbol{A}\rangle = \begin{pmatrix} 1+2i \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ ou plus généralement $\boxed{|\boldsymbol{V}\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}}$ ***ket***

VIII.2 Notation de Dirac

C – Espace d'Hilbert

Les vecteurs d'état appartiennent à un espace vectoriel abstrait ε_H ou $\mathcal{H}$ (espace d'Hilbert de dimension infinie ou finie) appelé espace des états dans lesquels la base orthonormé sont aussi des fonctions réels ou complexes.

D – Propriétés des vecteurs ket

Comme pour les vecteurs dans un espace $\mathbb{R}^3$ il est possible d'additionner plusieurs vecteurs kets.

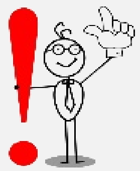
$$|\boldsymbol{A}\rangle + |\boldsymbol{B}\rangle = |\boldsymbol{C}\rangle$$

Ex: $|\boldsymbol{a}\rangle + |\boldsymbol{b}\rangle = \begin{pmatrix} 1+2i \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -i\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4+2i \\ 3 \\ -i\sqrt{2} \end{pmatrix}$ ou $2|\boldsymbol{C}\rangle = \mathbf{2}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2C_1 \\ 2C_2 \\ 2C_3 \\ 2C_4 \end{pmatrix}$

Le vecteur ket étant une fonction il est possible d'écrire des kets de la forme:

$$|\boldsymbol{D}(t)\rangle = (-\mathbf{1} + \mathbf{2}\boldsymbol{i})\ |\boldsymbol{E}(t)\rangle \qquad |\boldsymbol{Y}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{e}^{-\boldsymbol{x}^2}\ |\boldsymbol{x}\rangle \boldsymbol{dx}$$

VIII.2 Notation de Dirac



Attention le produit de 2 matrices n'est pas toujours commutatif

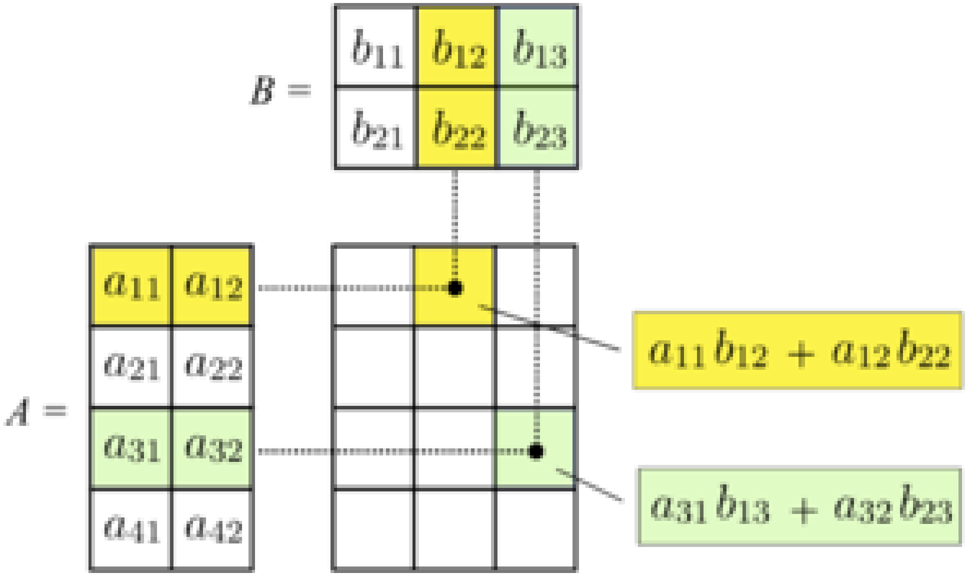
AB ≠ BA

E – Propriétés des vecteurs ket

Le problème se pose quand l'on veut faire le produit scalaire de 2 kets $|\boldsymbol{A}\rangle . |\boldsymbol{B}\rangle$

Un produit scalaire doit donner un scalaire (un nombre).

Mais pour faire le produit de deux matrices il faut que le nombre de colonnes de la matrice A soit égale au nombre de lignes de la matrice B.



Or est impossible de d'obtenir le produit scalaire de 2 matrices d'une colonne à n lignes.

Pour faire le produit scalaire de 2 kets (de même dimension) il faut donc transformer un des vecteurs colonne en vecteur ligne et pour ça introduire la transposée du conjugué complexe $\overline{|\boldsymbol{A}\rangle}^{\boldsymbol{T}} = |\boldsymbol{A}\rangle^{\dagger}$ ou $|\boldsymbol{A}\rangle^{*}$

VIII.2 Notation de Dirac

F – Dualité et vecteur-bra

Pour définir le produit scalaire on préfère un introduire un nouveau symbole dual (sous forme d'une matrice ligne) que l'on nomme le vecteur-*bra* ou ***bra*** et se note: $\langle \quad |$

Soit un vecteur ket U alors
Et inversement soit un bra U alors

$$\boxed{\begin{array}{l} |\boldsymbol{U}\rangle \rightarrow |\boldsymbol{U}\rangle^* = \langle \boldsymbol{U}| \\ \langle \boldsymbol{U}| \rightarrow \langle \boldsymbol{U}|^* = |\boldsymbol{U}\rangle \end{array}}$$

Relation de conjugaison dite hermitique

si un ket s'écrit $|U\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$

alors son bra associé s'écrit

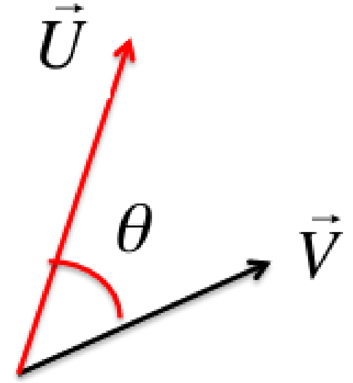
$$\boxed{\langle U| = \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \dots & b_n^* \end{pmatrix}}$$

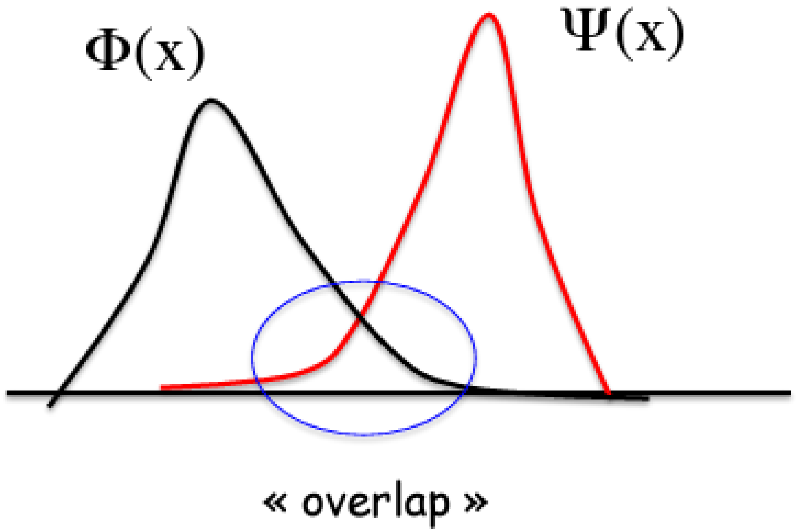
bra

Si $|\boldsymbol{U}\rangle$ est un vecteur de l'espace d'Hilbert ε_H, le vecteur-bra $\langle \boldsymbol{U}|$ est un vecteur de l'**espace dual** $\boldsymbol{\varepsilon_H^*}$ car à la différence c'un vecteur dans $\mathbb{R}^3$, U est ici une fonction complexe

