

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Université Ferhat Abbas

Sétif



جامعة فرحات عباس

سعيد

Faculté des Sciences
Département de Physique

COURS de Mécanique Quantique 1

L2-Physique-SM

Dr KADA Imene

Année 2023-2024

REMERCIEMENT

*J'espère que le manuscrit en main fera une petite image du long travail de pédagogie de mon premier enseignant de physique à l'université et mon encadreur de recherche Pr **Abdel Aziz MANSOURI**.*

Je tiens à le remercier de m'avoir confié son cours de mécanique quantique pour le mettre en ce document, ainsi que pour tous ses conseils pédagogiques et ses discussions scientifiques. Qu'il trouve en chaque mot et chaque formule de ce manuscrit l'expression de ma gratitude, mon respect et mes remerciements.

*Je remercie Pr **Salim HOUAMEUR** de l'université de Sétif 1, mon enseignant dès ma première année aussi ; d'avoir accepté de lire et évaluer ce manuscrit.*

*J'exprime mes remerciements à Pr **Abdel Halim KAHOU** de l'université de Bordj Bouarirdj pour sa participation à l'expertise de ce document.*

Avant propos

Ce manuscrit présente un cours de physique fondamentale destiné aux étudiants de la deuxième année des filières scientifiques et techniques des universités et des écoles d'ingénieurs d'Algérie. Il répond au programme officiel du module « MECANIQUE QUANTIQUE1, enseigné en deuxième année licence physique du domaine Sciences de la matière SM.

Ce document contient une diversité de connaissances fondamentales et primaires pour compromettre l'étude et la compréhension des applications de la mécanique quantique. Le manuscrit est divisé en cinq chapitres de cours.

Le premier chapitre est à rappeler les notions de base du formalisme de Hamilton afin d'introduire le passage entre la mécanique classique et la mécanique quantique. Une introduction aux aspects de base de la mécanique quantique est exposée dans le deuxième chapitre. Le troisième chapitre comporte l'outil mathématique nécessaire pour l'étude de la physique quantique. Dans le quatrième chapitre sont représentés les postulats de la mécanique quantique. L'étude du modèle de base de l'oscillateur harmonique est contenue au chapitre 5.

Comme perspectives, de futurs travaux sont réservés à la deuxième partie de la mécanique quantique et à une large diversité d'exercices résolus.

Sommaire

Chapitre I: Rappel du formalisme de Hamilton

I Rappel sur le formalisme de Hamilton

- I.1 L'espace des phases
- I.2 les équations de Hamilton
- I.3 Les transformations canoniques
- I.4 La fonction génératrice
- I.5 L'équation de Hamilton Jacobi
- I.6 L'équation de Schrödinger

Chapitre II: Introduction à la mécanique quantique

Pourquoi la mécanique quantique

II.1 théorie de Planck

- 1.1. La quantité de mouvement de la lumière

II.2 La fonction d'onde

2.1 La densité de probabilité de présence

- 2.2. Principe de superposition

II.3 Onde de De Broglie

II.4 Equation de Schrödinger

- 4.1 Les états Stationnaires
- 4.2 Les propriétés des fonctions d'onde
- 4.3 Le courant de Probabilité

II.5 Fonction de Dirac

II.6 Relation d'incertitude

Chapitre 3: Outil Mathématique

III.1.Espace de Hilbert

- 1-2. Espace des fonctions de carré sommable

III.2.Les Opérateurs

- 2-1 Opérateur linéaire
- 2-2 Produit d'opérateurs
- 2-3 Le commutateur
- 2-4 La valeur moyenne d'un opérateur

2-5 Egalité d'opérateurs

2-6 L'opérateur nul

2-7 Propriétés

2-8 L'opérateur adjoint

2-8 L'opérateur hermitique

III.3 Algèbre de Dirac

3.1 Propriétés de l'espace $\mathcal{E}$

3.2. L'espace dual

3.3 Propriétés de l'espace $\mathcal{E}^*$

III.4 Produit tensoriel

III-5 Définitions

5-1 L'opérateur adjoint

5-2 L'opérateur hermétique

5-3 L'opérateur unitaire

5-4 La valeur moyenne

5-5 Egalité d'opérateurs

5-6 Les valeurs propres d'opérateur

III-6 Les opérateurs qui commutent

III-7 L'observable

III-8 Ensemble complet d'observables qui commutent ECOC

III-9 Le projecteur

9-1 Propriétés

9-2 Projecteur élémentaire

9-3 Relation de fermeture

III-10 Les matrices

III-10-1 Définitions

III-11 Les représentations

III-11-1 Définitions

III-11-2 Les observables

III-11-3 Représentation position et quantité de mouvement

3-1 Système à un degré de liberté

a) Représentation X

b) Représentation P

3-2 Système à n degrés de liberté

Chapitre 4: Les postulats de la mécanique quantique

Chapitre 5: L'oscillateur Harmonique

V.1 Rappel sur l'oscillateur harmonique classique

V.2 Pourquoi L'oscillateur quantique

V.3 Problème aux valeurs propres de H

3.1 Etude du problème aux valeurs propres de l'opérateur N

3.2 Conclusion

V.4 Fonction d'onde de l'oscillateur harmonique

V.5 Oscillateur à 1 degré de liberté

5.1 Application : Oscillateur à 2 degrés de liberté

Chapitre1

Formalisme de Hamilton

I. Rappel sur le formalisme de Hamilton

L'étude des systèmes à travers le formalisme de Lagrange conduit à des équations différentielles du second ordre parfois difficiles à résoudre. Hamilton propose une méthode pour l'étude des systèmes physiques, déduite à partir du formalisme de Lagrange qui conduit à résoudre des équations différentielles du 1^{er} ordre (plus facile à résoudre) ; de plus Hamilton reproche à l'espace habituel une insuffisance de taille : un point dans cet espace(habituel) peut appartenir à plusieurs trajectoires du système étudié. La méthode de Hamilton est beaucoup plus adaptée à l'étude des systèmes quantiques et des systèmes statistiques.

I-1 L'espace des phases

Hamilton propose de décrire le mouvement des systèmes physiques dans un espace de dimension $2l$, l coordonnées généralisées et l quantités de mouvement généralisées définies dans la théorie de Lagrange.

I-1-1 Les équations de Hamilton :

Le Lagrangien d'un système d'énergie cinétique E_c et d'énergie potentielle E_p est donné par :

$$\mathcal{L} = E_c - E_p \text{ où } \mathcal{L} = \mathcal{L}(q, \dot{q}, t), \quad (1-1)$$

q et $\dot{q}$ sont les coordonnées généralisées et les vitesses généralisées.

Avec :

$$d\mathcal{L} = \sum_{k=1}^l \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} dq_k + \sum_{k=1}^l \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \quad (1-2)$$

La quantité de mouvement généralisée :

Elle est définie par :

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \quad (1-3)$$

Dans le cas des potentiels non généralisés : $p_k = \frac{\partial E_c}{\partial \dot{q}_k}$

Pour 1 système conservatif : $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0$

$$\frac{dp_k}{dt} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0 ; \dot{p}_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \quad (1-4)$$

On écrit alors :

L'équation (2) s'écrit comme :

$$d\mathcal{L} = \sum_k \dot{p}_k dq_k + \sum_k p_k d\dot{q}_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \quad (1-5)$$

Remarquons que :

$$d(\sum_k p_k \dot{q}_k) = \sum_k dp_k \dot{q}_k + \sum_k p_k d\dot{q}_k \quad (1-6)$$

$$\Rightarrow d\mathcal{L} = \sum_k \dot{p}_k dp_k + [d \sum_k p_k \dot{q}_k - \sum_k dp_k \dot{q}_k] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt$$

$$\Rightarrow d(\mathcal{L} - \sum_k p_k \dot{q}_k) = \sum_k \dot{p}_k dq_k - \sum_k \dot{q}_k dp_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \quad (1-7)$$

L'expression : $\mathcal{L} - \sum_k p_k \dot{q}_k$ sera notée : H dite fonction de Hamilton ou hamiltonien

$$dH = - \sum_k \dot{p}_k dq_k + \sum_k \dot{q}_k dp_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt$$

Et dans ce cas $H = -\mathcal{L} + \sum_k p_k \dot{q}_k$ dépend de q_k, p_k et $t \Rightarrow H = H(q_k, p_k, t)$

On écrit :

$$H = \sum_k p_k \dot{q}_k - \mathcal{L} ; p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \quad (1-8)$$

Résultat :

$\mathcal{L} = \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_0$ (2,1,0 sont les degrés de dépendance en $\dot{q}_k$)

La loi d'Euler pour 1 polynôme $f(x_1, x_2, x_k, x_n)$ de degrés m :

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_k} x_k = mf \Rightarrow \sum_{k=1}^l \frac{\partial f}{\partial x_k} \dot{q}_k = m\mathcal{L} \quad (1-9)$$

Ou bien

$$\sum_{k=1}^l \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k = 2\mathcal{L}_2, \quad \sum_k \frac{\partial \mathcal{L}_1}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k = 1\mathcal{L}_1$$

Pour les potentiels non généralisés :

$$\begin{aligned} H &= \sum \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - \mathcal{L} = 2\mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_1 - (\mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_0) \\ &= \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_0 = E_c + E_p \end{aligned} \quad (1-10)$$

On peut donc déduire que pour les systèmes soumis à des potentiels non généralisés :

$$H = E_c + E_p \quad (1-11)$$

L'hamiltonien représente tout simplement l'énergie mécanique totale du système.

I-1-2 Les équations de Hamilton :

$$\begin{aligned} dH &= \sum_k \dot{q}_k dp_k - \sum_k \dot{p}_k dq_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt = \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} dp_k + \sum_k \frac{\partial H}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial H}{\partial t} dt \\ \Rightarrow \dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k}, \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \text{ et } \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \end{aligned} \quad (1-12)$$

Ce sont les équations de mouvements de Hamilton, dites aussi équations canoniques de mouvement.

Résultat:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} + \sum_k \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial H}{\partial t} \\ \frac{dH}{dt} &= \sum_k \dot{q}_k \dot{p}_k + \sum_k -\dot{p}_k \dot{q}_k + \frac{\partial H}{\partial t} \\ \Rightarrow \frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial t} \end{aligned} \quad (1-13)$$

Si H ne dépend pas explicitement de t alors $\frac{dH}{dt} = 0 \Rightarrow H$ est une constante du mouvement. C'est-à-dire l'hamiltonien ou lagrangien d'un système conservatif ne dépend pas explicitement de t .

I-1-3 Les transformations canoniques

L'étude des systèmes physiques, à travers les théories classiques repose sur un choix d'un système de coordonnées généralisées : $q_1, q_2, \dots, q_l$, pour des raisons de géométrie du système étudié le choix d'un ensemble de coordonnées plus adéquates s'impose, soit par exemple $(Q_1, Q_2, \dots, Q_l)$. Cette transformation ne doit donc pas changer la nature physique du système étudié, les nouvelles coordonnées et les quantités de mouvement correspondantes doivent vérifier les équations de Hamilton. De ce fait : un changement de système de coordonnées $q_k \rightarrow Q_k(q_k, p_k, t)$ entraîne des changements des expressions des quantités de mouvement correspondant et de l'hamiltonien : $p_k \rightarrow P_k(q_k, p_k, t)$ et $H \rightarrow H'$

Et les équations canoniques doivent être vérifiées dans ce nouveau système de coordonnées.

Ce changement doit vérifier les équations canoniques :

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial H'}{\partial P_k}, \dot{P}_k = -\frac{\partial H'}{\partial Q_k} \quad (1-14)$$

Dans ce cas la transformation est dite canonique, et Q_k, P_k doivent être canoniquement conjuguées.

I-1-4 La fonction génératrice

On appelle la fonction qui génère la transformation canonique : $(q_k, p_k, H) \rightarrow (Q_k, P_k, H')$ fonction génératrice, déduite du calcul suivant :

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_k p_k \dot{q}_k - \mathcal{L} \rightarrow H' = \sum_k p_k \dot{Q}_k - \mathcal{L}' \\
 \Rightarrow H - H' &= \sum_k p_k \dot{q}_k - \sum_k P_k \dot{Q}_k + (\mathcal{L}' - \mathcal{L}) \\
 \Rightarrow (H - H')dt &= \sum_k p_k dq_k - \sum_k P_k dQ_k + (\mathcal{L}' - \mathcal{L})dt \\
 \Rightarrow (\mathcal{L} - \mathcal{L}')dt &= \sum_k p_k dq_k - \sum_k P_k dQ_k + (H' - H)dt \\
 \Rightarrow dF &= \sum_k p_k dq_k - \sum_k P_k dQ_k + (H' - H)dt
 \end{aligned} \tag{1-15}$$

$$\text{i.e.} \therefore F = F(q_k, Q_k, t) \Rightarrow dF = \sum_k \frac{\partial F}{\partial q_k} dq_k + \sum_k \frac{\partial F}{\partial Q_k} dQ_k + \frac{\partial F}{\partial t} dt \tag{1-16}$$

$$\begin{aligned}
 \text{à partir des équations (11) et (12)} : \quad p_k &= \frac{\partial F}{\partial q_k}, \quad P_k = -\frac{\partial F}{\partial Q_k} \text{ et } H' - H = \frac{\partial F}{\partial t} \\
 \Rightarrow H &= H(q_k, p_k, t) = H\left(\frac{\partial F}{\partial q_k}, q_k, t\right)
 \end{aligned} \tag{1-17}$$

I-1-5 L'équation de Hamilton Jacobi

L'expression la plus simple que peut prendre H' et lorsque $H' = 0$.

$$\text{Les équations canoniques :} \Rightarrow \begin{cases} \dot{Q}_k = 0 \rightarrow Q_k = cte \\ \dot{P}_k = 0 \rightarrow P_k = cte \end{cases} \tag{1-18}$$

$$\begin{aligned}
 H' - H &= \frac{dF}{dt} \Rightarrow H + \frac{dF}{dt} = 0 \\
 \Rightarrow \frac{dF}{dt} + H\left(\frac{\partial F}{\partial q_k}, q_k, t\right) &= 0
 \end{aligned} \tag{1-19}$$

On appelle cette équation. Équation de Hamilton Jacobi, elle représente un nouveau départ plus général pour l'étude des systèmes physiques.

