Les bases mathématiques de la mécanique quantique

Introduction :

Dans le chapitre précédent, en résolvant l'équation de schrödinger nous avons étudié quelques problèmes techniquement simple. Pour aborder des problèmes plus complexe, les idées fondamentales de la mécanique quantique ont été formalisées dans un cadre mathématique rigoureux. Dans ce chapitre on se propose de donner un apperçut sur le formalisme mathématique de la mécanique quantique.

I- Formalisme mathématique de la mécanique quantique :

1- Espace d'Hilbert des fonctions d'ondes :

En mécanique quantique, l'état d'un système est représenté par une fonction d'onde. L'espace des fonctions d'onde est un espace de fonctions dont le module est de carré sommable car $\int_{espace} |\Psi|^2 dx$ est toujours une quantité finie et égale à l'unité puisqu'elle représente la probabilité totale de trouver la particule dans l'espace.

Les fonctions d'onde ont comme propriétés mathématiques d'appartenir à un espace d'Hilbert $\mathcal{E}$.

un espace d'Hilbert $\mathcal{E}$ est un espace vectoriel sur le corps des complexe muni du produit scalaire : $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{espace} \Psi_1^* \Psi_2 \, dx$; avec Ψ_1 et Ψ_2 sont deux fonctions de $\mathcal{E}$. Le produit scalaire de la fonction d'onde par elle même, représente le carré de sa norme :

$$\| \Psi \|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{espace} |\Psi|^2 dx \geqslant 0 .$$

Lorsque le produit scalaire de deux fonctions est nul, $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$, ces deux fonctions sont dites orthogonales

- $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle^* = \int_{espace} \Psi_2^* \, \Psi_1 \, dx = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$

- Soit φ, Ψ_1, Ψ_2 sont des élements de $\mathcal{E}$ et $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$$\langle \varphi | \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \Psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 | \varphi \rangle = \lambda_1^* \langle \Psi_1 | \varphi \rangle + \lambda_2^* \langle \Psi_2 | \varphi \rangle$$

En notation de Dirac :

→ l'élément $|\Psi\rangle$ est appelé "ket"

→ l'élément $\langle \Psi|$ est appelé "bra"

avec $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$ et $\langle \Psi | = (|\Psi\rangle^*)^t = (c_1^* \; c_2^* \; c_3^* \; \ldots)$

2- Base orthonormée discrète de $\mathcal{E}$:

Soit un ensemble dénombrable de fonction de carré sommable $\{|\varphi_n\rangle\}$.

* cet ensemble est orthonormé si :

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \int \varphi_i^*(x) \, \varphi_j(x) \, dx = \delta_{ij}$$

avec $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$

δ_{ij} : symbole de kronecker.

* cet ensemble forme une base complète si toute fonction Ψ peut être développée suivant les φ_n

$$\Psi(x) \longleftrightarrow \varphi_n(x)$$
$$|\Psi\rangle \longleftrightarrow |\varphi_n\rangle \quad \Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

les coefficients C_n sont appelés composantes de Ψ sur les ket $|\varphi_n\rangle$

Remarque 1 :

$$\langle \varphi_n | \Psi \rangle = \langle \varphi_n | \left(\sum_i c_i |\varphi_i\rangle \right) = \sum_i c_i \langle \varphi_n | \varphi_i \rangle = \sum_i c_i \, \delta_{ni}$$

$$\langle \varphi_n | \psi \rangle = C_n$$

Remarque 2 :

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle = \sum_n \langle \varphi_n|\psi\rangle |\varphi_n\rangle$$

$$= \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \left(\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\right)|\psi\rangle$$

$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbb{1}$ relation de fermeture, elle traduit que $\{|\varphi_n\rangle\}$ est complet

Remarque 3 :

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

$$\langle\psi| = \sum_i c_i^* \langle\varphi_i|$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left(\sum_j c_j^* \langle\varphi_j|\right)\left(\sum_i c_i |\varphi_i\rangle\right)$$

$$= \sum_j \sum c_j^* c_i \langle\varphi_j|\varphi_i\rangle$$

$$= \sum_j \sum_i c_j^* c_i \, \delta_{ji}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2$$

si $|\psi\rangle$ est normée $\Rightarrow \sum_i |c_i|^2 = 1$

3- Opérateur linéaire :

En mécanique quantique les grandeurs physiques mésurables sont représentées par des opérateurs de l'espace d'Hilbert appelé observables.

a- Définition d'un opérateur :

"A" est un opérateur défini sur $\mathcal{E}$ s'il fait correspondre à tout $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ un autre $|\psi'\rangle \in \mathcal{E}$.