Produit scalaire

2 vecteurs ⟷ 2 fonctions d'onde





$$\vec{U}.\vec{V} = \|\vec{U}\|.\|\vec{V}\|\cos\theta$$

$$\int dx\ \Phi^*(x)\ \Psi(x) = \langle \Phi | \Psi \rangle$$

VIII.2 Notation de Dirac

G – Produit scalaire hermitien

Soit 2 kets $|\boldsymbol{U}\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ et $|\boldsymbol{V}\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$ où $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{b}$ sont des nombres complexes

Il est maintenant possible d'établir le produit scalaire **dit hermitique de U par V** tel que:

$$\boxed{\langle \boldsymbol{U}|.|\boldsymbol{V}\rangle = \langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle}$$

Le produit bra-ket, « bracket » signifie crochet en anglais

Transposée de la matrice colonne U

$$\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle = \overbrace{(b_1^* \quad b_2^* \quad \ldots \quad b_n^*)} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$= b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \ldots + b_n^* a_n$$

Complexe conjugué des éléments de U

Qui est bien un scalaire

$\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle = \sum \boldsymbol{b_i^* a_i}$ en dimension finie

$\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle = \int \boldsymbol{U^*(x)V(x)dx}$ en dimension infinie

VIII.2 Notation de Dirac

H – Linéarité et non linéarité

Considérons deux nombres complexes $\boldsymbol{\lambda}$ et $\boldsymbol{\gamma}$ et 2 kets quelconques $|\boldsymbol{U}\rangle$ et $|\boldsymbol{V}\rangle$

- Il y a linéarité à droite (sur les kets)

$$\boxed{|\boldsymbol{\lambda V}\rangle + |\boldsymbol{\gamma U}\rangle = \boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{V}\rangle + \boldsymbol{\gamma}|\boldsymbol{U}\rangle}$$

Pour $|\boldsymbol{\lambda V}\rangle = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \vdots \\ \lambda a_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \lambda|\boldsymbol{V}\rangle$

- Il y a non-linéarité à gauche (sur les bra)

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\lambda V}| + \langle\boldsymbol{\gamma U}| = \boldsymbol{\lambda}^*\langle\boldsymbol{V}| + \boldsymbol{\gamma}^*\langle\boldsymbol{U}|}$$

Pour $\langle\boldsymbol{\lambda V}| = (\boldsymbol{\lambda}^* a_1^* \quad \boldsymbol{\lambda}^* a_2^* \quad \ldots \quad \boldsymbol{\lambda}^* a_n^*)$

$= \boldsymbol{\lambda}^* \, (a_1^* \quad a_2^* \quad \ldots \quad a_n^*)$

$= \boldsymbol{\lambda}^* \, \langle\boldsymbol{V}|$

VIII.2 Notation de Dirac

H – Linéarité et non linéarité

D'après la relation de conjugaison on peut montrer que le produit de $|\boldsymbol{U}\rangle$ par $|\boldsymbol{V}\rangle$ n'est pas le même que $|\boldsymbol{V}\rangle$ par $|\boldsymbol{U}\rangle$:

Posons le produit scalaire : $\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle = |\boldsymbol{U}\rangle^{*}|\boldsymbol{V}\rangle$

$$= |\boldsymbol{U}\rangle^{*}\langle \boldsymbol{V}|^{*}$$

$$\boxed{\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle = \langle \boldsymbol{V}|\boldsymbol{U}\rangle^{*}}$$

Comme dans le cas des matrices, l'ordre du produit scalaire à son importance

$$\langle \boldsymbol{U}|\boldsymbol{V}\rangle \neq \langle \boldsymbol{V}|\boldsymbol{U}\rangle$$

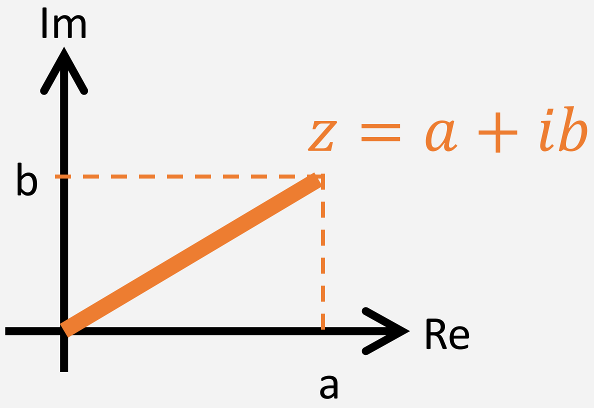
VIII.2 Notation de Dirac

I – Norme

Un ket représente l'état d'un système physique, il a une existence propre. Le vecteur dual (ou bra) lui n'existe que pour calculer des produits scalaires.

L'intêret de réaliser des produits scalaires est que l'on peut maintenant calculer la norme de notre vecteur d'état et la représenter sur une base.

Dans un espace complexe



La norme de z est donc $\|z\|^2 = z.\bar{z}$

Dans l'espace d'Hilbert

De même la norme d'un vecteur ket U se note:

$$\|U\|^2 = |U\rangle^* . |U\rangle$$

$$\|U\|^2 = \langle U|U\rangle \qquad \text{Norme de U}$$

$$\|U\|^2 = \sum_{i=1}^{N} |a_i|^2$$

La norme d'un ket est forcement réelle (car elle a une existence physique) donc $\langle U|U\rangle = \langle U|U\rangle^* \in \mathbb{R}$:

VIII.2 Notation de Dirac

J – Base

Il faut maintenant représenter le vecteur ket dans une base.

La base $\underbrace{\text{orthonormée}}$ de l'espace de Hilbert se définit comme:

Les vecteurs unitaires sont
orthogonaux et ont une norme de 1

Dans l'espace d'Hilbert

$$\langle \boldsymbol{u_i} | \boldsymbol{u_j} \rangle = \boldsymbol{\delta_{ij}} \quad \begin{cases} = 0 \; si \; i \neq j \\ = 1 \; si \; i = j \end{cases}$$

Vecteurs unitaires

$\boldsymbol{\delta_{ij}}$: symbole de Kronecker

Si $i = j$ alors $\langle u_i | u_i \rangle = 1$ (normé)

Si $i \neq j$ alors $\langle u_i | u_j \rangle = 0$ (orthogonalité)

Exemple de vecteurs unitaires dans la base de Hilbert:

$$|u_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$ ← i^{ème} ligne

$$|u_j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$ ← j^{ème} ligne

$$|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} e^{ix} \\ e^{i2x} \\ e^{i3x} \\ e^{i4x} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Vecteurs unitaires plus
compliqués mais possibles

Car $\langle u_m | u_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{\pi}^{\pi} e^{-imx} e^{inx} \, dx$

$$\langle u_n | u_n \rangle = \begin{cases} \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{\pi}^{\pi} dx = 1 \; si \; n = m \\ \dfrac{1}{2\pi i(n-m)} \left[e^{i(n-m)x} \right]_{-\pi}^{\pi} = 0 \; si \; n \neq m \end{cases}$$

VIII.2 Notation de Dirac

J – Représentation sur une base discrète (projection)

Il existe deux type de base:

Bases discrètes

Ces bases sont formées de N vecteurs $|u_i\rangle$ orthonormées défini comme précédemment:

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

Ce qui revient à dire que les vecteurs unitaires sont orthogonaux 2 à 2 et normé si i=j

Chaque vecteurs unitaires $|u_i\rangle$ correspond à un état propre du vecteur d'état (ou état possible du système)

VIII.2 Notation de Dirac

J – Représentation sur une base discrète (projection)

Bases discrètes

Supposons que vous voulez décomposer $|\psi\rangle$ sur les vecteurs unitaires $|u_i\rangle$.

