A. Notations de Dirac

A.1. Vecteurs

Espace de Hilbert : Tout état quantique d'une particule est caractérisé par un vecteur d'état appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}$, un espace vectoriel appelé *espace de Hilbert*. Le *vecteur d'état* est un vecteur de cet espace qui contient toute l'information sur le système physique étudié. Dans toutes les définitions, le cas d'un espace de Hilbert indicé par un nombre entier est choisi (espace discret de dimension finie ou infinie). On expliquera comment considérer le cas d'un espace infini paramétré par un indice continu à la fin de cette section.

Les Ket et les Bra : On note un vecteur d'état $|\psi\rangle$ (au lieu de $\vec{\psi}$) et on l'appelle un *ket*. Cela correspond à un vecteur colonne. Le transposé (vecteur ligne) ou vecteur dual, est appelé *bra* et noté $\langle\psi|$. En fait, on appelle plus généralement bra un élément de l'espace dual $\mathcal{E}^*$ de $\mathcal{E}$ qui est l'espace regroupant l'ensemble des fonctionnelles linéaires sur $\mathcal{E}$. Une fonctionnelle linéaire est une application linéaire qui associe un nombre complexe à un ket. Mathématiquement, la fonctionnelle φ se résume par la définition formelle $\varphi : |\psi\rangle \to \varphi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$. À tout ket $|\psi\rangle$ il existe un bra correspondant à l'application "prendre le produit scalaire avec $|\psi\rangle$" (cf ci-dessous) mais la réciproque est fausse.

Propriétés : on note α, β deux nombres complexes :

$$\boxed{\begin{array}{rcll} |\alpha\varphi + \beta\psi\rangle &=& \alpha|\varphi\rangle + \ \beta|\psi\rangle & \text{(linéarité)} \\ \langle\alpha\varphi + \beta\psi| &=& \alpha^*\langle\varphi| + \beta^*\langle\psi| & \text{(anti-linéarité)} \end{array}} \tag{1}$$

Produit scalaire : En pratique, on se sert des bras quasi uniquement pour calculer des produits scalaires. En effet, si on se donne un ket $|\varphi\rangle$ dont on construit le bra $\langle\varphi|$, la fonctionnelle linéaire qui est définit par "extraire le produit scalaire avec $|\varphi\rangle$" donne, appliquée sur un ket $|\psi\rangle$, le produit du vecteur ligne $\langle\varphi|$ par le vecteur colonne $|\psi\rangle$, soit $\vec{\varphi} \cdot \vec{\psi} = \langle\varphi|\psi\rangle$. On voit la force de la notation de Dirac qui traduit par une fusion des barres du bra et du ket le produit scalaire. L'origine des noms bra et ket provient de là ; en anglais, *bracket* signifie *crochet*.

Propriétés : elles découlent des définitions :

$$\boxed{\begin{array}{rcll} \langle\varphi|\psi\rangle^* &=& \langle\psi|\varphi\rangle & \\ \||\psi\rangle\|^2 &=& \langle\psi|\psi\rangle & \text{(norme au carré)} \end{array}} \tag{2}$$

Base orthonormée : une *base orthonormée* $\{|\varphi_n\rangle\}$ de l'espace de Hilbert est une base telle que $\boxed{\langle\varphi_n|\varphi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}}$ avec $\delta_{nn} = 1$ et $\delta_{nn'} = 0$ si $n \neq n'$ (symbole de Kronecker).

Représentation et écriture dans une base : Muni du produit scalaire, on retrouve la notion naturelle de base de l'espace de Hilbert et de décomposition d'un vecteur dans la base. Ainsi, si l'on note $\{|\varphi_n\rangle\}$ une base orthonormée de l'espace vectoriel, et que l'on décompose un ket $|\psi\rangle$ dans cette base, les coefficients étant les produits scalaires $\psi_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle \in \mathbb{C}$, on peut écrire cela sous la forme :

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n \psi_n|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle|\varphi_n\rangle} \,. \tag{3}$$

On dit que les $\langle\varphi_n|\psi\rangle$ sont la *représentation* de $|\psi\rangle$ dans la base des $\{|\varphi_n\rangle\}$.