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

A est un opérateur linéaire s'il satisfait la propriétés :

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$$ avec $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ et $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{E}$

b- produit de deux opérateurs

Le produit de deux opérateurs linéaires A et B noté AB est défini par $(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$, B agit le premier A ensuite en général le produit $AB \neq BA$.

On définit le commutateur de A et B noté $[A, B]$ par :

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

Exemple :

$[X, P] = ?$

grandeur physique → opérateur

$$x \longrightarrow X \equiv x$$

$$P \longrightarrow P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$X\psi(x) = x\,\psi(x)$$

$$P\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

$$[X, P]\,\psi(x) = (XP - PX)\,\psi(x) = XP\psi(x) - PX\psi(x)$$

$$XP\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

$$PX\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\psi(x) + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

$$[X, P]\,\psi(x) = -\frac{\hbar}{i}\psi(x) \quad , \quad \forall\,\psi(x)$$

$$\boxed{[X, P] = i\hbar}$$

c- Représentation d'un opérateur par une matrice :

On appelle élément de matrice de l'opérateur A dans la base orthonormée $\{|\varphi_i\rangle\}$ les nombres complexes A_{ij} : $A_{ij} = \langle\varphi_i|A|\varphi_j\rangle$

d- Opérateur adjoint :

deux opérateurs A et A^* sont dit adjoint si : $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^+$

une propriété importante résulte de cette définition :

Considérons un $|\varphi\rangle$ quelconque de $\mathcal{E}$.

on a $\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^*$

$$\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_i | A^+ | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_j | A | \varphi_i \rangle^*$$

$$\Rightarrow A_{ij}^* = A_{ji}^*$$

Propriétés de l'opérateur adjoint:

- $(A^+)^+ = A$
- $(A+B)^+ = A^+ + B^+$
- $(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$
- $(AB)^+ = B^+ A^+$

e- Operateur hermetique:

un operateur est dit hermetique s'il est égal à son adjoint: $A = A^+$
les élements symétriques par rapport à la diagonal sont complexes conjugués l'un de l'autre.
les éléments de la diagonale sont réels

f- Vecteur propre et valeur propre d'un operateur

on dit que $|\psi\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur A associé à la valeur λ si $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

lorsque l'opérateur A est hermetique $(A = A^+)$

$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ et $\langle\psi|A^+ = \lambda^* \langle\psi|$

$\Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$ et $\langle\psi|A^+|\psi\rangle = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$

or $A = A^+ \Rightarrow \lambda = \lambda^+$

$\Rightarrow$ la valeur propre λ est réelle

les valeurs propre d'un operateur hermetique sont réelles
une observable est un opérateur hermetique.

Scanné avec CamScanner

II - Postulats de la mécanique quantique.

Postulat ①:

L'état d'un système physique est complètement définit à tout instant t par la donnée d'un ket $|\Psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace d'Hilbert $\mathcal{E}$

Postulat ②:

toute grandeur physique mesurable $\mathcal{A}$ est décrite par un opérateur hermétique A agissant dans l'espace d'Hilbert $\mathcal{E}$. l'opérateur A est une observable

Postulat ③:

la mesure d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ ne peut donner comme résultat que l'une des valeur propre de l'observable A correspondant.

Postulat ④:

lorsqu'on mesure une grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système qui se trouve dans l'état $|\Psi\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur a_n de l'observable A est $P(a_n) = |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2$

$|\varphi_n\rangle$ vecteur propre normé de A associé à la valeur propre a_n

Postulat ⑤:

lorsque la mesure de la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ dont le résultat a_n, l'état du système immédiatement après la mesure est le vecteur propre φ_n correspondant

Postulat ⑥:

l'évolution au cours du temps de l'état d'un système est décrite par l'équation de schrödinger : $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$

avec $|\Psi(t)\rangle$ vecteur d'état du système et H : observable associée à l'énergie totale du système (Hamiltonnien