I-2 L'équation de Schrödinger

La fonction qui décrit l'état d'un système physique s'écrit : $\psi(\vec{r}, t)$. L'évolution du système dans le temps est décrite par la dérivée par rapport au temps.

L'opérateur responsable sur l'évolution dans le temps sera noté U on pourra écrire :

$$U\psi \sim \frac{d\psi}{dt} \tag{1-20}$$

U doit nécessairement dépendant du temps. U est un opérateur de transformation il doit conserver la nature du système physique en question.

U doit être issue d'une transformation canonique réalisée à travers une fonction génératrice :

$$dF = \sum_k p_k dp_k - \sum_k P_k dQ_k + (H' - H)dt \tag{1-21}$$

Dans cette fonction la partie responsable sur le temps est $(H' - H)$:

$$\text{C'est-à-dire :} \quad U \sim (H' - H) \Rightarrow (H' - H)\psi \sim \frac{d\psi}{dt}$$

$$\text{Si :} \quad H' = 0 \Rightarrow H\psi \sim \frac{d\psi}{dt}, \Rightarrow H\psi = cte \frac{d\psi}{dt} \tag{1-22}$$

La constante sera calculée en mécanique quantique.

Chapitre2

Introduction à la mécanique quantique

II. Introduction à la mécanique quantique

Pourquoi la mécanique quantique ?

Au cours des années 1831 et 1834 Faraday a mis en évidence la notion de transport de courant électrique par la matière à travers les expériences d'électrolyse. Il a déterminé la quantité de charge électrique nécessaire pour libérer un équivalent gramme d'un élément chimique.

- La naissance de la physique microscopique est due à la découverte de l'électron par J.J. Thomson en 1897. C'était la première particule élémentaire découverte, en fait il a pu mesurer : e/m .
- L'explication des raies spectrales : après la découverte de l'électron, elles ont été expliquées par une modification du mouvement des électrons.
- En 1900 Planck a émis l'hypothèse d'émission du corps noir : le rayonnement est émis par paquet d'énergie $nh\nu$ où h est une constante, dite constante de Planck, et ν la fréquence du rayonnement émis.
- En 1905 Einstein a expliqué l'effet photoélectrique découvert par Hertz en 1887 où des électrons sont éjectés par des métaux irradiés par la lumière, ou bien des électrons peuvent se déplacer dans un métal et donc la lumière peut transférer de l'énergie aux électrons du métal. Les électrons ne sont émis qu'à partir d'une fréquence seuil, et leur énergie cinétique dépend de la fréquence de la lumière. Ceci a été expliqué par un comportement corpusculaire du rayonnement. Ces particules lumineuses, dites photons d'après Einstein, sont d'énergie : $E_\nu = h\nu = \hbar\omega = h\frac{c}{\lambda}$ (2-1)

Où : $h = 6,626210 \cdot 10^{-34} \text{ Joule.seconde}$ et $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6,582 \cdot 10^{-22} \text{ MeV.s}$

$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ et $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$

En conclusion : la physique quantique s'intéresse aux systèmes microscopiques. Les dimensions utilisées seront de l'ordre : $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ et les énergies seront de l'ordre de h .

II-1 Théorie de Planck :

Cette théorie stipule, après l'observation du rayonnement du corps noir, que l'énergie de la lumière est emmagasinée ou rayonnée par quantité discrète appelée **QUANTA** d'énergie notée $\mathcal{E}$.

Si la fréquence de la lumière en question est ν alors $\mathcal{E} \sim \nu$ et $\mathcal{E} = h\nu$

où h est la constante de Planck ; $h = 6,626210 \cdot 10^{-34} \text{ Joule.s}$

De ce fait, l'énergie d'un oscillateur harmonique doit être un nombre entier de quantas :

$$E = nh\nu \quad (2-2)$$

où ν est la fréquence de l'oscillateur.

L'énergie maximale emmagasinée ou rayonnée par l'oscillateur doit être :

$$\Delta E = h\nu. \quad (2-3)$$

Si l'oscillateur rayonne de la lumière ; il rayonnera des quantités d'égal énergie $h\nu$. Ces quantités sont appelées par Einstein : énergies de particules lumineuses (**énergies de Photons**).

1-1 La quantité de mouvement de la lumière :

D'après Einstein : $\mathcal{E} = mc^2$ et $\mathcal{E}^2 = m^2c^4 = m_0^2c^4 + p^2c^2$ (2-4)

Où : m est la masse d'une particule relativiste et m_0 sa masse au repos.

Pour le photon $m_0 = 0 \Rightarrow \mathcal{E} = pc$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k} \Rightarrow \mathcal{E} = \hbar kc = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} c = hc/\lambda$ (2-5)

Où λ est la longueur d'onde de la lumière en question appelée longueur d'onde de De Broglie.

II-2 La Fonction d'onde :

Une particule quantique doit être décrite à travers deux comportements : ondulatoire et corpusculaire. On ne peut donc plus parler de trajectoire à l'échelle microscopique. On parlera alors

d'un état de la particule. Cet état sera décrit par une fonction qui contient toutes les informations sur la particule et sera noté : $\Psi = \Psi(\vec{r}, t, \sigma)$, σ représente l'ensemble des paramètres qui rentrent dans la description de l'état de la particule.

2-3 La densité de probabilité de présence :

On définit la densité de probabilité de présence par :

$$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^* \quad (2-6)$$

Et la probabilité de présence (probabilité de trouver la particule dans un élément de volume dV) par :

$$dP = |\psi|^2 dV \Rightarrow P = \int_V |\psi|^2 dV \quad (2-7)$$

La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est :

$$P = \int_{\text{espace}} |\psi|^2 dV = 1 \quad (2-8)$$

Cette relation est une condition que doit vérifier la fonction d'onde qui décrit la particule. Cette condition est appelée : condition de normalisation et la fonction d'onde est dite normalisée.

2-4 Principe de superposition :

Un système physique peut se trouver dans plusieurs états. On dira que le système admet plusieurs comportements, chaque comportement est décrit par une fonction d'état. Si le système peut admettre n comportements alors il sera décrit par n fonctions ψ_i , et la fonction qui décrit le comportement global du système sera :

$$\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \dots + c_i\psi_i + \dots + c_n\psi_n \quad (2-9)$$

Le meilleur exemple est le phénomène d'interférence observé dans l'expérience des fentes d'Young, réalisé avec une source d'électrons ; où on dit que l'état des électrons avant la dispersion est constitué par la superposition de plusieurs états.

Les facteurs c_i sont complexes de manière générale et $|c_i|^2$ représente la probabilité de trouver le système dans l'état ψ_i .

II-3 Onde de De Broglie :

Pour décrire une particule à travers les deux comportements ondulatoire et corpusculaire

De Broglie a proposé la description d'une particule quantique libre par une onde plane :

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (2-10)$$

C étant l'amplitude de l'onde et $(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$ sa phase.

En remplaçant les grandeurs ondulatoires $\vec{k}$ et ω par des grandeurs corpusculaires $\vec{p}$ et $\mathcal{E}$:

$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ $\omega = \frac{\mathcal{E}}{\hbar}$ on aura :

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \mathcal{E}t)} \quad (2-11)$$

C'est la fonction d'onde d'une particule quantique libre d'énergie $\mathcal{E}$ et de quantité de mouvement $\vec{p}$. $|C|^2$ représente la densité de probabilité de présence de la particule.

II-4 Equation de Schrödinger :

L'étude des systèmes quantiques est élaborée dans l'espace des phases à travers la théorie de Hamilton. La fonction qui décrit l'état d'un système physique s'écrit $\psi(\vec{r}, t)$, solution de l'équation de Schrodinger (1-22).

$$H\psi = C \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2-12)$$

Calcul de la constante C :

Dans le cas particulier d'une particule libre décrite par la fonction d'onde

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(\vec{r}, t), \quad \text{l'hamiltonien } H \text{ étant l'énergie de système } H = E$$

$$\Rightarrow C \left(-\frac{i}{\hbar} \right) = 1 \quad \Rightarrow C = i\hbar \quad (2-13)$$

Cette constante peut être choisie de cette façon pour toutes les situations. On écrit :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2-14)$$

Résultat :

Remarquons que :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} = A \frac{i}{\hbar} \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \psi$$

$$\Rightarrow \vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Rightarrow \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (2-15)$$

$$\text{On écrit donc pour une particule libre : } H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \quad (2-16)$$

II-4-1 Les états stationnaires :

Soit l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \text{ où } H = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r)$$

On appelle états stationnaires les états pour lesquels la fonction d'onde est séparable :

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})f(t) \quad (2-17)$$

donc :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r) \right) \phi(\vec{r})f(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r})f(t)$$

$$\Rightarrow f(t) \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r) \right) \phi(\vec{r}) = i\hbar \phi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} f(t) \quad (2-18)$$

En divisant par $\phi(\vec{r})f(t)$ on aboutit à :

$$\frac{1}{\phi(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r) \right) \phi(\vec{r}) = \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t)$$

Nous remarquons que les deux membres de cette équation dépendent de variables différentes, ceci ne peut être vrai que lorsque chaque membre est constant.

$$\frac{1}{\phi(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r) \right) \phi(\vec{r}) = \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \text{Cste}$$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \text{Cste} = C \Rightarrow \frac{i\hbar}{C} \frac{\partial f}{\partial t} = f(t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{f} = C dt \Rightarrow f = A e^{\frac{-i}{\hbar} C t} = A e^{-i\omega t} \quad (2-19)$$

La dimension de $C/\hbar$ doit être : 1/seconde, on écrit alors $f = A e^{-i\omega t}$ et la constante C doit être une énergie : $C = E$.

la partie radiale de l'équation donne :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(r) \right) \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (2-20)$$

C'est une équation aux valeurs propres elle est dite équation de Schrödinger stationnaire. Sa résolution donne les énergies E_n du système et les états $\phi_n(\vec{r})$ correspondants.

Les états stationnaires du système seront décrits par les fonctions d'ondes :

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \phi_n(\vec{r}) e^{\frac{-i}{\hbar} E_n t} \quad (2-21)$$

Les $\phi_n(\vec{r})$ seront dites fonctions propres de H et E_n les valeurs propres de H .

4-2 Propriétés des fonctions d'ondes

• Elles sont de carré sommable : $\int |\psi|^2 d\vec{r} < \infty$

• Le produit scalaire : On appelle l'expression $(\varphi, \psi) = \int \varphi^* \cdot \psi d\vec{r}$ (2-22)

produit scalaire entre φ et ψ . Et $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$ (2-23)

• La norme : $\|\psi\|^2 = \int \psi^* \cdot \psi d\vec{r} = (\psi, \psi)$ (2-24)

• La valeur moyenne : La valeur moyenne d'une variable dynamique **A** dans l'état ψ est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^* A \psi d\vec{r}}{\int \psi^* \cdot \psi d\vec{r}} \quad (2-25)$$

• La fonction d'onde représente un état physique, elle doit être :

- Limitée, continue, uniforme, dérivable et de dérivée continue.
- La fonction d'onde est continue à la traversée des équipotentiels mêmes infinis.
- La dérivée n'est pas continue à la traversée des équipotentiels infinis.
- La fonction d'onde est nulle dans une zone de potentiel infini, elle est limitée dans les zones où le potentiel est limité.
- Toutes les valeurs propres (énergies) sont supérieures à $E_{p_{min}}$.

• Les états liés:

les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaires sont dites liées si elles sont de carré sommable. Dans ce cas :

- la densité de courant de probabilité n'est importante que dans une zone de l'espace bien déterminée.
- Les énergies sont discrètes, elles sont dites niveaux d'énergies. On dira que l'énergie est quantifiée.
- Théoriquement à l'état lié correspond une énergie inférieure au bord du puits de potentiel dans lequel le système se trouve.

• Les états non liés:

les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaires sont dites non liées si elles ne sont pas de carré sommable. On les appelle aussi états de diffusion.

