Postulats de la Mécanique Quantique

① À chaque instant, l'état d'un système physique est donné par un vecteur $|\psi\rangle \in$ espace de Hilbert $\mathcal{H}$
normalisé $\langle\psi|\psi\rangle = 1$
défini à une phase près $|\psi\rangle \sim e^{i\varphi}|\psi\rangle$

② À toute grandeur observable est associé un opérateur hermitien $A = A^\dagger$

$$A = \sum_n a_n P_n$$

a_n = valeur propre de A
P_n = projecteur sur le sous espace propre de A de valeur propre a_n

La probabilité d'observer le résultat a_n dans l'état $|\psi\rangle$ est $P(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$

<u>note</u> : 1) $\sum_n P(a_n) = \sum_n \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n P_n|\psi\rangle$
$= \langle\psi|\mathbb{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$

2) $P(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|P_n^2|\psi\rangle = \left|P_n|\psi\rangle\right|^2 \geqslant 0$
car P_n = projecteur

3) si $|\psi\rangle \to e^{i\varphi}|\psi\rangle$, $P(a_n)$ ne change pas.

$$A = \sum_n a_n P_n$$

Après avoir obtenu le résultat a_n, l'état devient

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_n} \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

"réduction du paquet d'onde"

* Valeur moyenne d'une observable A

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n \langle\psi| P_n |\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n a_n P_n|\psi\rangle$$

$$\rightarrow \quad \underline{\underline{\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle}}$$

* Ecart Quadratique Moyen

$$\Delta A^2 = \sum_n a_n^2 P(a_n) - \langle A\rangle^2$$

$$= \sum_n a_n^2 \langle\psi|P_n|\psi\rangle - \langle A\rangle^2$$

$$= \langle\psi|\sum_n a_n^2 P_n|\psi\rangle - \langle A\rangle^2$$

Note $A^2 = \left(\sum_n a_n P_n\right)\left(\sum_{n'} a_{n'} P_{n'}\right) = \sum_{nn'} a_n a_{n'} \underbrace{P_n P_{n'}}_{\delta_{nn'} P_n} = \sum_n a_n^2 P_n$

$$\underline{\underline{\Delta A^2 = \langle\psi|A^2|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle^2}}$$

* On ne peut pas mesurer simultanément des observables qui ne commuttent pas.
Mais on peut mesurer simultanément des observables qui commuttent. $[A,B]=0$

③ Soit $H(t)$ l'observable associée à l'énergie totale du système. Alors l'évolution temporelle est donnée par

$$i\hbar\, \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t)\, |\psi(t)\rangle$$

Equation de Schrödinger

$H(t)$ = Hamiltonien

---

* Equation linéaire : si $|\psi_1(t)\rangle$ et $|\psi_2(t)\rangle$ sont solutions, alors $\alpha|\psi_1(t)\rangle + \beta|\psi_2(t)\rangle$ sont solutions.

Dans une base.

Soit $\{|u_j\rangle\}$ une base orthonormée.

$$\langle u_j|u_{j'}\rangle = \delta_{jj'} \qquad \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| = \mathbb{I}$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\, |u_j\rangle$$

$$H(t) = \sum_{jj'} |u_j\rangle\langle u_{j'}|\, H_{jj'}(t)$$

$$\longrightarrow \boxed{i\hbar\, \partial_t c_j(t) = \sum_{j'} H_{jj'}(t)\, c_{j'}(t)}$$

L'évolution temporelle conserve le produit scalaire

Cohen D.I.c p237 IV.20

Soit $|\psi(t)\rangle$ solution de l'équation de Schrödinger $i\partial_t|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$

Alors $\dfrac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\dfrac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\dfrac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)$

or $-i\dfrac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|H$ car $H^\dagger = H$

$$\longrightarrow \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = i\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle - i\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle$$
$$= 0$$

$\Longrightarrow$ on peut prendre $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$

Hamiltonien indépendant du temps

$$H = \sum_n E_n \, |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

$\{|\varphi_n\rangle\}$ = base orthonormée
E_n = énergies propres.

Ecrivons $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \, |\varphi_n\rangle$

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

$$\Longrightarrow \quad i\hbar\partial_t c_n(t) = E_n \, c_n(t)$$

$$\longrightarrow \quad c_n(t) = c_n(t_0) \, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}$$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) \, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} \, |\varphi_n\rangle}$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger avec un Hamiltonien indépendant du temps, il suffit de diagonaliser l'Hamiltonien, et de connaître la décomposition de $|\psi\rangle$ à l'instant initial dans la base de vecteurs propres de H.

