Formalisme de Dirac

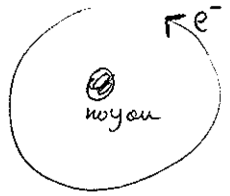
Cohen-Tannoudji: Chapitres II, III

Paul Dirac, The principles of quantum mechanics, 1930

Mécanique Quantique : algèbre linéaire dans des espaces
fini ou infini dimensionels

$\longrightarrow$ notation spécifique pour la mécanique quantique

Expérience de Stern-Gerlach



moment angulaire $\vec{L} = m\,\vec{r}\times\vec{v}$

moment magnétique $\vec{m} = I\,\vec{S}$ ↳ surface ↳ courant

tours par seconde $= \dfrac{v}{2\pi r}$

courant $I = e\dfrac{v}{2\pi r}$

$m = \dfrac{ev}{2\pi r}\cdot\pi r^2 = \dfrac{1}{2}e\,vr = \dfrac{1}{2}\dfrac{e}{m}\,L$

$\vec{m} = \dfrac{1}{2}\dfrac{e}{m}\vec{L}$ en pratique pour les atomes / particules élémentaires $\vec{m} = g\cdot\dfrac{1}{2}\dfrac{e}{m}\vec{L}$

g = facteur de Landé

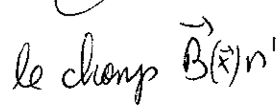
$g_e = -2{,}002$
$g_\mu = -2{,}002$
$g_n = -3{,}8$
$g_p = +5{,}6$
etc....

pour un mouvement purement orbital : $g = 1$ } + corrections...
pour un spin : $g = -2$ (équation de Dirac)

Comment mesurer la quantification du moment angulaire ?

⟶ mesurer le moment magnétique.

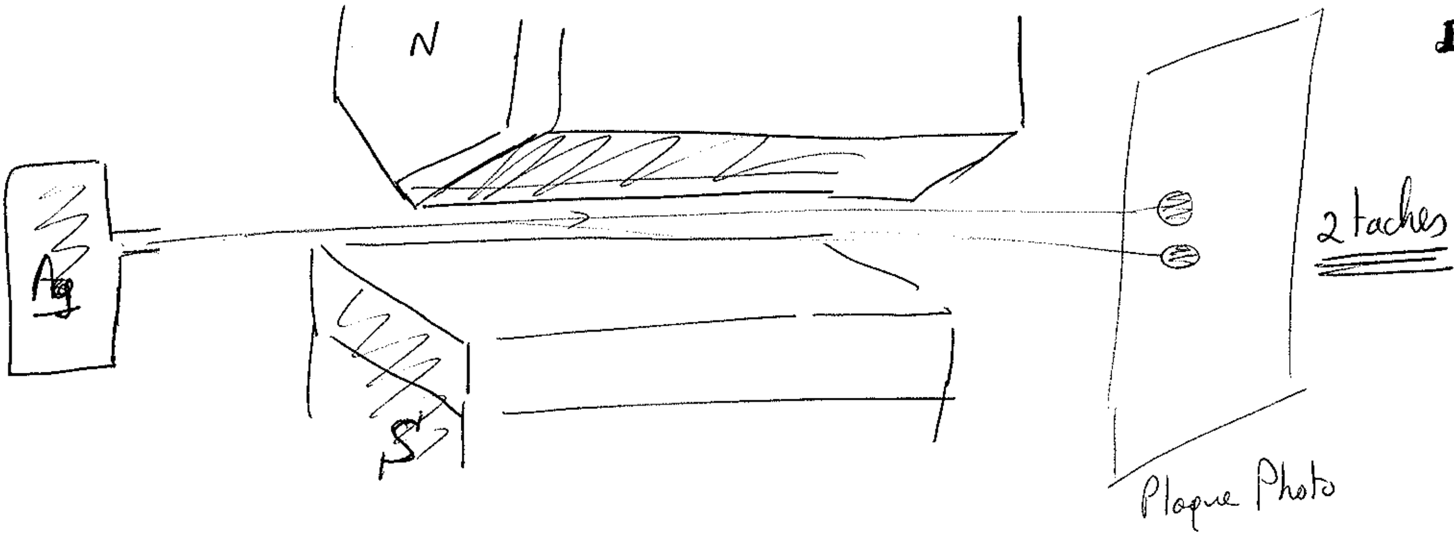
Énergie d'un moment magnétique dans un champ magnétique