Si chaque vecteur $|u_i\rangle$ est un état possible de $|\psi\rangle$ alors $|\psi\rangle$ est dans une superposition d'état tel que:

$$|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle + \cdots + c_N|u_N\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{c_i}|u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle \boldsymbol{u_i}|\boldsymbol{\psi}\rangle |u_i\rangle$$

avec $\langle \boldsymbol{u_i}|\boldsymbol{\psi}\rangle = \boldsymbol{c_i}$ est la projection du ket de $\boldsymbol{\psi}$ sur un vecteur unitaire $|\boldsymbol{u_i}\rangle$

VIII.2 Notation de Dirac

J – Représentation sur une base discrète (projection)

Bases discrètes

Si je pose maintenant $\langle \boldsymbol{u_j} | \boldsymbol{\psi} \rangle$ pour avoir la projection de $|\psi\rangle$ sur un autre vecteur unitaire $|\boldsymbol{u_j}\rangle$ orthogonal à $|u_i\rangle$

$$\langle u_j | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle u_j | c_i | u_i \rangle$$

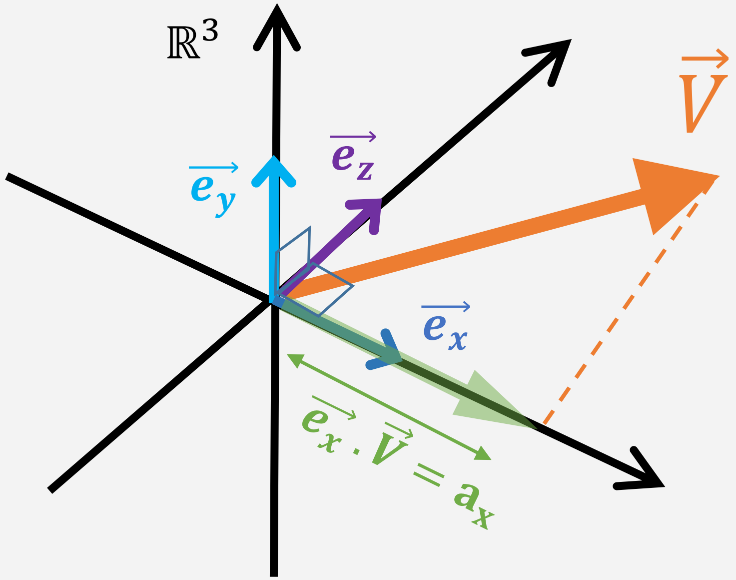
$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i \langle u_j | u_i \rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i \delta_{ij} \begin{cases} = 0 \ si \ i \neq j \\ = c_j \ si \ i = j \end{cases}$$

On retrouve le fait la projectionde $\boldsymbol{\psi}$ sur un vecteur unitaire $|\boldsymbol{u_j}\rangle$ tel que $\langle \boldsymbol{u_j} | \boldsymbol{\psi} \rangle = \boldsymbol{c_j}$

VIII.2 Notation de Dirac

J – Projection sur une base discrète



$$\vec{V} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = a_x\vec{e_x} + a_y\vec{e_y} + a_z\vec{e_z}$$

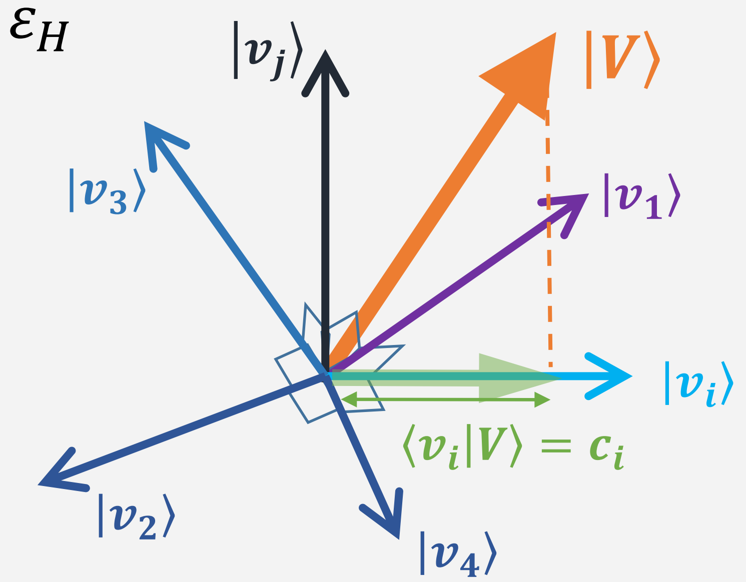
$$= \vec{e_x}\,.\,\vec{V}\,.\,\vec{e_x} + \vec{e_y}\,.\,\vec{V}\,.\,\vec{e_y} + \vec{e_z}\,.\,\vec{V}\,.\,\vec{e_z}$$

$$= \sum \vec{e_i}\,.\,\vec{V}\,.\,\vec{e_i}$$

Avec $a_i = \vec{e_i}\,.\,\vec{V}$ et $\vec{e_x}\,.\,\vec{e_y} = 0$ *alors* $\vec{e_x} \perp \vec{e_y}$ *(orthogonal)*

$\vec{e_x}\,.\,\vec{e_x} = \|\vec{e_x}\| = 1$ *(normé)*

$\equiv$



$$|V\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} = c_1|v_1\rangle + \cdots + c_i|v_i\rangle + \cdots + c_N|v_N\rangle$$

$$= \langle v_1|V\rangle|v_1\rangle + \cdots + \langle v_i|V\rangle\,|v_i\rangle + \cdots + \langle v_N|V\rangle\,|v_N\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \langle v_i|V\rangle\,|v_i\rangle$$

Avec $c_i = \langle v_i|V\rangle$ et $\langle v_i|v_j\rangle = 0$ alors $|v_i\rangle \perp |v_j\rangle$ *(orthogonal)*

$\langle V|V\rangle = \|V\|^2 = \sum_{i=1}^{N}|c_i|^2 = 1$ *(norme)*

VIII.2 Notation de Dirac

K – Relation de fermeture

Bases discrètes

Les relations précédentes permettent de définir ce que l'on appelle la relation de fermeture et qui permet de définir la base .

$$\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \qquad |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i |u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} (\langle u_i|\psi\rangle)|u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle(\langle u_i|\psi\rangle)$$

Je suis libre de déplacer ma parenthèse

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} (|u_i\rangle\langle u_i|)\,|\psi\rangle$$

Comme $|\psi\rangle = |\psi\rangle$ je peux écrire

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle$$

$$\boldsymbol{\sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}}$$

avec $\mathbb{1}$ ou $\hat{I}$ ou encore $\mathbb{I}$ la matrice identité

relation de fermeture

(ou relation de complétude)

$$\sum_{i=1}^{3} |u_i\rangle\langle u_i| = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix} = \mathbb{1}$$

VIII.2 Notation de Dirac

K – Relation de fermeture

- Pour décomposer un ket $|\psi\rangle$ dans une base quelconque, il suffit d'introduire la relation de fermeture correspondant à cette base

$$\mathbb{1}|\psi\rangle = \left(\sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle u_i|\psi\rangle\, |u_i\rangle$$

Cette astuce est terriblement efficace en pratique car l'on peut insérer une relation de fermeture où l'on souhaite et faire apparaitre des composantes ou des éléments de matrices dans les expressions.