Opérateurs Unitaires

$U^{-1} = U^{\dagger}$

$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = \mathbb{I}$

---

si $|\tilde{\varphi}\rangle = U|\varphi\rangle$ alors $\langle\tilde{\varphi}|\tilde{\psi}\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$
$|\tilde{\psi}\rangle = U|\psi\rangle$

une transformation unitaire conserve le produit scalaire

---

si $\{|i\rangle\}$ est une base orthonormée $\langle i'|i\rangle = \delta_{i'i}$

alors $\{U|i\rangle = |\tilde{i}\rangle\}$ est aussi une base orthonormée

et U est la matrice de changement de base

$$|\tilde{i}\rangle = U|i\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|U|i\rangle = \sum_j |j\rangle U_{ji}$$

---

si U et V sont unitaires, alors UV est unitaire

---

si U est unitaire et $|\psi\rangle$ est un vecteur propre de U

$$U|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow |\lambda|^2 = 1 \Rightarrow \lambda = e^{i\varphi}$$

On peut diagonaliser une matrice unitaire

$$U = \sum_j e^{i\varphi_j}|j\rangle\langle j|$$

$\{|j\rangle\}$ = base orthonormée de vecteurs propres.

<u>th.</u> Si U est une matrice telle que $\langle\psi|U^{\dagger}U|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \quad \forall|\psi\rangle$
alors U est unitaire $U^{\dagger}U = \mathbb{I}$

<u>Preuve</u> : prendre pour $|\psi\rangle = |\alpha\rangle + |\beta\rangle$ et $|\psi\rangle = |\alpha\rangle + i|\beta\rangle$
en déduire que $\langle\alpha|U^{\dagger}U|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \quad \forall\, |\alpha\rangle, |\beta\rangle$

Cohen F_{III}
p 308
IV.22

Si $|\psi(t)\rangle$ solution de l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \qquad ①$$

$\Rightarrow \exists$ un opérateur linéaire $U(t,t_0)$ tel que

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \qquad ②$$

Comme $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$ est indépendant de t, on a

$\forall |\psi(t_0)\rangle \qquad \langle\psi(t_0)|U^+(t,t_0)\,U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$

$$\longrightarrow \boxed{U(t,t_0) \text{ est unitaire}}$$

De ① et ②, on déduit que

$\forall |\psi(t_0)\rangle \qquad i\partial_t\, U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = H(t)\,U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{i\partial_t U(t,t_0) = H(t)\,U(t,t_0)}$$

avec la condition initiale

$$\boxed{U(t_0,t_0) = \mathbb{I}}$$

Fonctions d'Opérateurs / de Matrices

Soit $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C} : x \to \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$ une fonction qui peut être représentée par sa série.

Soit $A \in \mathbb{C}^{N\times N}$ une matrice

Alors on étend f à une fonction sur les matrices par

$$\boxed{f : \mathbb{C}^{N\times N} \to \mathbb{C}^{N\times N} : A \to \lim_{K\to\infty} \sum_{n=0}^{K} c_n A^n \quad \text{si cette limite existe}}$$

<u>exemples</u> : - polynomes

- exponentielle $e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$

$$e^{tA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n A^n}{n!} \qquad t \in \mathbb{R}$$

- $(\mathbb{I} - A)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} A^n$

(à partir de l'identité $\left(\sum_{n=0}^{K} A^n\right)(\mathbb{I} - A) = \mathbb{I} - A^{K+1}$ et puis prendre la limite $K \to \infty$)

<u>Propriétés 1</u> si V est une matrice inversible $V^{-1}V = VV^{-1} = \mathbb{I}$

alors $\boxed{f(V^{-1}AV) = V^{-1} f(A) V}$

car $f(V^{-1}AV) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (V^{-1}AV)^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n V^{-1}A^nV = V^{-1} f(A) V$

<u>Propriété 2</u>. Si D est une matrice diagonale $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ 0 & & \ddots \ \lambda_N \end{pmatrix}$

Alors $f(D)$ est diagonal et $f(D) = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & 0 \\ & f(\lambda_2) & \\ 0 & & \ddots \ f(\lambda_N) \end{pmatrix}$

$\Longrightarrow$ Si A est diagonalisable,
c'est à dire $\exists V$ inversible tel que $V^{-1} A V = D$ est diagonal
alors $f(A) = V^{-1} f(D) V$

$\Longrightarrow$ Si A est hermitien $A = A^{\dagger}$
Alors $\exists U$ unitaire $U^{\dagger} = U^{-1}$ tel que $A = U^{\dagger} D U$
avec D diagonal réel.
$\longrightarrow f(A) = U^{\dagger} f(D) U$.

En notation de Dirac $A = A^{\dagger}$

$$\Longrightarrow A = \sum_j a_j |j\rangle\langle j|$$

$$\longrightarrow f(A) = \sum_j f(a_j) |j\rangle\langle j|$$

<u>exemple</u> : $e^{itA} = \sum_j e^{ita_j} |j\rangle\langle j|$

<u>dérivée d'une exponentielle</u>

$$\frac{d}{dt} e^{itA} = \lim_{\tau \to 0} \frac{e^{i(t+\tau)A} - e^{itA}}{\tau}$$

$$= \lim_{\tau \to 0} e^{itA} \left(\frac{e^{i\tau A} - \mathbb{1}}{\tau} \right)$$

$$= \lim_{\tau \to 0} e^{itA} \frac{\left(\mathbb{1} + i\tau A + \frac{(i\tau A)^2}{2} + \dots - \mathbb{1} \right)}{\tau}$$

$$= i A e^{itA} = e^{itA} i A$$