- Les solutions sont toujours limitées à l'infini et l'énergie peut prendre toutes les valeurs donc elle est continue.
- Dans ce cas le système est représenté par un paquet d'onde. Les solutions sont alors expliquées par un écoulement de particules soient réfléchies ou transmises. Nous pourrions alors calculer les courants de probabilités de présence et les coefficients de réflexion et de transmission par la suite.

4-3 Le courant de probabilité

De l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi &= i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \dots\dots\dots(*) \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi^* &= -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad \dots\dots\dots(**) \end{aligned} \quad (2-26)$$

On multiplie(*) par ψ^* et (**) par ψ la différence : $\psi^*.(*) - \psi.(**)$ donne :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) + V(r)(\psi^* \psi - \psi \psi^*) &= i\hbar \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} \quad (2-27) \\ \Rightarrow \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \\ \Rightarrow \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla}(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \left[\frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right] &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2-28)$$

C'est une équation de conservation de la densité de probabilité de présence où :

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (2-29)$$

représente le courant de probabilité de présence de particules de masse m .

Remarque :

- Pour les solutions stationnaires $\psi_i(\vec{r}, t) = \phi_i(\vec{r}) e^{\frac{-iE_i t}{\hbar}}$ le courant $\vec{J}$ ne dépend pas de t :

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*) \quad (2-30)$$

- Pour une onde plane $\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ le courant $\vec{J}$ est :

$$\vec{J} = \frac{|A|^2}{m} \hbar \vec{k} \quad (2-31)$$

- Si nous sommes en présence d'un système de particules de même masse qui se propagent dans l'espace on distingue à la traversée d'un équipotentiel trois catégories de particules : incidentes, transmises et réfléchies. On définit les coefficients :

De Réflexion R et de Transmission par :

$$R = \frac{|\vec{J}_r|}{|\vec{J}_i|} = \frac{k_r}{k_i} \left| \frac{A_r}{A_i} \right|^2 \quad (2-32)$$

$$T = \frac{|\vec{J}_t|}{|\vec{J}_i|} = \frac{k_t}{k_i} \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \quad (2-33)$$

Et : $R + T = 1$

II-5 La Fonction de Dirac :

Soit la fonction de Heaviside : $\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x \leq 0 \end{cases} \quad (2-34)$

La dérivée de cette fonction est $\begin{cases} \frac{d\theta}{dx}(x=0) \rightarrow \infty \\ \frac{d\theta}{dx}(x) = 0 \text{ ailleurs} \end{cases}$

On appelle fonction de Dirac la fonction :

$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx} \quad (2-35)$$

C'est une distribution dont les propriétés ne sont connues qu'à travers l'action de $\delta(x)$ sur d'autres fonctions. Elle peut être définie à travers d'autres fonctions notées $\delta_\varepsilon(x)$ tel que :

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon(x) \quad (2-36)$$

- $\delta_\varepsilon(x) = \frac{\varepsilon \sin^2(x/\varepsilon)}{\pi x^2}$, $\delta_\varepsilon(x) = \frac{e^{-(x/\varepsilon)^2}}{\varepsilon \sqrt{\pi}}$,
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\varepsilon(x) dx = 1 \quad \forall \varepsilon$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$ ou bien $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a)$
- De manière générale : $\int_{x_1}^{x_2} \delta(x-a) f(x) dx = \begin{cases} f(a) & \text{si } a \in [x_1, x_2] \\ 0 & \text{si } a \notin [x_1, x_2] \end{cases}$
- $\delta(x) = \delta(-x)$
- $\delta'(x) = -\delta'(-x)$
- $x \delta(x) = -\delta'(x)$
- $\delta\left(\frac{x}{\alpha}\right) = |\alpha| \delta(x)$

$$\triangleright \delta((x-\alpha)(x-\beta)) = \frac{\delta(x-\alpha)+\delta(x-\beta)}{|\alpha-\beta|}$$

$$\triangleright \delta(\vec{r}-\vec{a}) = \delta(x-a_x)\delta(y-a_y)\delta(z-a_z) \text{ et } \int \delta(\vec{r}-\vec{a})f(\vec{r})d\vec{r} = f(\vec{a})$$

$\triangleright$ D'après la transformée de Fourier :

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (2-37)$$

$$\text{la transformée inverse : } f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \quad (2-38)$$

Si $\delta(k)$ est la transformée de Fourier de $\delta(x)$

$$\Rightarrow \delta(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (2-39)$$

$$\text{Et } \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk$$

$$\Rightarrow \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (2-40)$$

II-6 Relation d'incertitude de Heisenberg :

On se propose de calculer l'expression : $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ dans un état $\psi(x)$, Δx représente l'écart quadratique moyen.

$$\text{Soit dans le cas particulier : } \psi(x) = A e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad (2-41)$$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx} = 0 \quad (2-42)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx} \quad (2-43)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = -|A|^2 \frac{\partial}{\partial \alpha^2} \int e^{-\alpha^2 x^2} dx = -|A|^2 \frac{\partial}{\partial \alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} \quad (2-45)$$

$$= -|A|^2 \sqrt{\pi} \left(-\frac{1}{2}\right) (\alpha^2)^{-3/2} = |A|^2 \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) \frac{1}{\alpha^3} \quad (2-46)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \quad (2-47)$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha^2} \quad (2-48)$$

$$\Rightarrow \Delta x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (2-49)$$

Soit la transformée de Fourier de $\psi(x)$:

$$\psi(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{-\alpha^2 x^2/2} dx = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2}{2\alpha^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{\alpha x}{2} + \frac{ik}{\alpha\sqrt{2}}\right)^2} dx \quad (2-50)$$

$$\text{On pose : } y = \frac{\alpha x}{2} + \frac{ik}{\alpha\sqrt{2}} \Rightarrow dy = \frac{\alpha}{2} dx$$

$$\Rightarrow \psi(k) = \frac{e^{-\frac{k^2}{2\alpha^2}}}{\sqrt{2\pi}} A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(y)^2} \frac{\sqrt{2}}{\alpha} dy$$

$$\Rightarrow \psi(k) = A e^{-\frac{k^2}{2\alpha^2}} \quad (2-51)$$

Calculons l'écart quadratique moyen sur k : $\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}$

$$\langle k \rangle = 0 \quad (2-52)$$

$$\langle k^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(k) k^2 \psi(k) dk}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(k) \psi(k) dk} = \frac{\alpha^2 |A|^2 \int k^2 e^{-\frac{k^2}{\alpha^2}} dk}{\alpha^2 |A|^2 \int e^{-\frac{k^2}{\alpha^2}} dk} \quad (2-53)$$

$$\begin{cases} \int k^2 e^{-\frac{k^2}{\alpha^2}} dk = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^3 \\ \int e^{-\frac{k^2}{\alpha^2}} dk = \alpha \sqrt{\pi} \end{cases} \Rightarrow \Delta k = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \quad (2-54)$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta k = \frac{1}{2} \quad (2-55)$$

$$\text{Sachant que : } p = \hbar k \Rightarrow \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar} \Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (2-56)$$

La relation la plus stricte est : $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. C'est la relation d'incertitude de Heisenberg ; pour une particule quantique, si on mesure la position avec une bonne précision la quantité de mouvement sera mesurée avec une mauvaise précision et vice versa.

Chapitre3

Outils Mathématiques

III-Outil mathématique

III-1 L'espace de Hilbert

Les fonctions d'onde, solutions de l'équation de Schrödinger, sont des fonctions normées pour lesquelles nous avons défini un produit scalaire. L'espace convenable qui peut contenir ces fonctions est l'espace de Hilbert.

L'espace de Hilbert :

Est un espace Euclidien, complet et de dimension infinie.

- Euclidien : espace vectoriel muni d'un produit scalaire
- Complet : muni d'une norme
- Dimension infini : on peut trouver dans cet espace n élément linéairement indépendant, $n \in \mathbb{N}$

1-2 L'espace des fonctions de carré sommable :

Les fonctions qui décrivent les états physiques sont normées, continues, limitées et infiniment dérivables.

Nous allons choisir donc, dans l'espace de Hilbert un sous espace F , ($F \subset H$) qui sera l'espace de toutes les fonctions de carrés sommables, de plus les éléments de F doivent être : limités, continus et infiniment dérivables.

On rappelle que F est Euclidien donc muni d'un produit scalaire :

Si f et $g \in F$, le produit scalaire est défini par :

$$(f, g) = \int f^* \cdot g \, dv \quad (3-1)$$

Remarques :

- 1) $(f, g) = (g, f)^*$ ces fonctions sont complexes.
- 2) $(af, g) = a^*(f, g), (f, ag) = a(f, g)$
- 3) $(f + g, h) = (f, h) + (g, h)$
- 4) $(f, f) \in \mathbb{R}$, puisque $(f, f) = \int |f|^2 \, dv = \|f\|^2$, $\|f\|$ est la norme de f .

III-2 Les opérateurs :

Les opérateurs sont des êtres mathématiques qui transforment les fonctions d'onde.

Exemples :

- $\frac{\partial}{\partial x} : f \rightarrow \frac{\partial f}{\partial x} = f'$
- $\int : f \rightarrow g = \int f \, dv$
- $\sqrt{\cdot} : f \rightarrow h = \sqrt{f}$

2-1 L'opérateur linéaire :

Un opérateur est linéaire s'il vérifie :

$$\bullet A(\varphi + \psi) = A\varphi + A\psi \quad (3-2)$$

$$\bullet A(\lambda\varphi) = \lambda A(\varphi) \quad (3-3)$$

Pour les opérateurs cités comme exemples :

$$\bullet \frac{\partial}{\partial x} \text{ est linéaire puisque : } \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}(f + g) = \frac{\partial}{\partial x}(f) + \frac{\partial}{\partial x}(g) \\ \frac{\partial}{\partial x}(\lambda f) = \lambda \frac{\partial}{\partial x}(f) \end{cases}$$

• $\sqrt{\quad}$ n'est pas linéaire : $\sqrt{f+g} \neq \sqrt{f} + \sqrt{g}$

2-2 Produit d'opérateurs :

Si A et B deux opérateurs définis sur F et si $f, g, h \in F$ tel que

$B(f) = g$ et $A(g) = h$ Le produit AB est défini par :

$$(AB)(f) = A[B(f)] = A[g] = h \quad (3-4)$$

Remarque : AB n'est pas toujours égale à BA .

Et on écrira : $\begin{cases} \text{si } AB \neq BA \Rightarrow AB - BA \neq 0 \\ \text{si } AB = BA \Rightarrow AB - BA = 0 \end{cases}$

2-3 Le commutateur :

On appelle l'expression $[A, B]$ commutateur et on le définit par :

$$[A, B] = AB - BA. \quad (3-5)$$

Exemple : calculons $[\hat{x}, \hat{p}_x]$, $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ étant les opérateurs position et quantité de mouvement tel que :

$$\hat{x}.f(x) = xf(x) \quad (3-6)$$

x est la position de la particule, et : $\hat{p}_x f(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(x)$ (3-7)

Pour calculer $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ il faut calculer l'expression : $[\hat{x}, \hat{p}_x]f(x)$

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x]f(x) &= \hat{x}\hat{p}_x.f(x) - \hat{p}_x\hat{x}f(x) \\ &= \hat{x}(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})f(x) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\hat{x}f(x) \\ &= -i\hbar \hat{x}f'(x) + i\hbar(\hat{x}f'(x) + f(x)) \\ &= -i\hbar[\hat{x}f'(x) - \hat{x}f'(x) - f(x)] \\ &= i\hbar f(x) \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \end{aligned} \quad (3-8)$$

2-4 La valeur moyenne d'un opérateur A :

Si A est un opérateur qui opère sur les fonctions d'un système, et si le système se trouve dans l'état $\psi(\vec{r})$, la valeur moyenne de l'opérateur A dans l'état $\psi(\vec{r})$ est donnée par :

$$\langle A \rangle \text{ est donnée par : } \langle A \rangle = \frac{\int \psi^* A \psi d\vec{r}}{\int \psi^* \psi d\vec{r}} \quad (3-9)$$

2-5 Egalité d'opérateurs :

Deux opérateurs A et B sont égaux s'ils vérifient :

$$\forall \psi \in F \text{ alors } \langle A \rangle = \langle B \rangle \quad (3-10)$$

2-6 L'opérateur nul :

Un opérateur A est nul si : $\forall \psi \in F \Rightarrow \langle A \rangle = 0$ (3-11)

2-7 Propriétés :

- 1) $[A, B] = -[B, A]$
- 2) $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
- 3) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

4) $[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]]$ (identité de Jacobi) ces 4 relations sont facile à vérifier (il faut les vérifier).

5) Si A et B commute avec $[B, A]$ on peut montrer : $[B, A^n] = \sum_{i=0}^{n-1} A^i [B, A] A^{n-i-1}$
(Cette relation se démontre par récurrence).

6) $[e^{At}, B] = t[A, B]e^{At}$ si t est faible et si A et B commutent avec $[A, B]$.