$E = \vec{m}\cdot\vec{B}$

si le champ $\vec{B}(\vec{x})$ n'est pas uniforme ⟶ force sur la particule

$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{m}\cdot\vec{B})$



$$\vec{B} \simeq B(3)\,\vec{1}_3$$

$$E = m_3\, B(3)$$

$$\vec{F} = m_3\, \partial_3 B(3)\,\vec{1}_3$$

$\longrightarrow$ Spin $S_3 = \pm \frac{\hbar}{2}$

$\Longrightarrow$ état de spin dans la direction $+3$: $|\uparrow_z\rangle$

-3 : $|\downarrow_z\rangle$

En Mécanique Quantique, l'espace des états d'un système

= espace de Hilbert $\mathcal{H}$

= espace vectoriel complexe (fini ou infini dimensionel)
muni d'un produit scalaire hermitien
complet (toute suite de Cauchy converge)

Exemples :

1) espace vectoriel complexe de dimension finie
$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{C}^d$$
produit scalaire $\quad (y, x) = \bar{y}_1 x_1 + \bar{y}_2 x_2 + \dots + \bar{y}_d x_d$

Rappel : définition du produit scalaire hermitien

* $(y, x) = \overline{(x, y)}$
* linéaire par rapport au premier argument
$$(y, a_1 x_1 + a_2 x_2) = a_1 (y, x_1) + a_2 (y, x_2) \qquad a_1, a_2 \in \mathbb{C}$$
$\longrightarrow$ antilinéaire par rapport au second argument

* $(x, x) \geq 0$ et $(x, x) = 0$ ssi $x = 0$

2) espace des fonctions de carré sommable

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ tel que $\int d^n x \, |f|^2 < \infty$

$(f, g) = \int d^n x \, \bar{f} g$

3) séquences infinies

$z = (z_1, z_2, \ldots)$ $\quad z_i \in \mathbb{C}$

tel que $\sum_{i=1}^{\infty} |z_i|^2 < \infty$

$(z, w) = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{z}_i w_i$

Espace de Hilbert <u>séparable</u> si il possède une base dénombrable

→ soit u_i une base $\quad i \in \mathbb{N}$

par Gram-Schmidt on peut prendre la base orthonormée

$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$

→ $\forall x$: $\quad x = \sum_i x_i u_i \qquad x_i \in \mathbb{C}$

$(x, x) = \sum_i |x_i|^2 < \infty$

En Mécanique Quantique

- espaces de Hilbert séparables (base finie ou dénombrable)

{ mais on voudra manipuler des représentations comme la transformée de Fourier $f(x) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \tilde{f}(k)$ qui sont analogue à une base continue)

- Notation propre à la M.Q. (Dirac)

$*$ vecteur $\in \mathcal{H}$: $|\psi\rangle$ = "ket" (= vecteur colonne V)

$*$ vecteur transposé conjugué : $\langle\psi|$ = "bra" (= vecteur ligne $\bar{V}^T$)
(peut également être vu comme un élément du dual $\mathcal{H}^*$)

$*$ produit scalaire $\langle\varphi|\psi\rangle$ = "braket"

Correspondance entre bra et kets:
Si $|\psi\rangle = \alpha|\phi\rangle + \beta|\phi'\rangle$ alors $\langle\psi| = \bar{\alpha}\langle\phi| + \bar{\beta}\langle\phi'|$

- Les états quantiques sont normalisés

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

(lié à l'interprétation probabiliste)

sont définis à une phase près

$|\psi\rangle$ et $e^{i\varphi}|\psi\rangle$ représentent le même état quantique.

$\longrightarrow$ espace projectif de Hilbert

$|\psi\rangle \sim |\varphi\rangle$ quand $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \neq 0$

Exemples

Spin 1/2 : base orthonormée $= \{ |\uparrow\rangle , |\downarrow\rangle \}$

état arbitraire $|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle$

$$\theta \in [0,\pi] \quad \varphi \in [0, 2\pi]$$

$\theta, \varphi \in$ sphère de Bloch.

si $|\varphi\rangle = \cos\frac{\theta'}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\varphi'} \sin\frac{\theta'}{2} |\downarrow\rangle$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \cos\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta'}{2} + e^{i(\varphi - \varphi')} \sin\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta'}{2}$$

Oscillateur harmonique : base orthonormée $= \{ |n\rangle : n = 0, 1, 2, \ldots \}$
états d'énergie $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

état arbitraire $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

avec $\sum_n |c_n|^2 = 1$

Fonctions de carré sommable

base (non orthonormée) $= \{ x^n e^{-\frac{x^2}{2}} \}$

Opérateur linéaire

$$A : \mathcal{H} \to \mathcal{H} : |\psi\rangle \longrightarrow A|\psi\rangle$$

linéaire : $A\left(a|\psi\rangle + b|\varphi\rangle\right) = a\left(A|\psi\rangle\right) + b\left(A|\varphi\rangle\right)$

produit d'opérateurs : $(AB)|\psi\rangle = A\left(B|\psi\rangle\right)$

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

anticommutateur : $\{A, B\} = AB + BA$

Action de A ~~sur~~ le dual / les bras.