- Grace à la relation de fermeture on peut aussi écrire un opérateur linéaire sous sa forme matricielle en le décomposant dans une base choisie.

Il suffit d'insérer deux relations de fermeture (avec des indices différents) sur la base à droite et à gauche de l'opérateur:

$$\boldsymbol{\hat{A}} = \mathbb{1}\boldsymbol{\hat{A}}\mathbb{1} = \left(\sum_{i=1}^{N} |\boldsymbol{u_i}\rangle\langle \boldsymbol{u_i}|\right)\boldsymbol{\hat{A}}\left(\sum_{j=1}^{N} |\boldsymbol{u_j}\rangle\langle \boldsymbol{u_j}|\right) = \boxed{\boldsymbol{\hat{A}} = \sum_{i,j=1}^{N} \boldsymbol{a_{i,j}}|\boldsymbol{u_i}\rangle\langle \boldsymbol{u_j}|}$$

Voir TD7
et chapitre VII.5 sur les opérateurs

VIII.2 Notation de Dirac

L – Généralisation au bases continues

Bases continues

Pour les besoins de la physique, il est indispensable de définir des bases continues plutôt que discrètes (position d'une particule par exemple).

Dans ce cas on remplace les sommes sur les indices discret i par des intégrales sur une variable continue que l'on peut appeler α

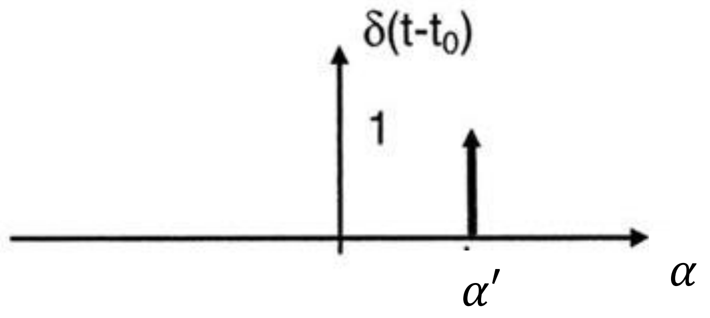
$$\sum_{i=1}^{N} \rightarrow \int d\alpha$$

L'orthogonalité de deux vecteurs 2 à 2 se définit alors par :

$$\langle \boldsymbol{w}_{\boldsymbol{\alpha}} | \boldsymbol{w}_{\boldsymbol{\alpha}'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

Cette fonction est le « delta » de Dirac

$$\boxed{\delta(\alpha - \alpha') = 1 \; si \; \alpha = \alpha' \quad \text{et 0 ailleurs}}$$



VIII.2 Notation de Dirac

L – Généralisation au bases continues

Bases continues

Si l'état de $|\psi\rangle$ est dans un état superposé dans une base continue de vecteurs unitaires $|w_\alpha\rangle$

$$|\psi\rangle = \int \boldsymbol{c_\alpha} |w_\alpha\rangle \, d\alpha \qquad \text{avec } c_\alpha = \langle w_\alpha | \psi \rangle$$

Et de même si je projette sur un autre vecteur unitaire $|w_{\alpha'}\rangle$ (orthogonal à $|w_\alpha\rangle$) :

$$\langle w_{\alpha'} | \psi \rangle = \int c_\alpha \langle w_{\alpha'} | w_\alpha \rangle d\alpha$$

$$\langle w_{\alpha'} | \psi \rangle = \int c_\alpha \delta(\alpha - \alpha') d\alpha$$

$$\langle w_{\alpha'} | \psi \rangle = c_{\alpha'}$$

Et je peux redéfinir une nouvelle relation de fermeture:

$$\int |w_{\alpha'}\rangle \langle w_\alpha| \, d\alpha = \mathbb{1}$$

VIII.2 Notation de Dirac

M – Résumé

ket $|V\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix} \leftrightarrow |V\rangle^* = \langle V| = (\dots \quad a_i^* \quad \cdots)$ bra

bra $\langle U| = (\dots \quad b_i^* \quad \cdots) \leftrightarrow \langle U|^* = |U\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ b_i \\ \vdots \end{pmatrix}$ ket

Relation de conjugaison

Produit scalaire

$$\langle U|V\rangle = \langle V|U\rangle^* = \sum_{i=1}^{N} b_i^* a_i \geq 0$$

$$\langle V|V\rangle = \|V\|^2 = \sum_{i=1}^{N} |a_i|^2$$

$\langle V|V\rangle = 0$ alors $|V\rangle = 0$

$\langle U|V\rangle = 0$ alors $|V\rangle \perp |U\rangle$

Premier Postulat (état quantique) :

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

$$\langle U|c_1V_1 + c_2V_2\rangle = c_1\langle U|V_1\rangle + c_2\langle U|V_2\rangle$$ Linéarité

$$\langle c_1U_1 + c_2U_2|V\rangle = c_1^*\langle U_1|V\rangle + c_2^*\langle U_2|V\rangle$$ Anti-linéarité

Si $|U\rangle = c_1|u_1\rangle + \cdots c_i|u_i\rangle + \cdots c_N|u_N\rangle$

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \begin{cases} = 0 \ si \ i \neq j \\ = 1 \ si \ i = j \end{cases}$$

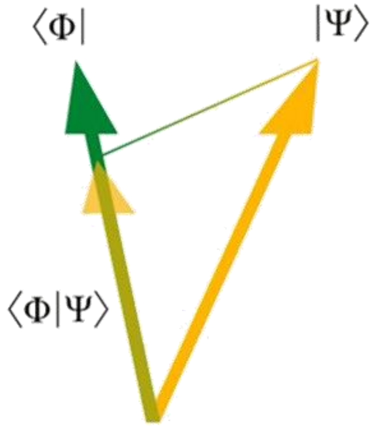
Base orthonormale

$$\sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$$

Relation de fermeture

$$|U\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle u_i|U\rangle\, |u_i\rangle$$