7) $e^A \cdot e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$ (relation de Glauber)

Montrons cette dernière relation :

Pour cela, considérons l'expression : $X = e^{At} \cdot e^{Bt}$

On peut écrire donc : $\frac{dx}{dt} = Ae^{At}e^{Bt} + e^{At}Be^{Bt}$ et comme $[e^{At}, B] = e^{At}B - Be^{At}$

On écrit : $\frac{dx}{dt} = AX + ([e^{At}, B] + Be^{At})e^{Bt} \Rightarrow \frac{dx}{dt} = AX + [e^{At}, B]e^{Bt} + Be^{At}e^{Bt}$
 $= AX + te^{At}[A, B]e^{Bt} + BX \quad *$

On peut montrer que si $[C, D] = 0$ alors C commute avec chaque fonction de D c'est-à-dire : $[C, f(D)] = 0$

La relation $*$ devient : $\frac{dx}{dt} = AX + BX + t[A, B]X \Rightarrow \frac{dx}{x} = \{(A + B) + t[A, B]\}dt$

$$\Rightarrow \ln X = (A + B)t + \frac{t^2}{2}[A, B] \Rightarrow X = cte \cdot e^{(A+B)t + \frac{t^2}{2}[A,B]}$$

La constante n'est autre que $X(t = 0) \Rightarrow cte = 1$. Cette relation est valable $\forall t$.

pour $t = 1 \Rightarrow X = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$

III-3 Algèbre de Dirac

Introduction :

Les solutions de l'équation de Schrödinger sont des fonctions du sous espace F ($F \subset H$), ces fonctions de l'espace F sont capables de décrire les systèmes simples sans aucun problème. Mais par analogie à l'étude des systèmes dynamiques dans la théorie classique, l'étude devient assez simple si on passe à la description vectorielle. De plus pour les particules quantiques il y a d'autres degrés de liberté qui pourront intervenir (le spin par exemple), et dans ce cas l'étude des états des systèmes dans le sous espace F devient très délicate. Dirac a proposé, par analogie à ce qui a été fait pour la mécanique classique, de faire l'étude dans un autre espace qui sera noté : $\mathcal{E}$ dont les éléments sont des vecteurs.

$\mathcal{E}$ est aussi un sous espace de H : $\mathcal{E} \subset H$, les éléments de $\mathcal{E}$ sont des vecteurs, ils seront notés selon Dirac : $|\psi\rangle$ dits ket.

Tel que : à chaque fonction $\psi(\vec{r}, t)$ de F on attribue un ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$

III-3-1 Propriété de $\mathcal{E}$:

a) $\mathcal{E}$ est un espace vectoriel où le principe de superposition y est vérifié : la superposition de deux kets de $\mathcal{E}$ donne un ket dans $\mathcal{E}$.

b) La combinaison linéaire :

On dira qu'un ket $|\psi\rangle$ est une combinaison linéaire de n ket $|\varphi_i\rangle$ si on peut trouver n constantes λ_i non nulles telles que :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i |\varphi_i\rangle \quad (3-12)$$

Et si le passage entre les différents $|\varphi_i\rangle$ et λ_i se fait d'une manière continue cette relation devient :

$$|\psi\rangle = \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) |\varphi(x)\rangle dx \quad (3-13)$$

La base et la dimension :

Par analogie à l'analyse vectorielle classique dans le plan par exemple, on appelle les vecteurs unitaires : $\vec{i}$ et $\vec{j}$ vecteurs de base et on dit que : $\{\vec{i}, \vec{j}\}$ représente une base dans le plan et le nombre de vecteur de base (dans ce cas deux vecteurs) sera appelé dimension de l'espace vectoriel.

De même, on dira donc :

Si les kets $|\varphi_i\rangle$ dans la propriété (b) sont linéairement indépendants et si :

$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $|\psi\rangle$ s'écrit d'une manière unique :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i |\varphi_i\rangle \quad (3-14)$$

on dira que l'ensemble : $\left\{ |\varphi_i\rangle \right\}_{i=1, n}$ représente une base dans $\mathcal{E}$, et le nombre de ces vecteurs de base "n" sera la dimension de $\mathcal{E}$.

c) $\mathcal{E}$ est un espace vectoriel, toutes les propriétés de l'algèbre linéaire y sont vérifiées. L'élément neutre de $\mathcal{E}$ sera le ket qui ne représente aucun état physique.

III-3-2 L'espace dual $\mathcal{E}^*$:**Rappel :**

On appelle fonctionnelle la fonction qui transforme une fonction en un scalaire.

Dans notre cas les fonctionnelles transforment les fonctions d'onde, elles les transforment en des scalaires d'une manière générale complexes.

De ce fait : on appelle l'ensemble des fonctionnelles qui appartiennent à $\mathcal{E}^*$ (espace dual de $\mathcal{E}$) et qui transforment les éléments de $\mathcal{E}$, les vecteurs « bra », notés selon Dirac $\langle |$.

III-3-2-1 Propriétés :

a) Si $\langle u| \in \mathcal{E}^*$ et $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $\langle u|$ transforme $|\varphi\rangle$ comme : $\langle u|\varphi\rangle$, ($\langle u|\varphi\rangle \in \mathbb{C}$) et transforme ($|\varphi\rangle + |\psi\rangle$) comme :

$$\langle u|(|\varphi\rangle + |\psi\rangle) = \langle u|\varphi\rangle + \langle u|\psi\rangle$$

Et si $\langle u|$ et $\langle v| \in \mathcal{E}^*$ et $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$ alors $(\langle u| + \langle v|)|\varphi\rangle = \langle u|\varphi\rangle + \langle v|\varphi\rangle$

Et les expressions $\langle u|\varphi\rangle, \langle u|\psi\rangle$ sont des nombres scalaires $\in \mathbb{C}$.

b) Le bras nul :

Un bra $\langle u|$ est nul si : $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}, \langle u|\psi\rangle = 0$

c) Egalité de bras :

On dit que deux éléments $\langle u|$ et $\langle v|$ de $\mathcal{E}^*$ sont égaux s'ils transforment un ket $|\psi\rangle$ de la même façon : $\langle u|\psi\rangle = \langle v|\psi\rangle$.

Remarque :

- L'expression $\langle u|\psi\rangle$ donne toujours un scalaire $\forall \langle u|$ et $\forall |\psi\rangle$ on peut donc appeler $\langle u|\psi\rangle$ produit scalaire.

Ceci nous rappelle l'expression que nous avons vu au chapitre 2, où nous avons défini le produit scalaire entre deux fonctions de l'espace F : $(\varphi, \psi) = \int \varphi^* \cdot \psi d\vec{v}$ c'est-à-dire $\langle u|\psi\rangle$ sera équivalent à (u, ψ) et u doit être une fonction de F .

3-2-2 Définitions :

➤ Nous allons supposer qu'à chaque ket $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$ correspond un bra $\langle \psi|$ dans $\mathcal{E}^*$ c'est-à-dire

Si $|\psi\rangle \in \mathcal{E} \Rightarrow \exists \langle \psi| \in \mathcal{E}^*$ tel que $\langle \psi|$ est le complexe conjugué de $|\psi\rangle$ ($\langle \psi| = (|\psi\rangle)^*$) :

$$\langle \psi| = (|\psi\rangle)^* \quad (3-15)$$

➤ Cette correspondance est définie non linéaire c'est-à-dire :

$$\text{Si : } |\psi\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle \Rightarrow \langle \psi| = \lambda_1^* \langle \varphi_1| + \lambda_2^* \langle \varphi_2| \quad (3-16)$$

➤ **Le produit scalaire et la norme :**

- Le produit scalaire entre deux kets $|\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle$ sera défini par :

$$\langle \varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C} \quad (3-17)$$

$$\text{Et} \quad \langle \varphi|\psi\rangle = (\langle \psi|\varphi\rangle)^* \quad (3-18)$$

$$\text{- La norme de } |\psi\rangle \text{ sera notée } \|\psi\rangle \text{ et } \|\psi\|^2 = \langle \psi|\psi\rangle \quad (3-19)$$

Remarque : $\langle \psi|\psi\rangle \geq 0, \langle \psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$, et $\langle \psi|\psi\rangle = 0$ ssi $|\psi\rangle = 0$.

➤ **L'orthogonalité :**

$$\text{Deux kets } |\varphi\rangle \text{ et } |\psi\rangle \text{ sont orthogonaux, si } \langle \varphi|\psi\rangle = \langle \psi|\varphi\rangle = 0 \quad (3-20)$$

➤ **Espaces orthogonaux :**

Deux sous espaces $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2 \subset \mathcal{E}$ sont orthogonaux si :

$$\forall |\varphi_1\rangle \in \mathcal{E}_1 \text{ Et } \forall |\varphi_2\rangle \in \mathcal{E}_2 \text{ on a } \langle \varphi_1|\varphi_2\rangle = 0 \quad (3-21)$$

➤ **Espaces complémentaires :**

Si $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2 \subset \mathcal{E}$ et si $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $|\psi\rangle$ s'écrit d'une manière unique :

$$|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle, \quad |\varphi_1\rangle \in \mathcal{E}_1 \text{ et } |\varphi_2\rangle \in \mathcal{E}_2$$

On dira alors que $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ sont complémentaires dans $\mathcal{E}$ et on écrit :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \quad (3-22)$$

Et : $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont les projections de $|\psi\rangle$ sur $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$.

➤ **Bases orthonormées :**

On appelle l'ensemble de kets $\left\{ |\varphi_i\rangle \right\}_{i=1, n}$, base dans $\mathcal{E}$ si $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $|\psi\rangle$ s'écrit d'une manière

$$\text{unique : } |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i |\varphi_i\rangle \quad (3-23)$$

• La base est dite normée si $\langle \varphi_j|\varphi_j\rangle = 1 \quad (j = 1, 2, n)$

• La base est dite orthogonale si $\langle \varphi_i|\varphi_j\rangle = 0 \text{ pour } (i \neq j)$

Ces deux relations sont assemblées par la relation :

$$\langle \varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3-24)$$

Si la base vérifie cette dernière relation la base est dite orthonormée (c'est à dire orthogonale et normée).

➤ **Base continue :**

Dans le cas d'une base continue : $\left\{ |\varphi(x)\rangle \right\}_{x \in [x_1, x_2]}$

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}, \quad |\psi\rangle = \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) |\varphi(x)\rangle dx \quad (3-25)$$

Et la relation d'ortho-normalisation devient :

$$\langle \varphi(x)|\varphi(x')\rangle = \delta(x - x') \quad (3-26)$$

$\delta(x - x')$ est la fonction de Dirac.

Remarque : la composante d'un ket $|\psi\rangle$ sur un élément de la base :

Cas discret : composante de $|\psi\rangle$ sur $|\varphi_k\rangle$:

$$\text{Si } |\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle \Rightarrow \langle \varphi_k|\psi\rangle = \langle \varphi_k|\sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle = \sum_i \lambda_i \langle \varphi_k|\varphi_i\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_k | \psi \rangle = \sum_i \lambda_i \delta_{ki} = \lambda_k \quad (3-27)$$

λ_k est donc la composante de $|\psi\rangle$ sur l'élément de base $|\varphi_k\rangle$.

Cas continu : composante de $|\psi\rangle$ sur $|\varphi(x')\rangle$ sera : $\langle \varphi(x') | \psi \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \varphi(x') | \psi \rangle &= \langle \varphi(x') | \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) |\varphi(x)\rangle dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) \langle \varphi(x') | \varphi(x) \rangle dx = \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) \delta(x' - x) dx \\ &\Rightarrow \langle \varphi(x') | \psi \rangle = \int_{x_1}^{x_2} \lambda(x) \delta(x - x') dx \end{aligned}$$

La fonction $\delta(x)$ est paire et comme $x' \in [x_1, x_2]$:

$$\Rightarrow \langle \varphi(x') | \psi \rangle = \lambda(x') \quad (3-28)$$

$\lambda(x')$ est la composante de $|\psi\rangle$ sur l'élément de base $|\varphi(x')\rangle$.

III-4 Le produit tensoriel :

Ce produit est défini entre deux matrices, en algèbre linéaire.

Dans notre cas, ce produit est défini pour un système quantique et décrit par deux fonctions de nature différentes.

Exemple : l'électron possède un spin. L'état de l'électron est décrit par un état global qui contient l'état spatial et l'état du spin.

Le produit tensoriel est défini par :

Si nous sommes en présence de deux espaces : $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ leurs états seront notés : $|\varphi^{(1)}\rangle$ et $|\varphi^{(2)}\rangle$.

L'opération :

$$|\varphi^{(1)}\rangle \cdot |\varphi^{(2)}\rangle = |\varphi^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle \quad (3-29)$$

est dite produit tensoriel, et elle est :

a) Commutative : $|\varphi^{(1)}\rangle \cdot |\varphi^{(2)}\rangle = |\varphi^{(2)}\rangle \cdot |\varphi^{(1)}\rangle$

b) Distributive par rapport à l'addition : si $|\varphi^{(1)}\rangle = \alpha|u^{(1)}\rangle + \beta|v^{(1)}\rangle$ alors :

$|\varphi^{(1)}\rangle \cdot |\varphi^{(2)}\rangle = \alpha|u^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle + \beta|v^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle$ et les états $|\varphi^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle$ sont des éléments d'un espace $\mathcal{E}$ qui résulte du produit tensoriel des deux espaces $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$. On écrit : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$

Si $\mathcal{E}_1$ est de dimension N_1 et $\mathcal{E}_2$ de dimension N_2 , la dimension de $\mathcal{E}$ sera : $N = N_1 \cdot N_2$

Résultat :

Les opérateurs définis sur $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ commutent.

