OUTILS MATHEMATIQUES POUR LA MECANIQUE QUANTIQUE

ESPACE DES FONCTIONS D'ONDE DE CARRE SOMMABLE

$\psi(\vec{r},t)$ = Fonction d'onde décrit l'état d'un système physique

$|\psi(\vec{r},t))|^2 dV = dP$ → Probabilité de présence à l'instant t dans le volume dV

$$\int |\psi(\vec{r},t))|^2 \, dV = 1$$

$\psi(\vec{r},t) \in \mathcal{F}$ → Ensemble des fonctions de carré sommable :

- Intégral converge
- Définie partout
- Continue
- Indéfiniment dérivable
- bornées

ESPACE $\mathcal{F}$

Structure de $\mathcal{F}$: $\mathcal{F}$ est un espace vectoriel

Si $\psi_1(\vec{r},t) \in \mathcal{F}$ et $\psi_2(\vec{r},t) \in \mathcal{F}$ → $\lambda_1 \psi_1(\vec{r},t) + \lambda_2\psi_2(\vec{r},t) \in \mathcal{F}$ (λ_1 et $\lambda_2 \in C$)

Produit scalaire :

$$(\varphi,\psi) = \iiint \overline{\varphi(\vec{r})}\psi(\vec{r})dV$$

$$(\varphi,\psi) = \overline{(\psi,\varphi)}$$

$(\varphi,\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi,\psi_1) + \lambda_2(\varphi,\psi_2)$: linéaire

$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2,\psi) = \overline{\lambda_1}(\varphi_1,\psi) + \overline{\lambda_2}(\varphi_2,\psi)$: antilinéaire

Si $(\varphi,\psi) = 0$ on dit que φ et ψ sont orthogonales

$(\varphi,\varphi) = \iiint \overline{\varphi(\vec{r})}\,\varphi(\vec{r})d\tau = \iiint |\varphi(\vec{r})|^2 dV = N^2$ → Norme N : réel positif,
nul si et seulement si $\varphi(\vec{r})=0$

Opérateur linéaire :

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}\ \hat{A}(\lambda_1\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\psi_2(\vec{r})) = \lambda_1\hat{A}\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\hat{A}\psi_2(\vec{r})$$

ESPACE $\mathcal{F}$

Base discrète orthonormée / Relation de Fermeture :

$u_1(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, $u_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, ...

$(u_i(\vec{r}), u_j(\vec{r})) = \iiint \overline{u_i(\vec{r})} u_j(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{ij}$ (Symbole de Kronecker δ_{ij}=1 si i=j et δ_{ij}=0 si i≠j

$u_i(\vec{r})$ Constituent une base : $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\vec{r})$

$(u_j, \psi) = \left(u_j, \sum_i c_i u_i\right) = \sum_i c_i \left(u_j, u_i\right) = \sum_i c_i\, \delta_{ij} = c_j$

$c_j = (u_j, \psi)$

Relation de fermeture :

$$\sum_i u_i(\vec{r}).\, u_i{}^* \left(\vec{r} - \vec{r'}\right) = \delta(\vec{r} - \vec{r'})$$

Notation de Dirac

Il existe des systèmes physiques dont la description quantique ne peut se faire avec une fonction d'onde. C'est le cas d'un électron avec un spin → On généralise les fonctions d'onde et l'espace $\mathcal{F}$

Tout état d'une particule sera caractérisé par un vecteur état appartenant à l'espace des états ε , sous espace de Hilbert.

Postulat 1 : A un instant t, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un vecteur ket : $|\psi(\vec{r},t) > \epsilon\ \mathcal{E}$. Le complexe conjugué de ce ket est un bras $< \psi(\vec{r},t)|$

$|\psi\ \ (\vec{r},t) >$ est un vecteur colonne $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$

$< \psi(\vec{r},t)|$ est un vecteur ligne $(\overline{c_1} \quad \overline{c_2} \quad \overline{c_3})$

ESPACE ETATS $\mathcal{E}$

Structure de $\mathcal{E}$: $\mathcal{E}$ est un espace vectoriel LINEAIRE

Si $|\psi_1 > \epsilon\, \mathcal{E}$ et $|\psi_2 > \epsilon\, \mathcal{E} \rightarrow \lambda_1 |\psi_1 > + \lambda_2 |\psi_2 > \epsilon\ \mathcal{E}$ (λ_1 et $\lambda_2\ \epsilon\ C$)

Produit scalaire :

$(|\varphi >, |\psi >) =< \varphi|\psi > = \lambda\ \epsilon\ \mathbb{C}$

$(|\psi >, |\varphi >) =< \psi|\varphi >= \overline{(\varphi, \psi)} = \bar{\lambda}$