Projection sur les vecteurs unitaires



VIII.2 Notation de Dirac

M – Résumé

Récapitulatif

$\begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$ Ket $|\ \ \rangle$

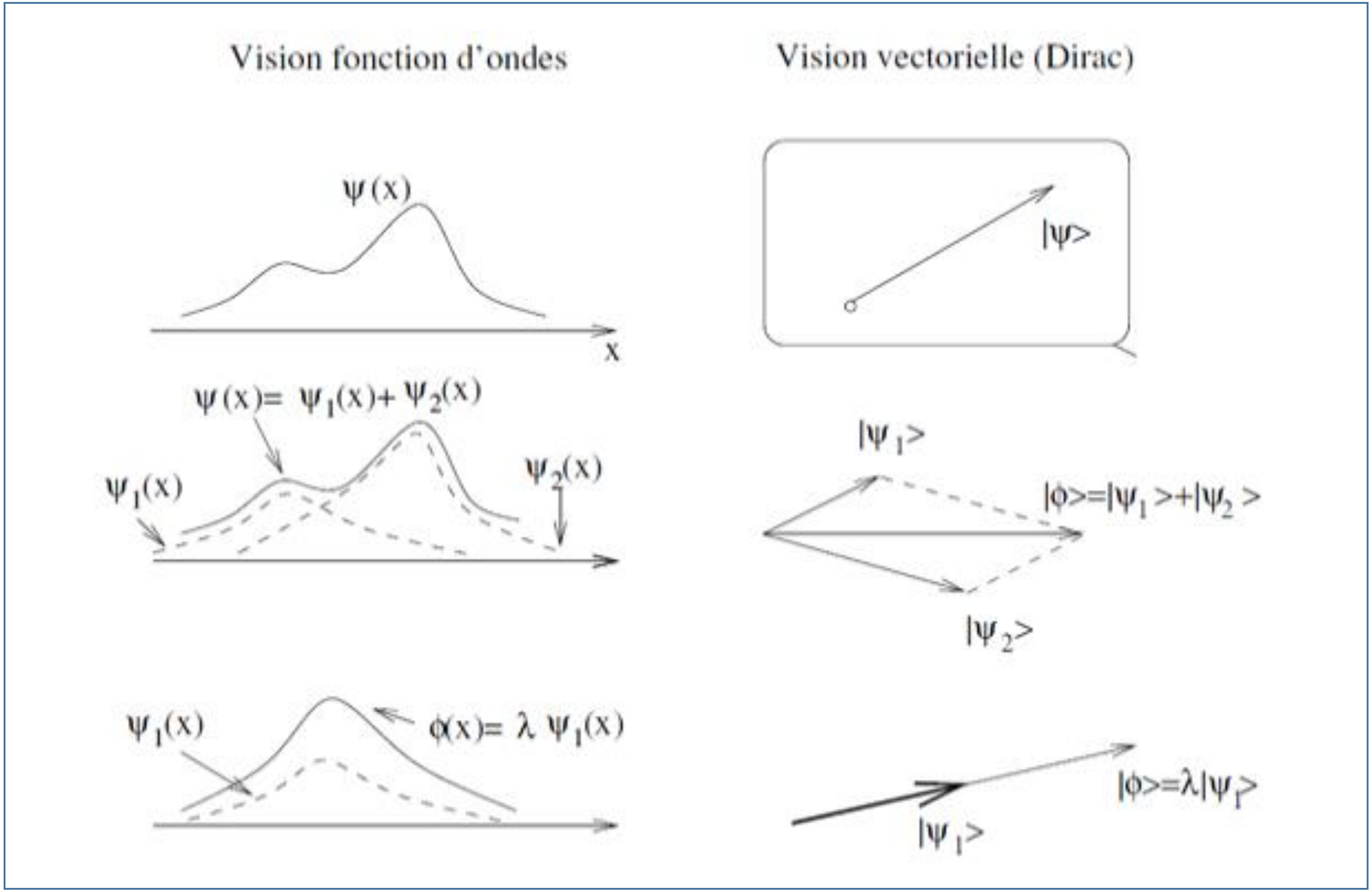
$\begin{pmatrix} & & \end{pmatrix}$ Bra $\langle\ \ |$

$\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$ Opérateur $\boldsymbol{A}$

$\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$ $\boldsymbol{AB=C}$

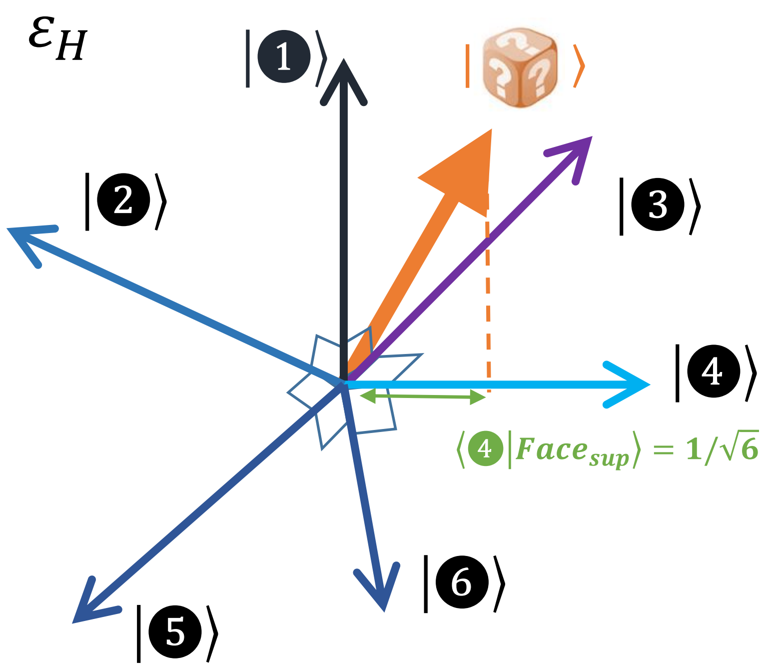
$\begin{pmatrix} & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix} = \lambda$ $\langle\ \ |\ \ \rangle =$ scalaire

$\begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$ $|\ \ \rangle\langle\ \ | =$ opérateur


Vision fonction d'ondes
Vision vectorielle (Dirac)
ψ(x)
x
|ψ>
ψ(x)= ψ1(x)+ ψ2(x)
ψ1(x)
ψ2(x)
|ψ1>
|φ>=|ψ1>+|ψ2>
|ψ2>
ψ1(x)
φ(x)= λ ψ1(x)
|φ>=λ|ψ1>
|ψ1>

VIII.3 Exemples

A – Le dé quantique



Imaginons un dé microscopique. Réaliser une mesure sur ce dé consiste à lire le numéro inscrit sur la face supérieure du dé.
Soit Â l'observable liée à cette mesure.

Soit $|\ \rangle$ l'état du dé dans un espace de Hilbert de dimension 6 où les vecteurs propres $|i\rangle$ forment la base orthonormée des fonctions propres (solutions stationnaires).

Il existe 6 valeurs propres et 6 fonctions propres possibles où chaque face a une probabilité d'1/6 d'être mesurée (dé non pipé).

Tant que la mesure n'a pas été faite, il faut donc considérer l'état du dé quantique dans une superposition de tous les résultats possibles, l 'état du système $|\ \rangle$ est donc: :

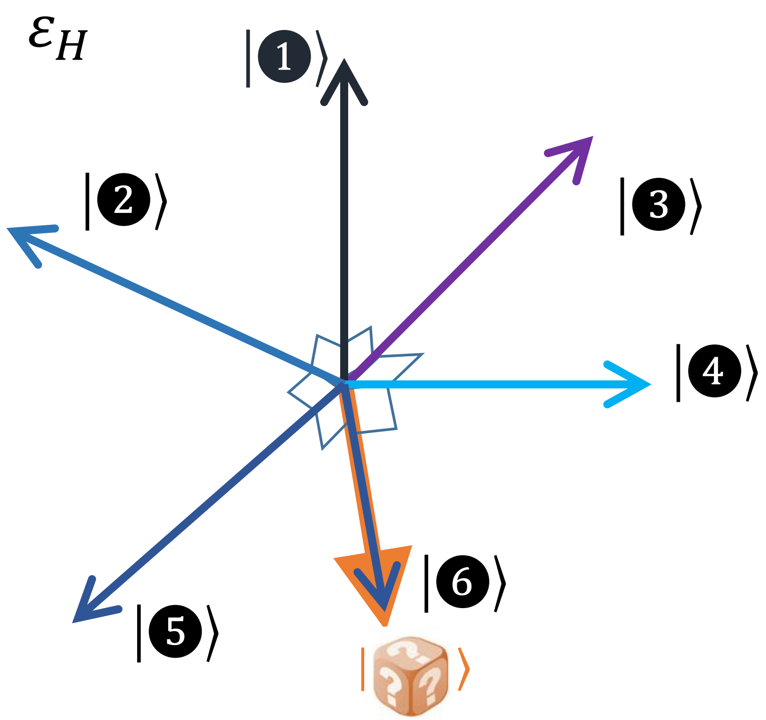
$$|\ \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|1\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|2\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|3\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|4\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|5\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|6\rangle$$

(ex: la probabilité d'observer 4 est $\mathrm{P}(4) = \left|\frac{1}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{6}$)

Et on vérifie que la probabilité de mesurer au moins une de ces 6 faces est bien de 100%: $\|\ \|^2 = \sum_{i=1}^{N} |b_i|^2 = 6 \times \left|\frac{1}{\sqrt{6}}\right|^2 = 1$

VIII.3 Exemples

A – Le dé quantique



La mesure donne un résultat et un seul!