Si $|\psi^{(1)}\rangle = A^{(1)}|\varphi^{(1)}\rangle$ et $|\psi^{(2)}\rangle = A^{(2)}|\varphi^{(2)}\rangle$

le produit :

$$|\psi^{(1)}\psi^{(2)}\rangle = |\psi^{(2)}\psi^{(1)}\rangle \text{ ou bien } |\psi^{(1)}\rangle \cdot |\psi^{(2)}\rangle = |\psi^{(2)}\rangle \cdot |\psi^{(1)}\rangle$$

c'est-à-dire : $A^{(1)}|\varphi^{(1)}\rangle \cdot A^{(2)}|\varphi^{(2)}\rangle = A^{(2)}|\varphi^{(2)}\rangle \cdot A^{(1)}|\varphi^{(1)}\rangle$

Mais $A^{(1)}$ n'agit pas sur $|\varphi^{(2)}\rangle$ et vice versa on peut donc écrire :

$$A^{(1)}A^{(2)}|\varphi^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle = A^{(2)}A^{(1)}|\varphi^{(2)}\varphi^{(1)}\rangle$$

Et $|\varphi^{(1)}\varphi^{(2)}\rangle = |\varphi^{(2)}\varphi^{(1)}\rangle \Rightarrow A^{(1)}A^{(2)} = A^{(2)}A^{(1)}$

$$\Rightarrow [A^{(1)}, A^{(2)}] = 0 \quad (3-30)$$

III-5 Définitions

5-1 L'opérateur adjoint :

Cette définition est aussi utilisée dans l'analyse matricielle. L'opérateur adjoint est introduit pour nécessité de calcul, il est déduit par de simples remarques.

Soit A un opérateur linéaire défini sur $\mathcal{E}$ c'est-à-dire il transforme les éléments de $\mathcal{E}$ dans $\mathcal{E}$

$$A|\varphi\rangle = |\varphi'\rangle.$$

Soit l'expression : $Q = \langle \psi | \varphi' \rangle$ (un produit scalaire) $Q = \langle \psi | A | \varphi \rangle$ et $Q^* = \langle \varphi' | \psi \rangle$

D'une manière analogue à Q , on écrit $Q^* = \langle \varphi' | \psi \rangle = \langle \varphi' | A | \psi \rangle$ et A doit certainement avoir une relation très étroite avec A il sera appelé : adjoint de A et sera noté A^+ , et Q^* devient :

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

$$\text{Donc si : } |\varphi'\rangle = A|\varphi\rangle \Rightarrow \langle \varphi'| = \langle \varphi | A^+. \quad (3-31)$$

Résultats :

$$1) (\lambda B)^+ = \lambda^* B^+, \lambda \in \mathbb{C}$$

Si dans les expressions précédentes $A = \lambda B$ c'est-à-dire $Q = \langle \psi | \lambda B | \varphi \rangle = \lambda \langle \psi | B | \varphi \rangle$

$$\Rightarrow Q^* = \lambda^* (\langle \psi | B | \varphi \rangle)^* = \lambda^* \langle \varphi | B^+ | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow Q^* = \langle \varphi | \lambda^* B^+ | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow (A)^+ = \lambda^* B^+$$

$$\Rightarrow (\lambda B)^+ = \lambda^* B^+ \quad (3-32)$$

$$2) (A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (3-33)$$

$$3) (A^+)^+ = A \quad (3-34)$$

$$4) (AB)^+ = B^+ A^+ \quad (3-35)$$

Démonstration de (4) :

Soit $|\varphi'\rangle = B^+|\varphi\rangle$, $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ donc $\langle \varphi'| = \langle \varphi | B$ et $\langle \psi'| = \langle \psi | A^+$

$$\Rightarrow \langle \varphi' | \psi' \rangle = \langle \varphi | B A | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow (\langle \varphi' | \psi' \rangle)^* = (\langle \varphi | B A | \psi \rangle)^*$$

C'est-à-dire $\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | (B A)^+ | \varphi \rangle$

D'autre part (Par construction) : $\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | A^+ B^+ | \varphi \rangle$

en comparant ces deux dernières relations : $\Rightarrow (B A)^+ = A^+ B^+$

5-2 L'opérateur hermitique :

L'opérateur A est dit hermitique si : $A = A^+.$ (3-36)

Un opérateur hermitique A est dit positif si : $\langle \varphi | A | \varphi \rangle \geq 0$ (3-37)

5-3 L'opérateur unitaire :

Un opérateur U est dit unitaire si : $U^+ = U^{-1} \Rightarrow U U^+ = U^+ U = \mathbb{I}$ (3-38)

Résultat :

Si $|\psi\rangle = U|\varphi\rangle \Rightarrow \langle \psi | = \langle \varphi | U^+$ la norme de $|\psi\rangle$ est donc :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi | U^+ U | \varphi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \quad (3-39)$$

$\Rightarrow U$ ne change pas la norme du vecteur qu'il transforme.

5-4 La valeur moyenne :

La valeur moyenne d'un opérateur A dans un état d'un système $|\psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (3-40)$$

5-5 Egalité d'opérateurs :

Deux opérateurs A et B sont égaux si :

$$\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{E} \Rightarrow \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | B | \varphi \rangle \quad (3-41)$$

5-6 Valeurs propres d'opérateur :

La valeur propre d'un opérateur est la valeur qu'on peut trouver lorsqu'on mesure l'opérateur dans un état du système.

Si A est un opérateur opérant sur les états d'un système $|\varphi_i\rangle$ et si :

$$A|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle \quad (3-42)$$

λ_i représente la valeur qu'on peut trouver si on mesure A dans l'état $|\varphi_i\rangle$.

Cette dernière équation est dite équation aux valeurs propres : $|\varphi_i\rangle$ est dit vecteur propre de A relatif à la valeur propre λ_i et l'ensemble des valeurs propres $\{\lambda_i\}$ est dit spectre de A .

Résultats :

1) Si λ est une valeur propre de A relative à "l" kets propres $\left\{ |\varphi_i\rangle \right\}_{i=1, l}$, on dira que la valeur propre λ est dégénérée et "l" le degré de dégénérescence, dans ce cas toute combinaison linéaire des kets $|\varphi_i\rangle$ donne un ket propre de A relatif à la même valeur propre " λ ".

C'est-à-dire si :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i=1}^n a_i |\varphi_i\rangle \\ \Rightarrow A|\psi\rangle &= A \sum_{i=1}^n a_i |\varphi_i\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\varphi_i\rangle \\ \Rightarrow A|\psi\rangle &= \sum_{i=1}^n a_i \lambda |\varphi_i\rangle = \lambda \sum_{i=1}^n a_i |\varphi_i\rangle \\ \Rightarrow A|\psi\rangle &= \lambda |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3-43)$$

Donc $|\psi\rangle$ est ket propre de A relatif à la valeur propre λ .

2) Le résultat (1) laisse comprendre qu'on peut trouver un ensemble de kets propres de A tous générés par les kets $\left\{ |\varphi_i\rangle \right\}_{i=1, l}$ et relatifs à la même valeur propre " λ ". Nous dirons que :

nous pouvons former un sous espace qui sera noté : $\mathcal{E}_\lambda$ de base $\left\{ |\varphi_i\rangle \right\}_{i=1, l}$ donc de dimension " l ".

Les éléments de $\mathcal{E}_\lambda$ sont tous kets propres de A relatifs à la valeur propre " λ ".

3) Si A est un opérateur hermitique toutes ses valeurs propres sont réelles.

En effet si : $A|\varphi\rangle = \alpha|\varphi\rangle$ et en multipliant par $\langle \varphi |$

$$\Rightarrow \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | \alpha | \varphi \rangle = \alpha \langle \varphi | \varphi \rangle$$

$$\Rightarrow (\langle \varphi | A | \varphi \rangle)^* = \alpha^* (\langle \varphi | \varphi \rangle)^*$$

$$\Rightarrow \langle \varphi | A^\dagger | \varphi \rangle = \alpha^* \langle \varphi | \varphi \rangle$$

$$\text{Mais } A = A^\dagger \Rightarrow \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \alpha^* \langle \varphi | \varphi \rangle$$

$$\Rightarrow \alpha^* = \alpha \Rightarrow \alpha \text{ réelle} \quad (3-44)$$

4) deux vecteurs propres $|\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle$ d'un opérateur hermitique A relatifs aux valeurs propres α et β respectivement. Si $\alpha \neq \beta$ alors $|\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle$ sont orthogonaux.

En effet :

$$A|\varphi\rangle = \alpha|\varphi\rangle \Rightarrow \langle \varphi|A = \alpha \langle \varphi|$$

$$A|\psi\rangle = \beta|\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi|A = \beta \langle \psi|$$

Puisque $A = A^\dagger$ donc α et β réelles.

On peut écrire l'expression $\langle \psi|A|\varphi\rangle$ de deux manières :

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

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

La soustraction de l'une de l'autre : $0 = (\alpha - \beta) \langle \psi|\varphi\rangle$ si $\alpha \neq \beta \Rightarrow \langle \psi|\varphi\rangle = 0$

$$\Rightarrow |\psi\rangle \perp |\varphi\rangle \quad (3-45)$$

$|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ sont Orthogonaux.

III-6 Les opérateurs qui commutent

Si deux opérateurs A et B commutent, ils possèdent au moins un ensemble de kets propres communs.

En effet si : $[A, B] = 0 \Rightarrow [A, B]|\psi\rangle = 0$

Ou bien : $AB|\psi\rangle - BA|\psi\rangle = 0 \Rightarrow AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle$

Si $|\psi\rangle$ est ket propre de A , il vérifie donc : $A|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$

Et nous devons montrer que $|\psi\rangle$ est ket de B .

Sachant que : $AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle$

$$= B\alpha|\psi\rangle = \alpha B|\psi\rangle$$

On peut écrire $A(B|\psi\rangle) = \alpha(B|\psi\rangle)$ ou bien $A|\psi'\rangle = \alpha|\psi'\rangle$

Ce qui veut dire que $|\psi'\rangle$ est ket propre de A relatif à la même valeur propre α .

Donc $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ sont équivalents : $|\psi'\rangle \equiv |\psi\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle = cte |\psi\rangle = \beta|\psi\rangle$

$$\Rightarrow B|\psi\rangle = \beta|\psi\rangle \quad (3-46)$$

ce qui veut dire que $|\psi\rangle$ est ket propre de B relatif à la valeur propre β .

Donc si $[A, B] = 0$ et si $|\psi\rangle$ est ket propre de $A \Rightarrow |\psi\rangle$ est aussi ket propre de B .

Cas inverse :

Si un ensemble de ket propre est commun à deux opérateurs A et $B \Rightarrow [A, B] = 0$

Si : $A|U\rangle = \lambda|U\rangle$ et $B|U\rangle = \mu|U\rangle$

$$\Rightarrow AB|U\rangle = A\mu|U\rangle = \mu A|U\rangle = \mu\lambda|U\rangle$$

$$\Rightarrow BA|U\rangle = B\lambda|U\rangle = \lambda B|U\rangle = \lambda\mu|U\rangle$$

$$\Rightarrow AB|U\rangle = BA|U\rangle \Rightarrow [A, B] = 0 \quad (3-47)$$

III-7 L'observable :

On appelle observable tout opérateur hermitique possédant un ensemble de kets propres donc une base qui pourrait générer tout l'espace vectoriel et qui peut représenter une variable dynamique.

III-8 Ensemble complet d'observables qui commutent ECOC :

Un ensemble d'observables forment un **ECOC** : si ces observables commutent deux à deux et si les vecteurs propres de ces observables s'écrivent d'une manière unique par rapport aux valeurs propres i.e. :

- Si l'ensemble est formé d'une seule observable et A, λ une de ses valeurs propres.

$$A|\varphi_\lambda\rangle = \lambda|\varphi_\lambda\rangle \quad (3-48)$$

(un seul ket propre correspond à la valeur propre λ) $\Rightarrow \{A\}$ forme un ECOC.

$$\text{Si } \lambda \text{ est dégénéré : } A|\varphi_{1\lambda}\rangle = \lambda|\varphi_{1\lambda}\rangle \text{ et } A|\varphi_{2\lambda}\rangle = \lambda|\varphi_{2\lambda}\rangle \quad (3-49)$$

Il y a deux kets propres correspondant à la même valeur propre λ ; il y a deux manières d'écrire les kets propres par rapport à la valeur propre λ donc $\{A\}$ n'est pas ECOC.