Il n'y a rien de fondamentalement nouveau par rapport à vos notions de mécanique : le vecteur position $\vec{r}$ ou vitesse $\vec{v}$ sont des concepts abstraits que vous pouvez manipuler pour trouver des relations. Vous pouvez aussi choisir de travailler directement avec leurs composantes dans une base choisie correspondant à un jeu de coordonnées, comme (x, y, z) (coordonnées ou représentation cartésienne(s), base $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$) ou (r, θ, φ) (coordonnées ou représentation sphérique(s), base $\{\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi\}$).

A.2. Opérateurs

Définition : un *opérateur* est une application linéaire qui agit sur les éléments de l'espace de Hilbert. Il transforme un ket en un autre ket et ce de manière linéaire. On lui met un chapeau pour le distinguer des nombres complexes, on note par exemple $\hat{A}$ l'opérateur A. Formellement, $\hat{A} : |\psi\rangle \to |A\psi\rangle \equiv \hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{E}$. La linéarité se traduit par la définition :

$$\boxed{\hat{A}|\alpha\varphi + \beta\psi\rangle = \alpha\hat{A}|\varphi\rangle + \beta\hat{A}|\psi\rangle} \tag{4}$$

Avec le temps, il est habituel de ne plus mettre les chapeaux sur les opérateurs si l'on comprend bien ce que l'on manipule.

Représentation – éléments de matrice d'un opérateur : De même qu'un ket, un opérateur est un objet qui contient toute l'information sur la transformation linéaire. On peut manipuler les sommes, produits, inverses... d'opérateurs de façon abstraite en appliquant les règles de l'algèbre linéaire. Si l'on souhaite travailler avec une représentation de l'opérateur, c'est-à-dire des nombres, on choisit une base $\{|\varphi_n\rangle\}$. La représentation de l'opérateur est alors un matrice. Comme les $\{\hat{A}|\varphi_n\rangle\}$ représentent un ensemble de vecteurs colonnes, on peut les représenter en les projetant sur la base. Il est donc naturel dans les notations de Dirac, d'écrire sous la forme suivante les éléments de matrice A_{nm} associés à $\hat{A}$ dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$:

$$\boxed{A_{nm} = \langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle \in \mathbb{C}}\,. \tag{5}$$

Là encore, on retrouve des choses connues : une rotation dans l'espace à trois dimensions, qui est une opération linéaire, est représentée par une matrice de rotation dont la forme dépend de la base choisie.

Produit d'opérateurs : comme ce que vous connaissez de l'algèbre linéaire, composer les applications revient à les multiplier $|(A \circ B)\psi\rangle = \hat{A}|B\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$. Le symbole du produit est souvent écrit de façon implicite, on note juste les opérateurs à la suite. Attention, comme pour les matrices, ce produit est en général *non-commutatif*, c'est-à-dire que $\boxed{\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}}$, l'ordre des opérateurs compte ! On en verra des conséquences importantes pour la physique.

Propriétés : $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ trois opérateurs :

$$\boxed{\begin{array}{rcll} (\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})\hat{C} & = & \alpha\hat{A}\hat{C} + \beta\hat{B}\hat{C} & \\ (\alpha\hat{A})(\beta\hat{B}) & = & \alpha\beta\hat{A}\hat{B} & \\ [\hat{A}, \hat{B}] & = & \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} & \quad \text{(commutateur)} \end{array}} \tag{6}$$

Opérateurs nul et identité : Ils sont notés souvent 0 et $\mathbb{1}$ respectivement et tels que $\hat{A} + 0 = \hat{A}$, $\hat{A}0 = 0\hat{A} = 0$ et $\hat{A}\mathbb{1} = \mathbb{1}\hat{A} = \hat{A}$. Avec le temps, l'opérateur identité est noté 1 ou même omis lorsqu'il est multiplié par des constantes, comme dans l'expression $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1} \to [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Opérateur adjoint : L'*opérateur adjoint* de $\hat{A}$ est celui qui va agir dans l'espace des bras (espace dual) pour transformer le bra correspondant à un ket en le bra correspondant au ket transformé. Il est noté $\hat{A}^\dagger$ donc formellement défini par $\hat{A}^\dagger : \langle\psi| \to \langle A\psi| \equiv \langle\psi|\hat{A}^\dagger \in \mathcal{E}^*$. On obtient alors facilement la représentation de cet opérateur en fonction de celle de $\hat{A}$. La matrice associée à $\hat{A}^\dagger$ est l'hermitique conjuguée de celle de $\hat{A}$, c'est-à-dire qu'on prend la transposée de $[A_{nm}]$ puis le complexe conjugué de chaque élément. Ainsi, on a la relation :

$$\boxed{A^\dagger_{nm} = \langle\varphi_n|\hat{A}^\dagger|\varphi_m\rangle = \langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle^* = A^*_{mn}}\,. \tag{7}$$