Après la mesure, le système se trouve dans un des états propres associés à cette mesure, avec un coefficient de 1.
Si on a vu la face **6** alors :

$$|\ \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|❶\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|❷\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|❸\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|❹\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|❺\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|❻\rangle$$

$$|\ \rangle = \mathbf{1}\,|❻\rangle$$

Après cette mesure, toute mesure ultérieure de la face supérieure donnera toujours le même résultat.

C'est ce que l'on appelle la réduction du paquet d'ondes (ou décohérence).

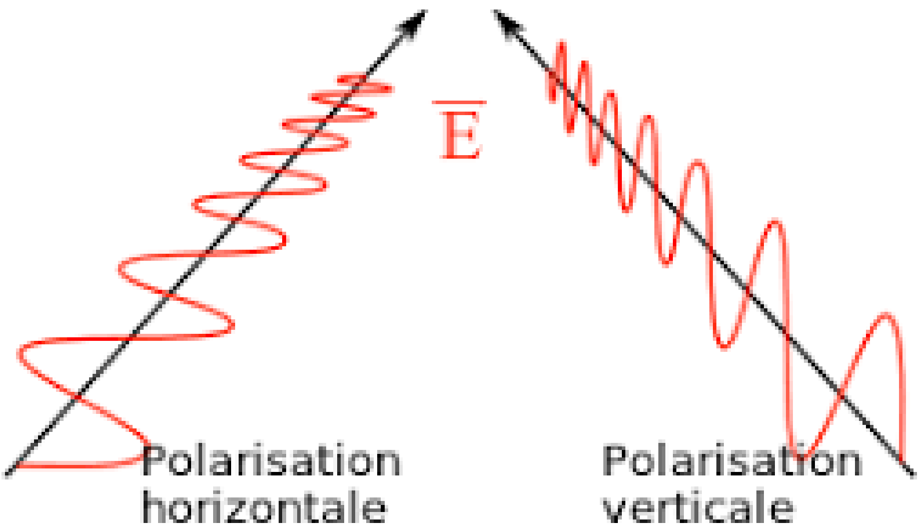
En mécanique quantique toute mesure a un effet potentiel sur le système mesuré car elle modifie obligatoirement la forme mathématique de la fonction d'onde.

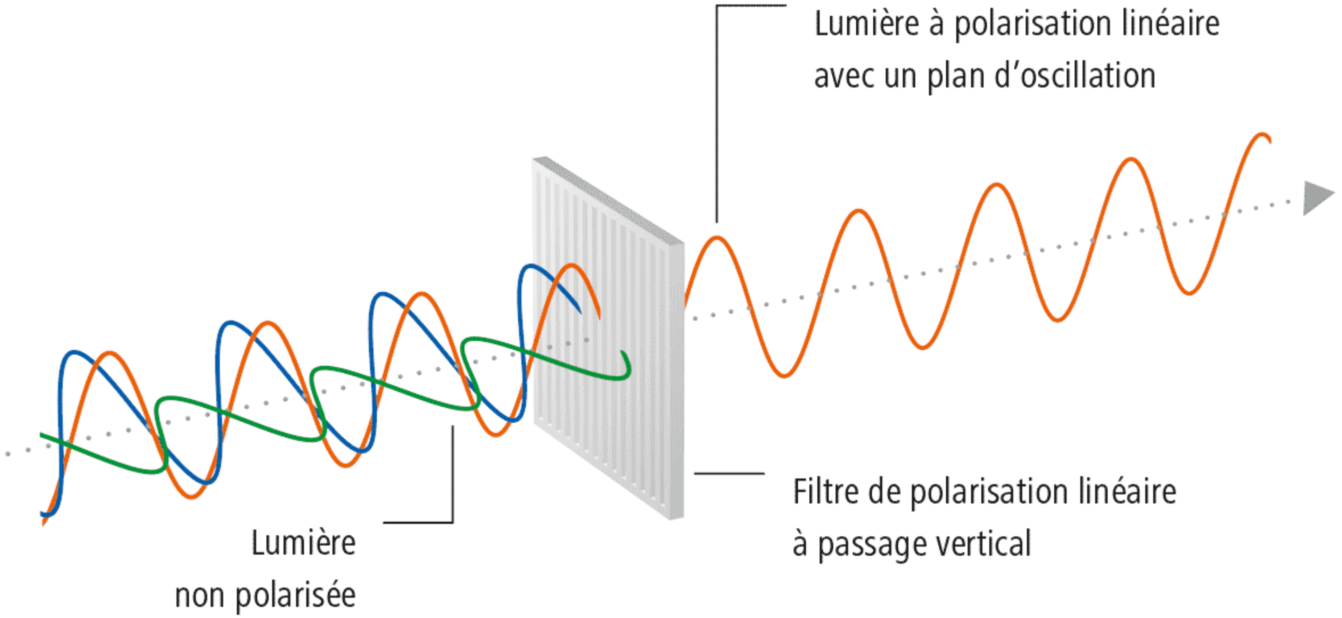
VIII.3 Exemples

B – polarisation d'un photon

Comme pour le champ électromagnétique, on peut définir la polarisation (direction du champs électrique) des photons lorsqu'ils sont émis un par un.

C'est un degré de liberté supplémentaire (longueur, d'onde, direction…)





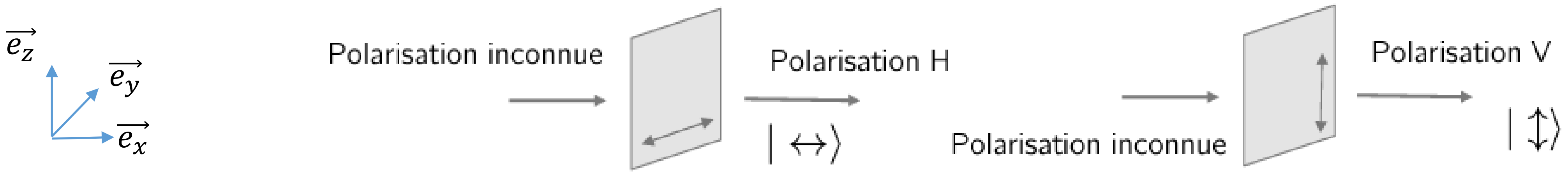
VIII.3 Exemples

B – polarisation d’un photon

- Un appareil ne peut «mesurer» que 2 résultats (propres): polarisation verticale ou horizontale.