$< \varphi/\varphi > = \||\varphi >\|^2\ \epsilon\ \mathbb{R}$

Si $|\varphi >$ décrit l'état d'un système physique $< \varphi/\varphi > = 1$ fonction d'onde normée

$< \varphi|\psi > \neq |\varphi >< \psi|$

Si (φ, ψ)= 0 on dit que φ et ψ sont orthogonales

Opérateur linéaire :

$|\varphi > \epsilon\ \varepsilon \rightarrow \hat{A}|\varphi > \epsilon\ \varepsilon$

$|\varphi_1 > et\ |\varphi_2 > \epsilon\ \varepsilon \rightarrow \hat{A}(\lambda_1|\varphi_1 > +\lambda_2|\varphi_2 >)$=$\lambda_1\hat{A}|\varphi_1 > +\lambda_2 + \lambda_2\hat{A}|\varphi_2 >$

ESPACE ETATS $\mathcal{E}$

Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur $\widehat{M}$ ou d'une matrice:

x vecteur propre, λ nombre réel

$\widehat{M}x = \lambda x$

- Si x est vecteur propre ax (a réel) est aussi vecteur propre
- Si à une valeur propre λ, est associé un seul vecteur propre on dit que λ est non dégénérée
- Si à un λ, sont associés n vect. prop. linéairement indept, on dit que λ est n fois dégénéré
- On trouve les valeurs propres λ en faisant : $\det(M - \lambda I) = 0$

Propriétés :

$\hat{A}\hat{B} \quad \epsilon\ \varepsilon$

$\hat{A} + \hat{B} \quad \epsilon\ \varepsilon$

$[\hat{A}, \hat{B}\ ] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Si $[\hat{A}, \hat{B}\ ] = 0$ alors → $\hat{A}\ et\ \hat{B}$ ont des vect. Prop. Communs

→ on peut mesurer les grandeurs physiques liées à $\hat{A}\ et\ \hat{B}$ simultanément

Exemple d'opérateur linéaire : le projecteur $|\varphi >< \varphi|$

ESPACE ETATS $\mathcal{E}$

Base discrète orthonormée :

$|u_i>$ $\quad tq \quad$ $<u_i|u_j> = \delta_{ij}$

$$|\psi> \; = \sum_i c_i |u_i>$$

$< u_i |\psi> \; = \sum_j c_j < u_i|u_j> = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i$

Relation de fermeture :

$<u_i|\psi> = c_i \; d'où$

$$|\psi> = \sum_i < u_i \Big| \psi > |u_i> \; = \sum_i |u_i><u_i|\psi> = \sum_i |u_i> < u_i\Big| \;\; |\psi>$$

Avec obligatoirement : $\sum_i |u_i> < u_i| \;\; = 1$

Base continue orthonormée :

$|u_\alpha> \;\; \epsilon \; \varepsilon \quad tq < u_\alpha|u_\beta> = \delta_{\alpha\beta}$

$$|\psi> = \int c_\alpha |u_\alpha>$$

Relation de fermeture $\int \Big|u_\alpha> < u_\beta\Big| \, d\alpha = 1$

Opérateur hermitique = observable

$$\hat{A}^{+} = \widehat{A}$$

$\hat{A}$ → A_{ij}

$\widehat{A^{+}}$ → $(A^{+})_{ij} = \overline{A_{ji}}$

$\hat{A}^{+} = \widehat{A}$ a) $A_{ij} = \left(A_{ij}^{+}\right) = \overline{A_{ji}}$

→2 éléments symétriques par rapport à la diago sont conjugués

→ Les éléments de la diago sont réels

b) Les valeurs propres sont réelles = observable = mesurable

<u>Conclusions</u> :

$\hat{A}^{+} = \widehat{A}$ →Diago réelle

→ Symétrique par rapport à diago sont complexes conjugués

→ val. prop. réelles

→ vect. prop. associés à des val. prop. différentes sont orthogonaux

Exercice 1 :

$$\hat{A} \quad = \frac{d}{dt}$$

$$\hat{A}f \quad = \frac{d \quad f}{dt} = \lambda f?$$

$$\frac{d \quad f}{f} = \lambda dt$$

$$lnf = \lambda t + cste$$

$$f = \mathrm{Cexp}(\lambda t)$$

Exercice 2 :

$$\widehat{M} \quad = \frac{d^2u}{du^2} - u^2$$

$$\widehat{M}e^{-\frac{u^2}{2}} \quad = \lambda e^{-\frac{u^2}{2}} \quad ?$$

$$\frac{d}{du}(e^{-\frac{u^2}{2}}) = \frac{-2ue^{-\frac{u^2}{2}}}{2} = -ue^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\frac{d^2}{du^2}(e^{-\frac{u^2}{2}}) = \frac{d}{du}\left(-ue^{-\frac{u^2}{2}}\right) = -e^{-\frac{u^2}{2}}\text{-u(-u }e^{-\frac{u^2}{2}})$$

$$\frac{d^2}{du^2}e^{-\frac{u^2}{2}} = e^{-\frac{u^2}{2}}(-1 + u^2)$$

$$Me^{-\frac{u^2}{2}} = \frac{d^2}{du^2}e^{-\frac{u^2}{2}} - u^2e^{-\frac{u^2}{2}} = e^{-\frac{u^2}{2}}(-1 + u^2 - u^2) = -e^{-\frac{u^2}{2}}$$