$$A : \mathcal{H}^* \longrightarrow \mathcal{H}^* : \langle\varphi| \longrightarrow \langle\varphi|A$$

défini par $\left(\langle\varphi|A\right)|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right) \quad \forall\, |\varphi\rangle, |\psi\rangle$

$\longrightarrow$ notation $\langle\varphi|A|\psi\rangle$

Adjoint (d'un opérateur
Hermitien conjugué)

Soit $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ un opérateur linéaire

$A^\dagger : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ est défini par $\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | A | \varphi \rangle}$ $\forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle$

si $\{|u_i\rangle\}$ = base orthonormée

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = a_{ij}$$

$$\langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \overline{a_{ji}}$$

$$\longrightarrow A^\dagger = \bar{A}^T = \text{transposée conjuguée}$$

~~[illegible]~~

Propriétés

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$(\lambda A)^\dagger = \bar{\lambda} A^\dagger \qquad \lambda \in \mathbb{C}$$

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Si $A = |\alpha\rangle\langle\beta|$ alors $A^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$

Exemples d'Opérateurs

- $A = |\alpha\rangle\langle\beta|$: $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)|\psi\rangle$

$$= \langle\varphi|\alpha\rangle\langle\beta|\psi\rangle$$

et $A|\psi\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|\psi\rangle$

- Soit $\{|u_i\rangle\}$ = base orthonormée $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$

$\langle u_i|A|u_j\rangle = a_{ij}$ = "éléments de matrice de A"

→ représentation de A dans la base

$$A = \sum_{ij} a_{ij}\, |u_i\rangle\langle u_j|$$

Opérateur Hermitique / Hermitien et Observable

$$A = A^\dagger$$

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = a_{ij} \longrightarrow a_{ij} = \overline{a_{ji}}$$

Equation aux vecteurs propres

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

1°) si $A = A^\dagger$ est Hermitien, les valeurs propres sont réelles.

Preuve $\lambda = \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|A|\psi\rangle} = \overline{\lambda}$

2°) si $A = A^\dagger$ est Hermitien, les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad \text{et} \quad A|\phi\rangle = \lambda'|\phi\rangle$$

Preuve : $\lambda\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle) = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|A|\phi\rangle}$

$$= \overline{\langle\psi|(\lambda'|\phi\rangle)} = \overline{\lambda'}\,\overline{\langle\psi|\phi\rangle} = \lambda'\langle\phi|\psi\rangle$$

$$\longrightarrow \underbrace{(\lambda-\lambda')}_{\neq 0}\langle\phi|\psi\rangle = 0 \longrightarrow \langle\phi|\psi\rangle = 0$$

3°) si $A = A^\dagger$ est Hermitien

- en dimension finie A possède une base orthonormée de vecteurs propres
- en dimension infinie, ce n'est pas nécessairement le cas.

Observable = opérateur Hermitien qui possède une base de vecteurs propres.

$$A|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle \quad i = 1, \dots, g_n \quad g_n = \text{degré de dégénerescence}$$

$$\langle\psi_n^i|\psi_{n'}^{i'}\rangle = \delta_{ii'}\delta_{nn'}$$

exemples d'opérateurs

Projecteurs : $\pi = \pi^+$

$\pi^2 = \pi$

$\longrightarrow$ valeurs propres 0 ou +1 car si $\pi|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\lambda\langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi|\pi|\psi\rangle = \langle\psi|\pi^2|\psi\rangle \\ &= \left(\langle\psi|\pi\right)\left(\pi|\psi\rangle\right) \\ &= \bar{\lambda}\lambda\,\langle\psi|\psi\rangle \quad \text{et } \lambda\in\mathbb{R} \\ &\rightarrow \lambda^2 = \lambda \rightarrow \lambda = 0 \text{ ou } \lambda = 1\end{aligned}$$

$|\psi\rangle\langle\psi|$ est un projecteur $\forall|\psi\rangle$

si $\{|u_i\rangle \ i\in\mathbb{N}\}$ est une base orthonormée et si I est un sousensemble de $\mathbb{N}$, alors $\pi = \sum_{i\in I}|u_i\rangle\langle u_i|$ est un projecteur.