- Les 2 états de polarisation sont les états propres du photon. A chacun des résultats de mesure correspond 1 état propre et un seul du photon (non dégénéré).

- Pour une photon se propageant dans le vide vers la droite ($x > 0$), on définit une base fait des vecteurs $|\leftrightarrow\rangle$ et $|\updownarrow\rangle$ qui sont les deux choix possible pour la polarisation du photon tel que :



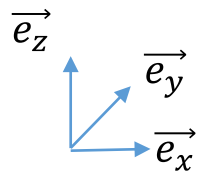
Notation classique vectorielle $\vec{E} = \vec{E}_H = E.\overrightarrow{e_y}$ $\vec{E} = \vec{E}_V = E.\overrightarrow{e_z}$

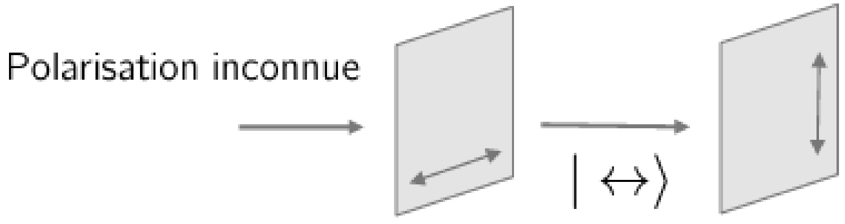
Notation de Dirac: $|E\rangle = |\leftrightarrow\rangle$ $|E\rangle = |\updownarrow\rangle$

VIII.3 Exemples

B – polarisation d'un photon

- On remarque que cette base est orthonormé:



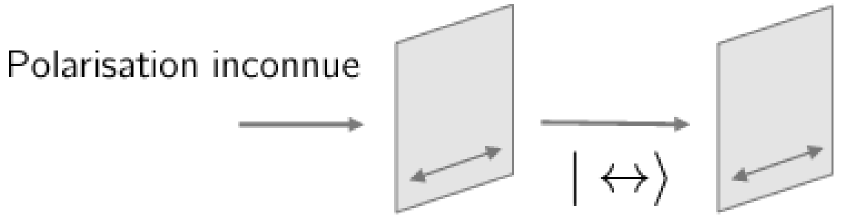


Rien ne sort!

$\langle\leftrightarrow|\updownarrow\rangle = 0$

orthogonalité

$$\vec{e_y}.\vec{e_z} = 0$$



Tout passe!

$\langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = 1$

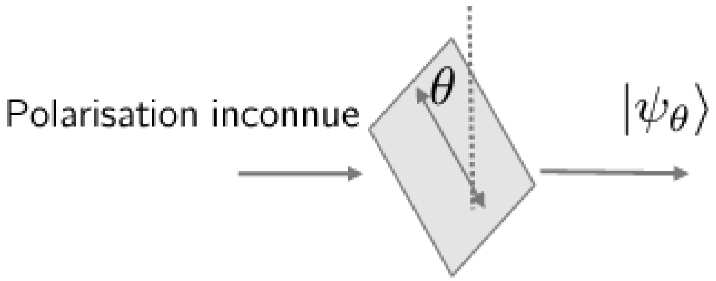
$\langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1$

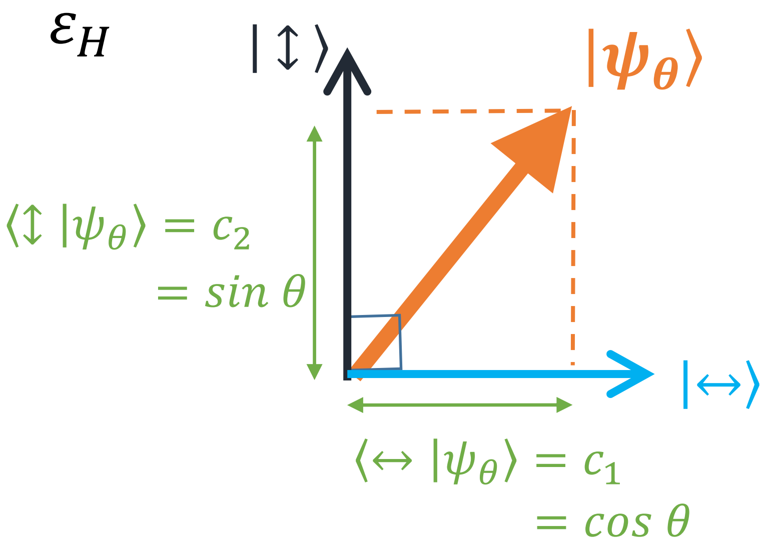
normé

$$\vec{e_y}.\vec{e_y} = |\vec{e_y}|^2 = 1$$
$$\vec{e_z}.\vec{e_z} = |\vec{e_z}|^2 = 1$$

VIII.3 Exemples

B – polarisation d'un photon





Le vecteur d'état $|\psi_\theta\rangle$ du photon est donc dans un espace vectoriel de dimension 2 définit par les vecteurs unitaires $|\leftrightarrow\rangle$ et $|\updownarrow\rangle$

Si $|\leftrightarrow\rangle$ et $|\updownarrow\rangle$ sont les deux solutions possibles de polarisation du photon alors toutes superpositions de ces deux états sont aussi solutions:

$$|\psi_\theta\rangle = \boldsymbol{c_1}\,|\leftrightarrow\rangle + \boldsymbol{c_2}\,|\updownarrow\rangle$$

Et comme on est en 2D on peux appliquer les règles de trigo classiques :

$$\boxed{|\psi_\theta\rangle = cos\ \theta\ |\leftrightarrow\rangle + sin\ \theta |\updownarrow\rangle}$$

On peut aussi vérifier que cette base est bien normé (norme=1):

$$\langle\psi_\theta|\psi_\theta\rangle = \|\psi_\theta\|^2 = \sum_{i=1}^{2}|c_i|^2$$

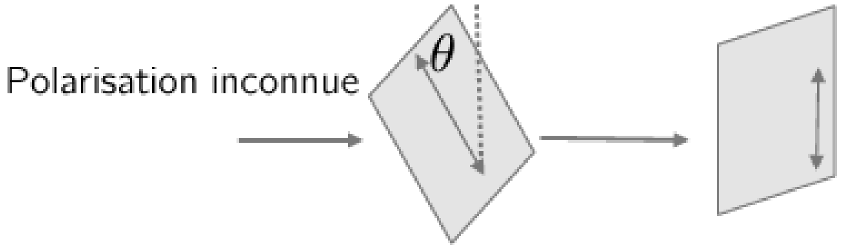
$$= cos^2\ \theta + sin^2\theta$$

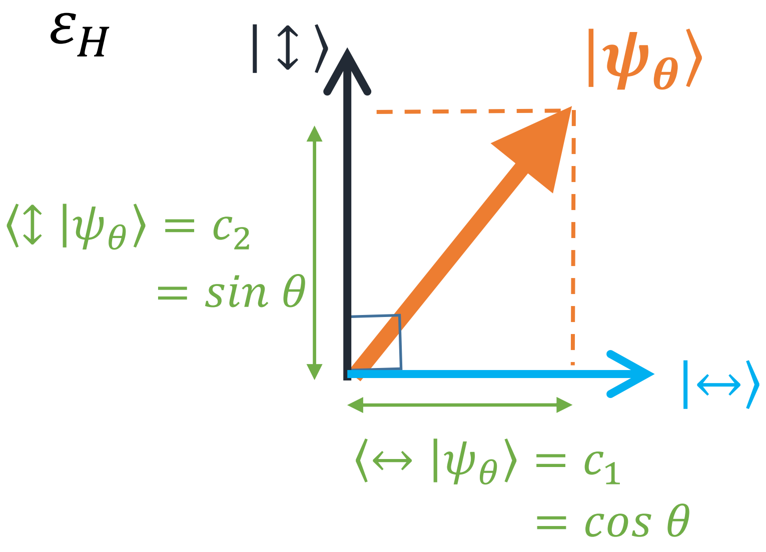
$$= 1$$

Loi de Malus

VIII.3 Exemples

B – polarisation d'un photon





La probabilité qu'un photon de polarisation inconnue ψ_θ puisse passer (ou être détecter) avec une polarisation $\updownarrow$ est donc :