Valeur propre -1

Exercice 3 :

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

$$\hat{T}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi = \mathrm{E}\varphi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

$E > 0$ on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi + k^2\varphi(x) = 0$$

$$\varphi(x) = \mathrm{A}e^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\varphi(x,t) = (\mathrm{A}e^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\omega t}$$

$$= \mathrm{A}e^{-i(\omega t-kx)} + \mathrm{B}e^{-i(\omega t+kx)}$$

Onde progressive x croissants

Onde progressive x décroissants

Exercice 4 :

$\hat{A} \quad |\varphi> = a|\varphi>$

$\hat{A}$ commute avec $\hat{B}$ $\quad [\hat{A}, \hat{B}\ ] = 0 \quad \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

$$\hat{A}(\hat{B}|\varphi>) = \hat{B}\hat{A}\Big|\varphi> = \hat{B}a\Big|\varphi> = a\hat{B}|\varphi>$$

$\boxed{\hat{B}|\varphi> \text{ est vect. prop. de } \hat{A} \text{ avec « a » comme val. prop.}}$

Or $\hat{A}\Big|\varphi> = a|\varphi>$

$\boxed{\text{donc } |\varphi> \text{ vect. prop. de } \hat{A} \text{ avec « a » comme val. prop.}}$

« a » est une val. prop. non dégénérée

donc $|\varphi>$ et $\widehat{B}|\varphi>$ sont proportionnels :

$\hat{B}|\varphi> \ = \mathrm{b}|\varphi>$

$\hat{B}$ et $\hat{A}$ ont même vect. prop. (mais pas même val. prop.)

Exercice 5 :

$$\hat{x} \quad \varphi(x) = x\varphi(x)$$

$$\hat{p} \quad \varphi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\varphi(x)$$

$\hat{x}$ et $\hat{p}$ commutent si $[\hat{x}, \hat{p}\ ] = 0 = \hat{x}\hat{p}\text{-}\hat{p}\hat{x}$

$$[\hat{x}, \hat{p}\ ]\varphi(x) = \hat{x}\underbrace{\hat{p}(\varphi(x))}_{-i\hbar\frac{d\varphi}{dx}}\text{-}\hat{p}\underbrace{\hat{x}\varphi(x)}_{x\varphi(x)} = -i\hbar x\frac{d\varphi}{dx} - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}(x\varphi(x)\right)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}\ ]\varphi(x) = -i\hbar x\frac{d\varphi}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}\big(x\varphi(x)\big) = -i\hbar x\frac{d\varphi}{dx} + i\hbar x\frac{d\varphi}{dx} + i\hbar\varphi(x)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}\ ]\varphi(x) = i\hbar\varphi(x)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}\ ] = i\hbar$$

Les grandeurs x et p ne commutent pas et ne peuvent donc pas être mesurées ensemble
D'où la relation d'incertitude de HEISENBERG :

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

Mais on a quand même : $\left[\hat{x}, \widehat{p_y}\ \right] = 0$

Exercice 6 :

$\widehat{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ dans la base $|u_2 > et\ |u_3 >$

Valeurs propr. :

Det $(\widehat{M} - \lambda \hat{I}) = 0$

$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix}$=0

$(1-\lambda)^2-1=0$

$1-2\lambda+\lambda^2-1=0$

$\lambda(\lambda-2)=0$

$\lambda=0$ ou $\lambda=2$

Vect. propr. : $|\varphi_M > = \alpha|u_2 > + \beta|u_3 >$

- $\lambda = 0 \quad \rightarrow M|\varphi_M > = 0|\varphi_M >$

$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \alpha + \beta = 0 \quad \rightarrow \alpha = -\beta$

$$\boxed{|\varphi_{M\to 0} > = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2 > - |u_3 >)}$$

- $\lambda = 2 \rightarrow$ M$|\varphi_M > = 2|\varphi_M >$

$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=2\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \alpha + \beta = 2\alpha \quad et\ \ \alpha + \beta = 2\beta$ d'où $\alpha = \beta$

$$\boxed{|\varphi_{M\to 2} > = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2 > + |u_3 >)}$$

$\widehat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Dans la base de vect. propr

$|\varphi_{M\to 0} > et\ |\varphi_{M\to 2} >$

Exercice 6 suite :