- Si l'ensemble est formé par deux observables $\{A, B\}$

$$A|\varphi_\lambda\rangle = \lambda|\varphi_\lambda\rangle, B|\psi_\mu\rangle = \mu|\psi_\mu\rangle \quad (3-50)$$

A et B commutent $\Rightarrow |\varphi_\lambda\psi_\mu\rangle$ est ket propre de A et de B

Et si pour l'ensemble des valeurs propres $\{\lambda, \mu\}$ les vecteurs propres $|\varphi_\lambda\psi_\mu\rangle$ s'écrivent de la même manière $\Rightarrow \{A, B\}$ est un ECOC.

III-9 Le projecteur :

Soient $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ deux sous espaces complémentaires dans $\mathcal{E}$.

$$\text{Et si } |\varphi^{(1)}\rangle \in \mathcal{E}_1 \text{ et } |\varphi^{(2)}\rangle \in \mathcal{E}_2 \Rightarrow \langle \varphi^{(1)} | \varphi^{(2)} \rangle = 0 \quad (3-51)$$

On définit l'opérateur P_1 tel que : pour $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$:

$$P_1|\varphi\rangle = |\varphi^{(1)}\rangle \quad (3-52)$$

P_1 est dit projecteur sur $\mathcal{E}_1$.

III-9-1 Propriétés

➤ P_1 est hermitique

Soient $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathcal{E}$

$$\begin{aligned} \langle \psi | P_1 | \varphi \rangle &= \langle \psi | \varphi^{(1)} \rangle = (\langle \psi^{(1)} | + \langle \psi^{(2)} |) | \varphi^{(1)} \rangle \\ &= \langle \psi^{(1)} | \varphi^{(1)} \rangle = \langle \psi^{(1)} | \varphi^{(1)} \rangle + \langle \psi^{(1)} | \varphi^{(2)} \rangle \\ &= \langle \psi^{(1)} | (|\varphi^{(1)}\rangle + |\varphi^{(2)}\rangle) = \langle \psi^{(1)} | \varphi \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Mais si : } P_1|\psi\rangle &= |\psi^{(1)}\rangle \Rightarrow \langle \psi | P_1^\dagger = \langle \psi^{(1)} | \\ &\Rightarrow \langle \psi | P_1 | \varphi \rangle = \langle \psi | P_1^\dagger | \varphi \rangle \\ &\Rightarrow P_1 = P_1^\dagger \end{aligned} \quad (3-53)$$

➤ $P^2 = P$

$$\begin{aligned} P^2 &= P(P|\varphi\rangle) = P|\varphi^{(1)}\rangle \\ &= |\varphi^{(1)}\rangle = P|\varphi\rangle \\ &\Rightarrow P^2 = P \end{aligned} \quad (3-54)$$

➤ Les valeurs propres de P sont (0,1)

$$\begin{aligned}
P|\varphi\rangle &= \lambda|\varphi\rangle \\
P^2|\varphi\rangle &= P(P|\varphi\rangle) = P\lambda|\varphi\rangle \\
\lambda P|\varphi\rangle &= \lambda^2|\varphi\rangle \\
P = P^2 &\Rightarrow \lambda|\varphi\rangle = \lambda^2|\varphi\rangle \\
\Rightarrow \lambda - \lambda^2 &= 0 \Rightarrow \lambda(1 - \lambda) = 0 \\
\Rightarrow \lambda &= \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{3-55}$$

III-9-2 Le projecteur élémentaire

Soit $\mathcal{E}_1$ un sous espace à une dimension et $|e_1\rangle$ l'élément de base.

$$\begin{aligned}
|\varphi^{(1)}\rangle &= \alpha|e_1\rangle \text{ et } P_1|\varphi^{(1)}\rangle = |\varphi^{(1)}\rangle \\
\Leftrightarrow P_1(\alpha|e_1\rangle) &= \alpha|e_1\rangle \\
&= \alpha|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle = |e_1\rangle\langle e_1|(\alpha|e_1\rangle) \\
\Leftrightarrow P_1 &= |e_1\rangle\langle e_1|
\end{aligned} \tag{3-56}$$

P_1 est dit projecteur élémentaire, il projette sur un élément de base.

On peut donc écrire $P_1 = |e_1\rangle\langle e_1|$; $P_2 = |e_2\rangle\langle e_2|$; ...

montrons que P_1 est un projecteur :

Il faut montrer que : $P_1 = P_1^+$ et $P_1 = P_1^2$

- $P_1^+ = (|e_1\rangle\langle e_1|)^+ = P_1$
- $P_1^2 = |e_1\rangle\underbrace{\langle e_1|e_1\rangle}_{=1}|e_1\rangle = |e_1\rangle\langle e_1| = P_1$

Donc P_1 est vraiment un projecteur.

Si la base d'un espace vectoriel est formée de n élément $\{|e_i\rangle ; i = 1, n\}$

Alors le projecteur qui projette sur tout l'espace sera $P_n = \sum P_i = \sum_{i=1}^n |e_i\rangle\langle e_i|$
(3-57)

Montrons que P_n est vraiment un projecteur :

Il faut montrer que : $P_n = P_n^+$ et $P_n = P_n^2$

$$\begin{aligned}
\text{➤ } P_n^2 &= \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \cdot \sum_j |e_j\rangle\langle e_j| = \sum_{i,j} |e_j\rangle\langle e_j|e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i,j} |e_j\rangle\langle e_j| \delta_{ij} \\
&= \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = P_n
\end{aligned}$$

➤ On peut montrer aussi que $P_n^+ = P_n$
 $\Rightarrow P_n = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$ est un projecteur.

Dans le cas d'une base continue $\{|x\rangle / x \in [x_1, x_2]\}$:

$$\begin{aligned}
P &= \int_{x_1}^{x_2} |x\rangle\langle x| dx \\
P^2 &= \int_{x_1}^{x_2} |x\rangle\langle x| dx \int_{x'_1}^{x'_2} |x'\rangle\langle x'| dx' \\
' \Rightarrow P^2 &= \iint |x\rangle \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} \langle x'| dx dx'
\end{aligned} \tag{3-58}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int (\int |x\rangle\langle x'| \delta(x-x') dx') dx \\
 &= \int |x\rangle\langle x| dx = P
 \end{aligned}
 \tag{3-59}$$

Et $P = P^+ \Rightarrow P$ est projecteur.

➤ **Résultats :**

Si P_1 et P_2 deux projecteurs sur $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ et si $[P_1, P_2] = 0$ alors :

- 1) $P_1 P_2$ est aussi un projecteur
- 2) $P_1 P_2$ projette sur l'espace $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$
- 3) Pour que $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ soient orthogonaux il faut que $P_1 P_2 = 0$. On dira que $P_1 \perp P_2$
- 4) Si $P_1, P_2, P_3 \dots P_n$ sont des projecteurs alors $P_1 + P_2 + P_3 + \dots + P_n$ est un projecteur s'ils sont $\perp$ deux à deux.

III-9-3 La relation de fermeture

Soit $\mathcal{E}$ l'espace généré par la base d'une observable A , $\{|e_i\rangle ; i = 1, n\}$.

Chaque élément $|e_i\rangle$ peut générer un sous espace $\mathcal{E}_i$, et $P_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ projette sur $\mathcal{E}_i$.

La projection d'un ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ sur $\mathcal{E}$ sera :

$$\begin{aligned}
 |\psi^1\rangle + |\psi^2\rangle + \dots + |\psi^n\rangle &= \\
 &= |e_1\rangle\langle e_1|\psi\rangle + |e_2\rangle\langle e_2|\psi\rangle + \dots + |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle + \dots \\
 &= \sum_{i=1}^n |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle \\
 &\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle
 \end{aligned}
 \tag{3-60}$$

P contient tous les projecteurs élémentaires P_i donc projette $|\psi\rangle$ sur lui-même

$$P|\psi\rangle = |\psi\rangle \Rightarrow P = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \mathbb{I} \tag{3-61}$$

On appelle cette relation : **relation de fermeture** ou décomposition de l'unité.

Si la base est continue $\{|x\rangle / x \in [x_1, x_2]\}$: $\int_{x_1}^{x_2} |x\rangle\langle x| dx = \mathbb{I}$

Si la base est continue-discrète : $\sum_i \int |\varphi_i(x)\rangle\langle\varphi_i(x)| dx = \mathbb{I}$

III-10 Les matrices :

Soit la matrice $(A) = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}$

III-10-1 Définitions

➤ **Matrice conjuguée :** $(A)^* = \begin{pmatrix} a^* & b^* & c^* \\ d^* & e^* & f^* \end{pmatrix} \tag{3-62}$

➤ **Matrice transposée :** $(\tilde{A}) = \begin{pmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{pmatrix} \tag{3-63}$

➤ **Matrice adjointe :** $A^+ = (\tilde{A})^* = \begin{pmatrix} a^* & d^* \\ b^* & e^* \\ c^* & f^* \end{pmatrix} \tag{3-64}$

Avec : $(AB)^+ = B^+ A^+$ et $(A + B)^+ = A^+ + B^+ \tag{3-65}$

➤ **Hermitique :** $A^+ = A \tag{3-66}$

➤ **Unitaire :** $AA^+ = A^+ A = \mathbb{I} \tag{3-67}$

III-11 Les Représentations :

Elles permettent d'établir un passage de l'algèbre de Dirac vers les mathématiques conventionnelles.

III-11-1 Définitions

Le ket $|\varphi\rangle$: si $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$ et $\{|e_i\rangle ; i = 1, n\} \Rightarrow |\varphi\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |e_i\rangle$

Les composantes de $|\varphi\rangle$ sur les $|e_i\rangle$ sont les α_i . Il sera représenté par le vecteur colonne :

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle e_1 | \varphi \rangle \\ \vdots \\ \langle e_n | \varphi \rangle \end{pmatrix} \quad (3-68)$$

Dans le cas d'une base continue :

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \langle x_1 | \varphi \rangle \\ \vdots \\ \langle x_n | \varphi \rangle \end{pmatrix} \quad (3-69)$$

Le bra $\langle\varphi|$: il sera représenté par le vecteur ligne :

$$\langle\varphi| = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_n^*) = (\langle\varphi|e_1\rangle, \langle\varphi|e_2\rangle, \dots, \langle\varphi|e_n\rangle) \quad (3-70)$$

III-11-2 Les Observables :

Une observable A définie sur $\mathcal{E}$ de base $\{|e_i\rangle\}$ sera représenté par :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & A_{ij} & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\text{Et : } A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle \quad (3-71)$$

$$\text{Si la base est continue : } A_{xx'} = \langle x | A | x' \rangle \quad (3-72)$$

Exemple :

➤ AB est une matrice d'éléments $AB_{ij} = \langle e_i | AB | e_j \rangle$

$$\langle e_i | AB | e_j \rangle = \sum_k \langle e_i | A | e_k \rangle \langle e_k | B | e_j \rangle = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

➤ L'expression $\langle\varphi|AB|\psi\rangle$:

$$\langle\varphi|AB|\psi\rangle = \sum_{ijk} \langle\varphi|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|B|k\rangle \langle k|\psi\rangle$$

c.a.d : c'est le nombre scalaire résultant du produit :

$$(\langle\varphi|e_1\rangle \dots \langle\varphi|e_n\rangle) \cdot (A) \cdot (B) \cdot \begin{pmatrix} \langle e_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle e_n | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

III-11-3 Représentation position et quantité de mouvement :

3-1 Système à un degré de liberté :

Dans la théorie de Hamilton les variables dynamiques sont fonctions de la position et la quantité de mouvement x et p .

a) Représentation x :

Soit X l'opérateur position et $\{|x\rangle\}$ une base tel que :

$$X|x\rangle = x|x\rangle ; \int |x\rangle \langle x| dx = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

La norme d'un vecteur d'état $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi| \int |x\rangle \langle x| dx |\psi\rangle$$

$$= \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \psi^*(x) \psi(x) dx \quad (3-73)$$

Le produit scalaire $\langle \varphi | \psi \rangle$:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx \quad (3-74)$$

- **Opérateur de translation :**

Supposons à présent que les variables dynamiques du système peuvent dépendre d'autres grandeurs. Soit α une de ces grandeurs et soit l'opérateur : $S = e^{\frac{-i p \alpha}{\hbar}}$.

- **Quelle est la signification physique de S ?**

Calculons pour cela :

$$\begin{aligned} [X, S] &= \left[X, e^{\frac{-i p \alpha}{\hbar}} \right] = [X, P] \frac{\partial S}{\partial P} \\ &\Rightarrow [X, S] = i \hbar \left(\frac{-i}{\hbar} \alpha \right) S = \alpha S \\ &\Rightarrow XS - SX = \alpha S \\ &\Rightarrow XS = S(\alpha + X) \\ &\Rightarrow XS|x\rangle = (x + \alpha)S|x\rangle \end{aligned}$$

Remarquons que à partir de : $X|x\rangle = x|x\rangle$ on peut écrire $X|x + \alpha\rangle = (x + \alpha)|x + \alpha\rangle$

$$\Rightarrow S|x\rangle \equiv |\alpha + x\rangle \quad (3-75)$$

L'action de S sur l'état $|x\rangle$ se traduit par une translation de l'état $|x\rangle$ vers l'état $|\alpha + x\rangle$; S est donc un opérateur de translation.