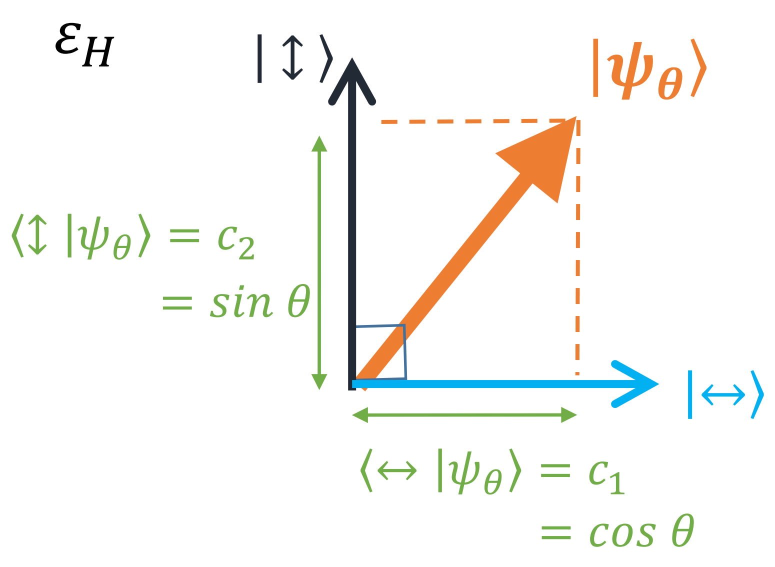
$$\boxed{|\langle\updownarrow|\psi_\theta\rangle|^2 = cos^2\theta}$$

Et celle d'avoir une polarisation $\leftrightarrow$ est donc:

$$|\langle\leftrightarrow|\psi_\theta\rangle|^2 = sin^2\theta$$

VIII.3 Exemples

B – polarisation d'un photon



On peut écrire les vecteurs unitaires de la base orthonormé $|\leftrightarrow\rangle$ et $|\updownarrow\rangle$ comme:

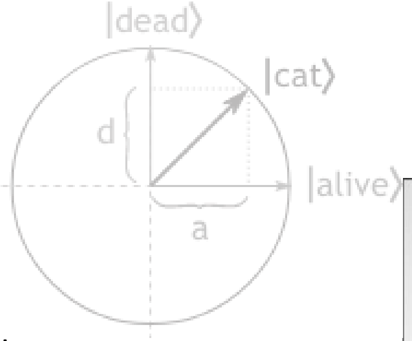
$$|\leftrightarrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ et } |\updownarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

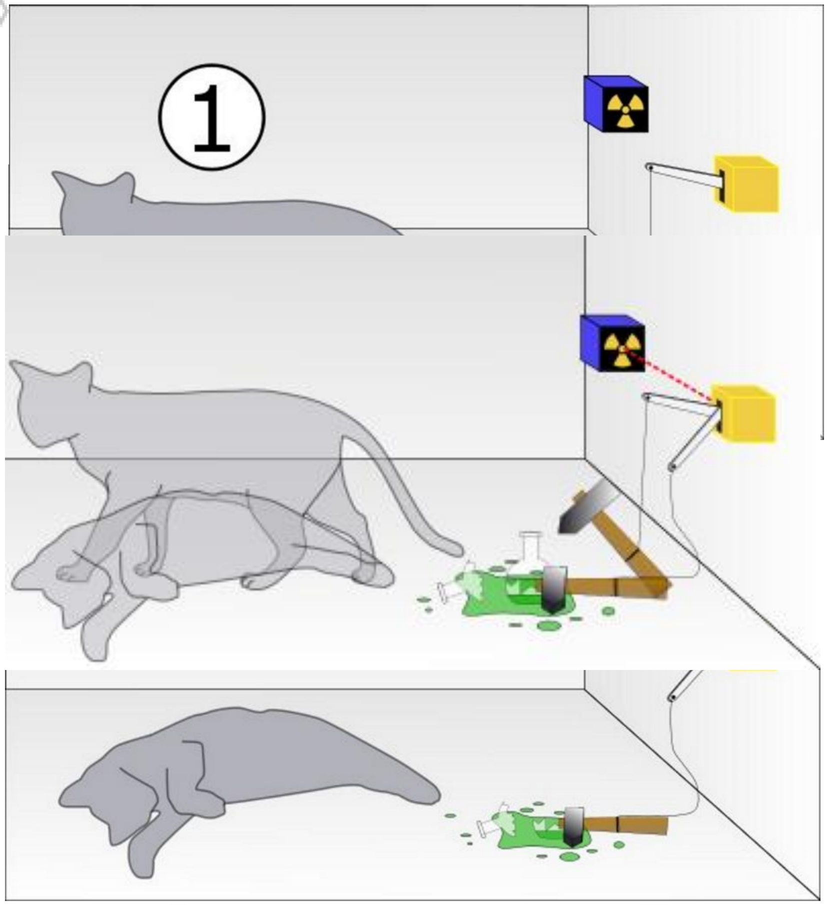
Et vérifier que cette base est bien complète en vérifiant la **relation de fermeture**

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N} |\boldsymbol{u_i}\rangle\langle\boldsymbol{u_i}| &= |\leftrightarrow\rangle\langle\leftrightarrow| + |\updownarrow\rangle\langle\updownarrow| \\
&= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1 \quad 0) + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}(0 \quad 1) \\
&= \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \\
&= \mathbb{1}
\end{aligned}$$

VIII.3 Exemples

C – Le chat de Schrödinger





Une substance radioactive à une chance sur deux de se désintégrer en 1h, donc une chance sur deux d'enclencher un mécanisme qui brise une fiole de poison et tue un chat enfermé dans une boite.

Tant que je n'ai pas ouvert la boite il existe une chance sur deux de trouver le chat dans un des deux états possibles, le chat est mort ou vivant.

En mécanique quantique, **tant que je n'ai pas réaliser la mesure d'ouvrir la boite** et de voir comment est le chat, le chat existe dans une **superposition d'état mort et vivant**.

Par contre dès que j'ouvre la boite, adieu la superposition, la fonction d'onde s'effondre dans un des deux états possible. **La mesure (ouverture de la boite) a perturbé le système.**

Pour cette raison, on a coutume de dire qu'un système quantique peut être dans **plusieurs états « classique » à la fois**.

dans le sens de notre réalité macroscopique

Il faut en réalité comprendre que le système est dans un **état quantique unique**, mais que les mesures peuvent donner plusieurs résultats différents, chaque résultat étant associé à sa probabilité d'apparaître lors de la mesure.