Cela est transparent lorsqu'on l'écrit avec les notations de Dirac : $\langle\varphi_n|\hat{A}^\dagger|\varphi_m\rangle = \langle A\varphi_n|\varphi_m\rangle = \langle\varphi_m|A\varphi_n\rangle^* = \langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle^*$.

Propriétés : elles sont similaires à ce que vous connaissez de la transposée des matrices, en faisant attention à la conjugaison complexe : $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\hat{A}, \hat{B}$ deux opérateurs :

$$\boxed{\begin{array}{rcl} (\alpha\hat{A}+\beta\hat{B})^\dagger &=& \alpha^*\hat{A}^\dagger+\beta^*\hat{B}^\dagger \\ (\hat{A}^\dagger)^\dagger &=& \hat{A} \\ (\hat{A}\hat{B})^\dagger &=& \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \end{array}} \tag{8}$$

Opérateur hermitique : Un opérateur $\hat{A}$ est *hermitique* si $\boxed{\hat{A}^\dagger = \hat{A}}$. Dans toute base orthonormée, sa représentation matricielle est donc une *matrice complexe hermitique*, c'est-à-dire que ses éléments de matrice satisfont à $\boxed{A_{nm} = A^*_{mn}}$. En particulier, les éléments diagonaux sont nécessairement réels, $A_{nn} \in \mathbb{R}$.

Règles pour prendre le conjugué hermitique d'une expression :

- prendre le complexe conjugué des constantes $\alpha \longleftrightarrow \alpha^*$.
- remplacer les kets par les bras correspondant $|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi|$.
- inverser l'ordre des facteurs.
- la position des nombres complexes dans les expressions ne jouent pas de rôle car ils commutent avec les opérateurs et les autres nombres. Il est d'usage des les factoriser à gauche et de laisser à droite les opérateurs, bras et kets.

Projecteurs : Un projecteur est un opérateur qui à un ket associe sa projection sur un état $|\psi\rangle$ donné et qu'on prendra *normalisé* ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$). Notons-le $\hat{\Pi}_\psi$. Dans les notations de Dirac, il s'écrit alors simplement sous la forme.

$$\boxed{\hat{\Pi}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|} \tag{9}$$

En effet, $\forall|\varphi\rangle, \hat{\Pi}_\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle\langle\psi|)|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle|\psi\rangle$ et $\hat{\Pi}^2_\psi = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\Pi}_\psi$. On voit l'utilité des notations pour fusionner les bras et les kets pour obtenir des nombres. Cela se généralise aisément à un sous-espace $\mathcal{S}$ défini par M vecteurs *orthonormés* $\{|\varphi_n\rangle\}_{n=1,M}$:

$$\boxed{\hat{\Pi}_\mathcal{S} = \sum_{n=1}^{M} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|} \tag{10}$$

Relations de fermeture : si l'on étend le sous-espace précédent à toute une *base orthonormée* de l'espace de Hilbert, on obtient que le projecteur est l'identité. Cela s'écrit sous la forme suivante :

$$\boxed{\mathbb{1} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|} \tag{11}$$

Pour décomposer un ket $|\psi\rangle$ dans une base, il suffit d'introduire la relation de fermeture correspondant à cette base selon $\mathbb{1}|\psi\rangle = (\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|)|\psi\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle|\varphi_n\rangle$. Cette astuce est redoutablement efficace en pratique car l'on peut insérer une relation de fermeture où on le souhaite et faire apparaître des composantes ou des éléments de matrices dans les expressions.