- **Éléments de matrice de P :**

Calculons, pour cela, l'élément de matrice : $\langle x|S|x'\rangle$ si α est petit alors : $S \approx 1 - \frac{i p \alpha}{\hbar}$

$$\begin{aligned} \langle x|S|x'\rangle &= \langle x|1|x'\rangle - \frac{i\alpha}{\hbar} \langle x|P|x'\rangle \\ &= \delta(x - x') - \frac{i\alpha}{\hbar} \langle x|P|x'\rangle \\ &\Rightarrow \delta(x - (x' + \alpha)) - \delta(x - x') = -\frac{i\alpha}{\hbar} \langle x|P|x'\rangle \\ &\Rightarrow \frac{\delta(x - x') - \delta(x - x' - \alpha)}{\alpha} = \frac{i}{\hbar} \langle x|P|x'\rangle \\ &\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \delta'(x - x') = \langle x|P|x'\rangle \end{aligned} \quad (3-76)$$

b) Représentation p :

Cette représentation est définie par la donnée d'une base $\{|p\rangle\}$, tel que :

$$P|p\rangle = p|p\rangle ; \int |p\rangle \langle p| dp = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

Calculons $\langle x|P|p\rangle$:

$$\langle x|P|p\rangle = p \langle x|p\rangle \quad (3-77)$$

D'une autre part :

$$\begin{aligned} \langle x|P|p\rangle &= \int \langle x|P|x'\rangle \langle x'|p\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} \delta(x - x') \langle x'|p\rangle dx' \\ &= \frac{-\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x' - x) \langle x'|p\rangle dx' = -\left(\frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\langle x|p\rangle) \right) \\ &= -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|p\rangle \Rightarrow p \langle x|p\rangle = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|p\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad p\langle x|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle \quad (3-77-1)$$

$$\text{On en déduit que :} \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3-78)$$

On peut facilement calculer, à partir de l'équation (3-77-1), par séparation de variables, l'expression de la fonction : $\langle x|p\rangle$,

$$\langle x|p\rangle = C e^{\frac{i}{\hbar}xp} \quad (3-79)$$

La constante C est calculée en utilisant la condition de normalisation. Pour cela calculons l'expression $\langle p|p'\rangle$ de deux manières :

$$\begin{aligned} \text{D'une part :} \quad \langle p|p'\rangle &= \int \langle p|x\rangle \langle x|p'\rangle dx \\ &= \int C^* e^{-\frac{i}{\hbar}xp} C e^{\frac{i}{\hbar}xp'} dx \\ &= |C|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}x(p-p')} dx \dots\dots(1) \\ \Rightarrow \quad \langle p|p'\rangle &= \delta(p-p') \dots\dots(2) \end{aligned} \quad (3-80)$$

$$\text{D'une autre part :} \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

$$\begin{aligned} \text{En remarquant que} \quad \delta(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\ \tilde{\delta}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k) e^{ikx} dk \\ p = \hbar k &\Rightarrow k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow dk = \frac{dp}{\hbar} \\ \Rightarrow \tilde{\delta}(x) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \end{aligned} \quad (3-81)$$

p et x des variables muettes

$$\begin{aligned} \Rightarrow \delta(p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \\ \Rightarrow \delta(p-p') &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p-p') e^{i\frac{(p-p')}{\hbar}x} dx \dots\dots(3) \end{aligned}$$

De (1) et (3) :

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\theta} \quad (3-82)$$

$$\text{On peut montrer aussi que :} \quad q_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}$$

Remarque :

L'expression $|\langle x|p\rangle|^2$ représente la probabilité de trouver la particule au voisinage de x avec la quantité de mouvement p .

3-2 Système à n degré de liberté

Soient les coordonnées généralisées : $q_1, q_2, q_3, \dots, q_n$ et les quantités de mouvement $p_1, p_2, p_3, \dots, p_n$, à ces variables dynamiques correspond $2n$ observables qui vérifient :

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0 \text{ et } [q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (3-83)$$

A chaque couple (q_i, p_i) correspond un système de kets propres qui peut générer un sous espace $\mathcal{E}_i$. L'espace qui peut contenir tous les états du système sera : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{E}_3 \dots \otimes \mathcal{E}_n$ de base :

$$|q\rangle = |q_1 q_2 q_3 \dots q_n\rangle \quad (3-84)$$

Vérifiant : $\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$

$$\begin{aligned} \text{i.e. : } \langle q_1 q_2 q_3 \dots q_n | q'_1 q'_2 q'_3 \dots q'_n \rangle &= \delta(q - q') \\ \Rightarrow \delta(q - q') &= \prod_i \delta(q_i - q'_i) \end{aligned} \quad (3-85)$$

$$\text{et : } \mathbf{q}_i |q_i\rangle = q_i |q_i\rangle \Rightarrow \langle q|\mathbf{q}_i|q'\rangle = q'_i \delta(q - q') \quad (3-86)$$

$$\begin{aligned} \text{et : } \langle q|\mathbf{p}_i|q'\rangle &= \langle q_1|q'_1\rangle \dots \frac{\hbar}{i} \delta(q_i - q'_i) \dots \langle q_n|q'_n\rangle \\ &= \langle q_1|q'_1\rangle \dots \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_i} \delta(q_i - q'_i) \dots \langle q_n|q'_n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_i} \delta(q - q') \end{aligned} \quad (3-87)$$

$$\text{Et le ket sera représenté par : } |\psi\rangle = \int |q\rangle \langle q|\psi\rangle dq = \int \psi(q) |q\rangle dq \quad (3-88)$$

$|\psi\rangle$ sera représenté par la fonction $\psi(q_1, q_2, q_3, \dots q_n)$

à 3 dimensions : $\langle xyz|\psi\rangle = \psi(x, y, z)$

$$\bullet \text{ la fonction d'onde relative à } \mathbf{q}_i |\psi\rangle \text{ sera : } \langle q|\mathbf{q}_i|\psi\rangle = q_i \langle q|\psi\rangle = q_i \psi(q) \quad (3-89)$$

$$\begin{aligned} \bullet \text{ la fonction d'onde relative à } \mathbf{p}_i |\psi\rangle \text{ sera : } \langle q|\mathbf{p}_i|\psi\rangle &= \int \langle q|\mathbf{p}_i|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle dq' \\ &= \int \langle q|\frac{\hbar}{i} \delta(q - q')\psi(q') dq' \\ \Rightarrow \langle q|\mathbf{p}_i|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \psi(q) \end{aligned} \quad (3-90)$$

• dans cette représentation l'opérateur correspondant à la quantité de mouvement $\mathbf{p}_i$ n'est autre que $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$

• d'une manière générale toute fonction $F(q, p) = F\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right)$

$$\bullet \text{ donc : } H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(q_1, q_2, \dots q_n) = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} + V(q_1, q_2, \dots q_n)$$

Chapitre4

Postulats de la mécanique quantique

Les postulats de la mécanique quantique

Introduction

En mécanique classique un point matériel est étudié selon différentes méthodes dans lesquelles l'état du point matériel est décrit par une position (un système de coordonnées généralisées ' q_i '), un ensemble de vitesse généralisées ' $\dot{q}_i$ ' relatives aux coordonnées généralisées, un moment cinétique une énergie totale et un système d'équations de mouvement.

Cette manière de décrire l'état d'une particule quantique ne pourra pas avoir lieu, puisqu'il n'est pas possible de mesurer la position et la vitesse d'une particule quantique à un même instant ' t '.

Il faut donc poser un nouveau formalisme pour l'étude des systèmes quantiques. Sur la base des constatations et des développements faits aux chapitres 1 et 2, nous allons énoncer des principes sur lesquelles est basée l'étude des systèmes quantiques, ces principes seront dits postulats.

Postulat 1 :

A chaque état physique est attribué un ket $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ dans l'algèbre de Dirac. $|\psi(\vec{r}, t)\rangle \in \mathcal{E}$, $\mathcal{E}$ étant l'espace vectoriel contenant tous les états du système. Dans $\mathcal{E}$ le principe de superposition est vérifié.

Postulat 2 :

Les variables dynamiques sont représentées par des observables dans l'algèbre de Dirac.

Postulat 3 :

Si un système quantique est dans l'état $|\psi\rangle$, $\mathcal{A}$ une variable dynamique du système et A l'observable correspondante. Les valeurs qu'on peut trouver quand on mesure $\mathcal{A}$ sont les valeurs propres de l'observable A dans l'état $|\psi\rangle$.

Postulat 4 :

Si une variable dynamique $\mathcal{A}$ est représentée par l'observable A . Et si dans l'espace $\mathcal{E}$, A admet un ensemble de valeur propres $\{a_i\}_{i=1, n}$; si on mesure $\mathcal{A}$ on doit trouver une des valeurs propres de A , elle n'est pas déterminée au préalable. La probabilité de trouver la valeur ' a_j ' comme mesure est : la valeur moyenne du projecteur qui projette sur le sous espace $\mathcal{E}_{a_j}$ (sous espace généré par les vecteurs propres relatifs à la valeur propre a_j) ; si a_j est relative à m vecteurs propres $|\varphi_{jk}\rangle$:

$$A|\varphi_{jk}\rangle = a_j |\varphi_{jk}\rangle, k = 1, m \quad (4-1)$$

La probabilité de trouver a_j comme mesure sera : $\wp_{aj} = \frac{\langle \psi | P_{aj} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (4-2)$

et, $P_{aj} = \sum_{k=1}^m |\varphi_{jk}\rangle \langle \varphi_{jk}|$ (le projecteur qui projette sur $\mathcal{E}_{a_j}$)

On écrit donc : $\wp_{aj} = \frac{\langle \psi | \sum_{k=1}^m |\varphi_{jk}\rangle \langle \varphi_{jk}| | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4-3)$

Et m est le degré de dégénérescence de a_j cette dernière relation peut se mettre sous la forme :

$$\wp_{aj} = \frac{\sum_{k=1}^m |\langle \varphi_{jk} | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4-4)$$

Et si a_j est non dégénérée : $A|\varphi_j\rangle = a_j |\varphi_j\rangle,$

$$\wp_{aj} = \frac{|\langle \varphi_j | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4-5)$$

Postulat 5 :

Si un système quantique est dans l'état $|\psi\rangle$, et si on effectue une mesure d'une variable dynamique $\mathcal{A}$ et on trouve a_i comme mesure ; l'état du système est modifié juste après cette mesure et devient $|\psi'\rangle$. Ce dernier est donné par :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_{ai}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_{ai}|\psi\rangle}} \quad (4-6)$$

P_{ai} est le projecteur qui projette sur le sous espace $\mathcal{E}_{ai}$.

Postulat 6 :

L'évolution dans le temps de l'état d'un système quantique est complètement décrite par l'équation de Schrödinger :

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt}$$

Nous postulons qu'il existe un opérateur linéaire $U(t, t_0)$ tel que :

$$|\psi(t_0)\rangle \xrightarrow{U(t, t_0)} |\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (4-7)$$

Avec la condition initiale : $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$, on appelle $U(t, t_0)$ opérateur d'évolution.

Cet opérateur est déduit à partir de l'équation de Schrödinger : $H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$.

A partir de l'équation (4-7) :

$$H U|\psi(t_0)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U|\psi(t_0)\rangle \quad (4-8)$$

On peut donc écrire : $H U(t, t_0) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0)$. (4-9)

Dans le cas où H se conserve dans le temps et $[H, U] = 0$

et avec la condition initiale : $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ (4-10)

on déduit : $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \cdot (t, t_0)}$ (4-11)

Chapitre5

Oscillateur harmonique

L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

1 - Rappel sur l'oscillateur harmonique classique :

Le plus simple exemple d'un oscillateur harmonique en mécanique classique est celui d'une masse, qui se déplace sur un axe horizontal, sous l'effet de la force de rappel d'un ressort idéal.

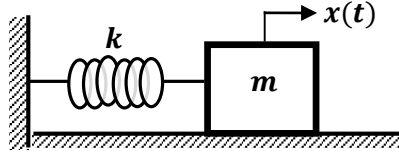


Figure1 : Pendule élastique en mouvement.

L'énergie totale du système est donnée par :

$$E_T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k (x - x_0)^2 \quad (5-1)$$

Où : x_0 est la position d'équilibre du système.

L'équation différentielle de mouvement (déterminée dans le formalisme de Lagrange)

S'exprime par :

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (5-2)$$

Où : $\omega_0 = \frac{k}{m}$ est la pulsation propre de l'oscillateur (k, m)

Et sa solution est donnée par :

$$x(t) = x_0 \sin(\omega_0 t + \varphi) \quad (5-3)$$

L'énergie totale E_T peut s'écrire sous la forme :

$$E_T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (5-4)$$

qui varie de manière continue et peut être nulle lorsque la masse se trouve à la position d'équilibre avec une vitesse nulle.

2- Pourquoi l'oscillateur harmonique quantique ?