Oscillateur harmonique

base $\{|n\rangle : n = 0, 1, 2, \dots\}$

opérateur destruction : $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ et $a|0\rangle = 0$

éléments de matrice de a : $\langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}$

opérateur création : a^+ = hermitien conjugué de a

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

Opérateur identité

$\mathbb{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \forall|\psi\rangle$

Soit $\{|u_i\rangle\}$ une base orthonormée

alors $\mathbb{I} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$

Spin 1/2 base orthonormée $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$

Matrices de Pauli

notation matricielle

opérateurs

X : $\begin{cases} X|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \\ X|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \end{cases}$ $\qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

vecteurs propres $\qquad$ valeurs propres

$|\uparrow_x\rangle = \dfrac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$ $\qquad +1$

$|\downarrow_x\rangle = \dfrac{|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$ $\qquad -1$

Y : $\begin{cases} Y|\uparrow\rangle = i\,|\downarrow\rangle \\ Y|\downarrow\rangle = -i\,|\uparrow\rangle \end{cases}$ $\qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

vecteurs propres $\qquad$ valeurs propres

$|\uparrow_y\rangle = |\uparrow\rangle + i\,|\downarrow\rangle$ $\qquad +1$

$|\downarrow_y\rangle = |\uparrow\rangle - i\,|\downarrow\rangle$ $\qquad -1$

Z : $\begin{cases} Z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \\ Z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \end{cases}$ $\qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

vecteurs propres $\qquad$ valeurs propres

$|\uparrow\rangle$ $\qquad +1$

$|\downarrow\rangle$ $\qquad -1$

Fonctions de carré sommable

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \text{ ou } L^2(\mathbb{R}^3) \text{ ou } L^2([a,b])$$

↳ éventuellement avec conditions au bord $f(a)=f(b)=0$ ou $f(a)=f(b)$

produit scalaire

$$(f,g) = \int dx\, \overline{f}(x)\, g(x)$$

opérateur $A : f \to Af$

adjoint de $A = A^+$ défini par $(g, Af) = (A^+g, f) = \overline{(f, A^+g)}$

A auto-adjoint si $A = A^+$, càd $(g, Af) = \overline{(f, Ag)}$

<u>exemple</u> : <u>opérateur position X</u>

$$X : f(x) \longrightarrow x f(x)$$

domaine de $X = \mathrm{dom}(X) = \{ f(x) : x f(x) \in \mathcal{H} \}$

si $f, g \in \mathrm{dom}(X)$: $(g, Xf) = \int dx\, \overline{g(x)}\, x f(x) = \int dx\, \overline{(xg)}\, f = \overline{\int dx \overline{f}\,(xg)}$

$$= \overline{(f, Xg)}$$

$\longrightarrow$ X auto adjoint

vecteurs propres de X : $x f(x) = x_0 f(x)$

$$\to (x - x_0) f(x) = 0$$

$$\to f(x) = \delta(x - x_0) \notin \mathcal{H}$$

opérateur impulsion P

$$P : f(x) \longrightarrow -i\partial_x f(x)$$

dom(P) = fonctions dérivables dans $\mathcal{H}$.

si $f, g \in \mathrm{dom}(P)$:
$$
\begin{aligned}
(g, Pf) &= \int dx\, \bar{g}(x)\left(-i\partial_x f(x)\right) \\
&= \int dx\, -i\left(\partial_x \bar{g} f\right) + i\left(\partial_x \bar{g}\right) f \\
&= \underbrace{-i\left[\bar{g} f\right]_{\text{bords}}}_{=0} + \int dx\left(i\partial_x \bar{g}\right) f \\
&= \int dx\, \overline{\left(-i\partial_x g\right)}\, f \\
&= \overline{\int dx\, \bar{f}\left(-i\partial_x g\right)} \\
&= \overline{(f, Pg)}
\end{aligned}
$$

$\longrightarrow$ P auto adjoint.

énergie cinétique $\frac{1}{2m} P^2$

$$P^2 : f(x) \longrightarrow -\partial_x^2 f.$$

est auto adjoint sur son domaine

Exemple de Résultat Rigoureux

Théorie de Sturm-Liouville

$$-\frac{d^2}{dx^2} f(x) + V(x) f(x) = \lambda f(x)$$

$V(x)$ continue sur $[a,b]$

$f(a) = f(b) = 0$

* les valeurs propres sont réelles $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots$
* à chaque valeur propre λ_n correspond un vecteur propre $f_n(x)$ unique, ayant $(n-1)$ zéros sur $[a,b]$
* les vecteurs propres normalisés forment une base ~~or~~orthonormée $L^2([a,b])$ avec la condition $f(a)=f(b)=0$

$$(f_n, f_m) = \int_a^b dx\, f_n(x) f_m(x) = \delta_{nm}$$