Décomposition d'un opérateur sur une base : De même que pour les kets, on peut représenter un opérateur en le décomposant dans une base choisie (toujours la même notation). Insérons deux relations de fermeture (avec des indices différents) sur la base à droite et à gauche de l'opérateur $\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = (\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|)\hat{A}(\sum_m |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|)$, ce qui donne :

$$\boxed{\hat{A} = \sum_{n,m} \langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m| = \sum_{n,m} A_{nm}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|} \tag{12}$$

Cela permet de dérouler “en ligne” les opérateurs. Cela montre également la puissance de la notation de Dirac. En effet, on retrouve aisément la formule d'application d'une matrice à un vecteur à partir ce cette décomposition :

$$\hat{A}|\psi\rangle = \Big(\sum_{n,m}\langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|\Big)|\psi\rangle = \sum_n\Big(\sum_m\langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\psi\rangle\Big)|\varphi_n\rangle = \sum_n\Big(\sum_m A_{nm}\psi_m\Big)|\varphi_n\rangle \quad (13)$$

ainsi que celle du produit de matrice

$$\hat{A}\hat{B} = \Big(\sum_{n,m}\langle\varphi_n|\hat{A}|\varphi_m\rangle|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|\Big)\Big(\sum_{m',n'}\langle\varphi_{m'}|\hat{B}|\varphi_{n'}\rangle|\varphi_{m'}\rangle\langle\varphi_{n'}|\Big) = \sum_{n,n'}\Big(\sum_m A_{nm}B_{mn'}\Big)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_{n'}| \quad (14)$$

Changement de base : soient deux bases orthonormées $\{|u_n\rangle\}$ et $\{|v_m\rangle\}$. On obtient la formule du changement de base $\{|u_n\rangle\} \xrightarrow{S} \{|v_m\rangle\}$ en introduisant une relation de fermeture sur la première pour exprimer les vecteurs de la seconde : $|v_m\rangle = \mathbb{1}|v_m\rangle = (\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|)|v_m\rangle = \sum_n\langle u_n|v_m\rangle|v_m\rangle$. Les éléments de matrice de l'opérateur de changement de base $\hat{S}$ sont donc $\boxed{S_{nm} = \langle u_n|v_m\rangle}$. Le changement de base inverse $\{|v_m\rangle\} \xrightarrow{S^{-1}} \{|u_n\rangle\}$ est obtenu par la matrice inverse qui est clairement $S^{-1}_{mn} = \langle v_m|u_n\rangle = S^*_{nm}$, soit $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^\dagger$. On trouvera facilement la formule du changement de base d'un opérateur en introduisant des relations de fermeture.

Vecteur propre et valeur propre d'un opérateur : c'est un notion essentielle pour la physique, tant au niveau des concepts que des calculs pratiques. Le *vecteur propre* $|\psi_\lambda\rangle$ de l'opérateur $\hat{A}$ associé à la *valeur propre* λ satisfait à la relation $\boxed{\hat{A}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle}$. Les vecteurs propres sont donc ceux qui demeurent invariants sous l'application linéaire A à une dilatation λ prêt. Un vecteur propre est toujours non-nul mais la valeur propre peut être nulle. L'ensemble des valeurs propres d'un opérateur est appelé le *spectre* de l'opérateur.

Équation aux valeurs propres : Pour trouver les valeurs propres d'un opérateur, il faut résoudre *l'équation aux valeurs propres* (ou équation caractéristique) :

$$\boxed{\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0} \quad (15)$$

Une fois les valeurs propres trouvées, on résout le système associé pour trouver le vecteur propre correspondant en veillant à le normaliser à la fin. On écrit en général ces équations dans une base donnée. Il est parfois possible de trouver l'ensemble des vecteurs propres et valeurs propres sans passer par la résolution de cette équation. On en verra des exemples dans le cours.

Théorème spectral : un théorème essentiel pour les postulats de la mécanique quantique.

> *Si $\hat{A}$ est un opérateur hermitique, il est alors diagonalisable, avec des valeurs propres réelles et des vecteurs propres qui forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert.*

Il a alors une forme diagonale dans la base de ses vecteurs propres et on le décompose alors selon :

$$\boxed{\hat{A} = \sum_\lambda \lambda\,|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|}\,. \quad (16)$$

Généralisation aux bases continues : La généralisation aux bases continues des résultats précédents n'a rien d'évident sur le plan mathématique. On utilisera simplement la correspondance $\sum_n \leftrightarrow \int d\alpha$ avec α un réel qui joue le rôle d'indice continu. L'orthonormalisation fait intervenir les deltas de Dirac $\boxed{\langle\varphi_\alpha|\varphi_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha-\alpha')}$ et la relation de fermeture s'écrira ainsi

$$\boxed{\int d\alpha|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| = \mathbb{1}} \quad (17)$$