A vrai dire tous les potentiels physiques ne se comportent pas comme un oscillateur harmonique, mais au voisinage de la position d'équilibre des particules oscillantes le potentiel peut se mettre sous la forme de celui d'un oscillateur harmonique :

$$E_p = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5-5)$$

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique sera :

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5-6)$$

L'étude du mouvement d'un oscillateur quantique à une dimension revient à calculer les énergies et les fonctions d'onde correspondantes de l'hamiltonien $\mathcal{H}$.

Pour simplifier l'étude on procède par un changement de variable :

$$X = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{et} \quad P = p \frac{1}{\sqrt{\hbar m \omega}} \quad (5-7)$$

$$\mathcal{H} \text{ s'écrit d'une manière plus simple : } \mathcal{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (P^2 + X^2) \quad (5-8)$$

$$\text{Avec ce changement de variables on peut vérifier que : } [X, P] = i\hbar \quad \text{et} \quad P = -i \frac{\partial}{\partial X} . \quad (5-9)$$

$$\text{Posons : } H = \frac{1}{2} (P^2 + X^2) \Rightarrow \mathcal{H} = \hbar \omega H \quad (5-10)$$

Il suffit donc de résoudre le problème aux valeurs propres de H et déduire celui de $\mathcal{H}$.

3- Problème aux valeurs propres de H :

Définissons les opérateurs :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \Rightarrow a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) \text{ et } N = a^+ a$$

On peut vérifier que :

- $[a, a^+] = 1$
- $X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \text{ et } P = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a - a^+)$
- $H = \frac{1}{2}(2N + 1)$

A nouveau, la résolution du problème aux valeurs propres de H revient à l'étude de celui de N .

3-1- Etude du problème aux valeurs propres de l'opérateur N :

Supposons par hypothèse que l'équation aux valeurs propres de l'opérateur N s'écrit sous la forme :

$$N|v\rangle = v|v\rangle \quad (5-11)$$

On peut vérifier les résultats suivants :

- $v \geq 0$:

La norme du ket $a|v\rangle$ doit être $\geq 0 \Rightarrow \langle v|a^+ a|v\rangle \geq 0 \Rightarrow \langle v|N|v\rangle \geq 0$

$$\Rightarrow v\langle v|v\rangle \geq 0 \Rightarrow v \geq 0 \quad (5-12)$$

- Si $v = 0$: Alors $a|v\rangle = 0$

$$\begin{aligned} \text{On a : } \langle v|N|v\rangle = v\langle v|v\rangle = 0 &\Rightarrow \langle v|a^+ a|v\rangle \geq 0 \\ &\Rightarrow \|a|v\rangle\| = 0 \Rightarrow a|v\rangle = 0 \end{aligned} \quad (5-12)$$

Sinon $Na|v\rangle = (v - 1)a|v\rangle$

$$\begin{aligned} \text{On a : } Na|v\rangle &= (a^+ a)a|v\rangle = a \underbrace{a^+ a}_N |v\rangle - a|v\rangle = (v - 1)a|v\rangle \\ &\Rightarrow Na|v\rangle = (v - 1)a|v\rangle \end{aligned} \quad (5-13)$$

- $v \neq 0$: Alors $a^+ |v\rangle \neq 0$ et $Na^+ |v\rangle = (v + 1)a^+ |v\rangle$

Pour démontrer $a^+ |v\rangle \neq 0$ on calcule la norme $\|a^+ |v\rangle\|$:

$$\begin{aligned} \|a^+ |v\rangle\| &= \langle v|aa^+ |v\rangle \\ &= \langle v|(1 + N)|v\rangle = (1 + v)\langle v|v\rangle \\ &\Rightarrow \|a^+ |v\rangle\| \neq 0 \quad \forall v \end{aligned} \quad (5-14)$$

On calcule $Na^+ |v\rangle$:

$$\begin{aligned} Na^+ |v\rangle &= a^+ aa^+ |v\rangle = a^+ \left(1 + \underbrace{a^+ a}_N\right) |v\rangle \\ &\Rightarrow Na^+ |v\rangle = (1 + v)a^+ |v\rangle \end{aligned} \quad (5-15)$$

On peut montrer que d'une manière générale :

$$Na^n |v\rangle = (v - n)a^n |v\rangle \quad (5-16)$$

$$Na^{+n} |v\rangle = (v + n)a^{+n} |v\rangle \quad (5-17)$$

- Le spectre de N est discret et constitué de nombres entiers positifs.

Démonstration :

Par un raisonnement par l'absurde : supposons que ν n'est pas entier, il est donc compris entre deux entiers : $n \leq \nu \leq n + 1$

Et soit le ket $|\nu\rangle \neq 0$

D'après le résultat précédent (5-16) : $Na^n|\nu\rangle = (\nu - n)a^n|\nu\rangle$ on peut écrire cette relation pour $n + 1$:

$$Na^{n+1}|\nu\rangle = (\nu - (n + 1))a^{n+1}|\nu\rangle$$

Dans les deux cas les deux vecteurs $a^n|\nu\rangle$ et $a^{n+1}|\nu\rangle$ sont kets propres de N et les valeurs propres correspondantes doivent être positives ou nulles (résultat 1).

$$(5 - 12) \Rightarrow \begin{cases} \nu - n \geq 0 \Rightarrow n \leq \nu \\ \nu - (n + 1) \geq 0 \Rightarrow n + 1 \leq \nu \end{cases}$$

C'est-à-dire si ν est supérieur à n il doit être obligatoirement supérieure à $n + 1$.

Donc ν ne pourra jamais être compris entre n et $n + 1$

$$\Rightarrow \nu \text{ entier et } \nu \geq 0 \Rightarrow \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Donc le spectre de N est discret et constitué de nombres entiers positifs.

3-2- Conclusion :

- ν est entier et sera noté n .
- $N|n\rangle = n|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$
- $H = \frac{1}{2}(2N + 1) \Rightarrow H|n\rangle = \frac{1}{2}(2n + 1)|n\rangle$
- $\mathcal{H}|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1)|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle$.
- Donc les kets $|n\rangle$ sont les états de l'oscillateur et $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ ses énergies.
- La valeur minimale de l'énergie est $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ correspondante à l'état fondamental décrit par le ket $|0\rangle$.
- L'action des opérateurs N, a et a^+ sur les kets $|n\rangle$:
 - $N|n\rangle = n|n\rangle$ où n est dans l'expression de l'énergie $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ et, $n = 0, 1, 2, \dots$

n est donc le nombre de photons emmagasiné par l'oscillateur. On appelle donc l'opérateur N opérateur nombre de photons.

- Du résultat 2(5-13) : $Na|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle$ et comme $N|n'\rangle = n'|n'\rangle$ on en déduit que :

$$a|n\rangle \propto |n - 1\rangle \Leftrightarrow a|n\rangle = c|n - 1\rangle$$

$$\text{On a } \|a|n\rangle\| = \langle n| \underbrace{a^+ a}_N |n\rangle = n\langle n|n\rangle = c^2 \Rightarrow c = \sqrt{n}$$

$$\Leftrightarrow a|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle \quad (5-18)$$

Donc l'opérateur a détruit un photon à l'état de l'oscillateur, on l'appelle opérateur d'annihilation de photon.

- Du résultat 3(5-15) : $Na^+|n\rangle = (n + 1)a^+|n + 1\rangle$
 Et du fait que : $N|n + 1\rangle = (n + 1)|n + 1\rangle \Rightarrow a^+|n + 1\rangle \propto |n + 1\rangle$
 $\Rightarrow a^+|n + 1\rangle = c'|n + 1\rangle$

$$\text{On a } \|a^+|n\rangle\| = \langle n| \underbrace{aa^+}_{N+1} |n\rangle = (n + 1)\langle n|n\rangle = c'^2 \Rightarrow c' = \sqrt{n + 1}$$

$$\Leftrightarrow a^+|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \quad (5-19)$$

a^+ est donc l'opérateur qui ajoute un photon à l'état de l'oscillateur, on l'appelle opérateur de création de photon.

4- Fonction d'onde de l'oscillateur harmonique :

La fonction d'onde de l'oscillateur harmonique est calculée en exprimant les vecteurs d'onde $|n\rangle$ dans la représentation position : $\{|x\rangle\}$ et $\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle$.

Calculons $\varphi_0(x) = \langle x|0\rangle$:

On considère l'équation (5-18) : $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ si $n = 0 \Rightarrow a|0\rangle = 0$

mais $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP)|0\rangle = 0$

dans la représentation $\{|x\rangle\}$: $\langle x|\frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP)|0\rangle = 0 \Rightarrow X\varphi_0(x) + i\langle x|P|0\rangle = 0$

à partir des résultats du chapitre 2 on peut avoir :

$$X\varphi_0(X) + \frac{d}{dX}\varphi_0(X) = 0 \Rightarrow \varphi_0(X) = Ae^{-\frac{X^2}{2}} \quad (5-20)$$

$$\text{Sachant que : } X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \text{ on obtient : } \varphi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (5-21)$$

A est calculée à partir de la condition de normalisation :

$$\int \varphi_0^*(x) \varphi_0(x) dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = 1$$

$$\text{On a : } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \Rightarrow |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$\Rightarrow \varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (5-22)$$

Les autres états seront calculés de proche en proche en appliquant l'opérateur de création a^+ au ket $|0\rangle$: $a^+|0\rangle = |1\rangle$, $\langle x|a^+|0\rangle = \varphi_1(x)$ et $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP)$.

Pour trouver l'expression générale de $\varphi_n(x)$ on utilise les relations obtenues par régression de l'application des opérateurs a et a^+ .

$$\begin{aligned} a\varphi_n(x) &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) \\ a^+\varphi_n(x) &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x) = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) \\ \Rightarrow \varphi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n} \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \varphi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n} \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \end{aligned} \quad (5-23)$$

$$\text{On constate que : } \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}$$

$$\text{Calculons } \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} :$$

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial x}, e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \right] &= \overbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right]}^{=1} \frac{m\omega}{\hbar} x e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\
\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} - e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{m\omega}{\hbar} x e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\
\Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} &= -e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} \\
\Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} &= (-1)^n e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} (-1)^n e^{+\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)
\end{aligned} \tag{5-24}$$

Où $H_n(t)$ est le polynôme de Tchebychev-Hermite défini par :

$$H_n(t) = (-1)^n e^{+t^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n e^{-t^2} \tag{5-25}$$

5- Oscillateur à l degrés de liberté :

Si le système est formé de l particules de masses identiques et possèdent toutes la même pulsation, l'Hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^l p_i^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \sum_{i=1}^l x_i^2 = \sum_{i=1}^l \mathcal{H}_i \tag{5-26}$$

Mais chaque $\mathcal{H}_i$ vérifie l'équation aux valeurs propres :

$$\mathcal{H}_i |n_i\rangle = \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) |n_i\rangle \tag{5-27}$$

D'où l'état du système $|n\rangle$ sera le produit tensoriel de tous les états $|n_i\rangle$:

$$|n\rangle = |n_1 n_2 \dots n_l \dots n_l\rangle \tag{5-28}$$

$$\mathcal{H}_i |n\rangle = \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \text{ et } \mathcal{H} |n\rangle = \sum_{i=1}^l \mathcal{H}_i |n\rangle \tag{5-29}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^l \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{l}{2} \right) |n\rangle \\
\Rightarrow E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{l}{2} \right)
\end{aligned} \tag{5-30}$$

où $n = n_1 + n_2 + \dots + n_l + \dots + n_l$ et $n \geq 0$.

Remarques :

• Si $n = 0$: L'énergie du système $E_0 = \frac{\hbar\omega l}{2}$ correspond à l'état $|0_1 0_2 \dots 0_l \dots 0_l\rangle$ qui sera noté $|0\rangle$.

L'état $|0\rangle$ est l'état du système qui ne contient aucun photon et qui représente donc le vide du système ou l'état fondamental d'énergie E_0 .

• $a_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (X_i + iP_i)$, $[a_i, a_j] = 0$, $[a_i^+, a_j^+] = 1$, $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$

5-1 Application : Oscillateur à 2 dimension

n	E_n	dégénérescence	Vecteurs d'état $ n_1 n_2\rangle$
0	$\hbar\omega$	1	$ 00\rangle$
1	$2 \hbar\omega$	2	$ 01\rangle, 10\rangle$
2	$3 \hbar\omega$	3	$ 11\rangle, 20\rangle, 02\rangle$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$ 0 n\rangle, 1 n-1\rangle, 2 n-2\rangle$
n	$\hbar\omega(n+1)$	$(n+1)$	$\dots\dots n 0\rangle$

Et la fonction d'onde du système dans l'état fondamental est :

$$\varphi_0(x_1, x_2) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{2/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)} \quad (5-31)$$

Remarque :

Ce système à deux dimensions peut être une seule particule qui se déplace dans le plan (Oxy) avec $\omega_x = \omega_y$ et :

$$\varphi_0(x, y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2)} \quad (5-32)$$

Références

- 1/ MANSOURI A, Cours de mécanique quantique¹ –L2-SM université Sétif¹ .
- 2/ COHEN-TANNOUDJI C, DIU B et LALOE F 1977 Quantum mechanics.
- 3/ ZETTILI N 2009 Quantum Mechanics: concepts et applications.
- 4/ MESSIAH A 1964 Mécanique Quantique (2^{ème} édition).