$\hat{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ dans la base orthonormée $|u_1>, |u_2> et\ |u_3>$

Det $(\hat{M} - \lambda\hat{I}) = 0 = \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)((1-\lambda)^2 - 1) = 0$

$= (1-\lambda)(1+\lambda^2 - 2\lambda - 1) = 0$

$\lambda = 1 , \lambda = 0\ ou\ \lambda = 2$

Vect. propr. : $|\varphi_M> = \alpha|u_1> + \beta|u_2> + \gamma|u_3>$

- $\lambda = 0 \quad \rightarrow |\varphi_{M\rightarrow 0}> = 0|\varphi_{M\rightarrow 0}>$

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\quad \alpha = 0 \quad$ $|\varphi_{M\rightarrow 0}> = \beta|u_2> - \beta|u_3>$

$\beta + \gamma = 0$

$\beta + \gamma = 0$

- $\lambda = 1 \quad \rightarrow |\varphi_{M\rightarrow 1}> = 1|\varphi_{M\rightarrow 1}>$

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$ $\quad \alpha = \alpha \quad$ $|\varphi_{M\rightarrow 0}> = \alpha|u_1>$

$\beta + \gamma = \beta$

$\beta + \gamma = \gamma$

- $\lambda = 2 \quad \rightarrow \ |\varphi_{M\rightarrow 2}> = 2|\varphi_{M\rightarrow 2}>$

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{pmatrix}$$

$$\alpha = 2\alpha$$

$$|\varphi_{M\rightarrow 0}> = \ \beta|u_2> +\beta|u_3>$$

$$\beta + \gamma = 2\beta$$
$$\beta + \gamma = 2\gamma$$

Exercice 7 :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$ dans la base $|u_1>, |u_2> et\ |u_3>$

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\hat{A}$ et $\hat{B}$ hermitiques . Ce sont des observables

$$\hat{A}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Val. prop. 1 (2 fois dégénérée vect prop. : $|u_1 > et|u_3 >$) et 0 (non dégénéré) vect. Prop $|u_2 >$

$$\hat{B}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Val. Prop. 1 (3 fois dégénérée vect prop. : $|u_1 >, |u_2 > et|u_3 >$)

$$\det\left(\hat{B} - \lambda\hat{I}\right) = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1-\lambda & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(1-\lambda)(-\lambda) - 1(1-\lambda) = 0$$

$$= (1-\lambda)(\lambda^2 - 1) = 0$$

Val. Prop. :

- λ=1 : 2 fois dégénérée

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\gamma = \alpha$$

$$|\varphi_{B\to 1} > = \alpha|u_1 > +\beta|u_2 > + \gamma|u_3 >$$

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$$

$$\beta = \beta$$
$$\alpha = \gamma$$

$$2\alpha^2 + \beta^2 = 1$$
$$\beta = \pm\sqrt{1 - 2\alpha^2}$$

$$|\varphi_{B\to 1} > = \alpha\Big|u_1 > \pm\sqrt{1-2\alpha^2}\,|u_2 > + \alpha|u_3 >$$

- λ=-1 : non dégénérée

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\gamma = -\alpha$$

$$|\varphi_{B\to -1} > = \alpha|u_1 > -\alpha|u_3 >$$

$$\alpha^2 + \alpha^2 = 1$$

$$\beta = -\beta$$
$$\alpha = -\gamma$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Exercice 8 :

$|u_1>, |u_2> et\ |u_3>$

$|\varphi_1> = |u_1> -2|u_2>$

$|\varphi_2> = |u_1> +i|u_3>$

$|\varphi_3> = |u_3>$

$<\varphi_1|\varphi_2> = \begin{pmatrix}1 & -2 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\-i\end{pmatrix}$=1

Ou (< $u_1|-2$<$u_1|$)($|u_1> -2|u_2>$)=1

$<\varphi_2|\varphi_3> = \begin{pmatrix}1 & 0 & -i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = -i$

$<\varphi_3|\varphi_1> = 0$

$|\varphi_1>$ normé ? $|\varphi_1> = |u_1> -2|u_2>$

$$|\psi> = \sum_n c_n\,|u_n>$$

$$<\psi_n| = \sum_m \overline{c_m} < u_m|$$

$$<\psi|\psi> = 1 = \sum_m \overline{c_m} < u_m \Bigg| \sum_n c_n\,|u_n> = \sum_n \sum_m \overline{c_m}\, c_n \delta_{nm} = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Exercice 8 :

Pour $|\varphi_1 >$: $1+(-2)^2=5\neq 1 \rightarrow$ pas normé

$|\varphi_1 > = \frac{1}{\sqrt{5}}(|u_1 > -2|u_2 >)$ normé

$|\varphi_2 > = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1 > +i|u_3 >)$ normé