

# Notions de cours sur les notations de Dirac

On notera  $\bar{\lambda}$  le conjugué du nombre complexe  $\lambda$ .

## A Notations de Dirac

### 1 Etats Physiques

#### a. ETAT PHYSIQUE D'UNE PARTICULE

Soit une particule, elle est caractérisée par un certain nombre de paramètres intrinsèques (la masse, la charge, le spin...). Ce sont en quelque sorte les données permanentes de la particule; on peut leur opposer ses données instantanées (en mécanique classique, ce serait la position, l'impulsion) qui constituent ce que l'on appelle l'état physique de la particule.

- Un état physique est décrit par un vecteur  $|\phi\rangle$ . Ce vecteur appartient à un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ , muni du produit hermitien :  $\langle\psi|\phi\rangle$ . On a les relations suivantes :

$$\langle\phi|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\phi\rangle} \quad (1)$$

$$\langle\psi|\lambda\phi\rangle = \langle\bar{\lambda}\psi|\phi\rangle = \lambda\langle\psi|\phi\rangle \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad (2)$$

- Le bra  $\langle\phi|$  représente la forme linéaire associée à l'état  $|\phi\rangle$  (voir les parties **C** ou **D** et en particulier la définition de l'application  $\varphi$  de  $\mathcal{H}$  dans  $\mathcal{H}^*$ ).

- **Fonction d'onde**

Si la particule est sans spin, son état physique  $|\phi\rangle$  est caractérisé par une fonction d'onde  $\phi$  réelle ou complexe. **Par définition, on note :**

$$\phi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\phi\rangle$$

où  $\mathbf{r}$  représente la position dans l'espace. (Si l'on travaille à une dimension, on note la position par  $x$  au lieu de  $\mathbf{r}$ ).

- Le produit hermitien entre deux états possibles  $|\phi\rangle$  et  $|\psi\rangle$  de la particule sans spin s'écrit, dans le cas de l'espace à une dimension :

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x)\phi(x)dx \quad (3)$$

on généralise la formule de façon immédiate avec la variable  $\mathbf{r}$  quand l'espace est à trois dimensions; on vérifie facilement que les relations (1) et (2) sont satisfaites.

- En toute rigueur, un état physique doit être normalisable. On le norme par :  $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ , ce qui s'écrit dans le cas précédent :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 \quad (4)$$

ainsi  $|\phi(x)|^2$  est une densité de probabilité.

- Cependant on définira aussi des états non normalisables (par exemple, la fonction d'onde  $e^{ikx}$  qui représente une onde plane progressive).
- On définit la fonction d'onde dans l'espace des impulsions comme la transformée de Fourier (au sens de la mécanique quantique) de la fonction d'onde  $\phi$  :

$$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (5a)$$

à une dimension et

$$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d\mathbf{r} \quad (5b)$$

à trois dimensions où  $\mathbf{p}$  représente l'impulsion. **Par définition on note :**

$$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \phi \rangle$$

- Le produit hermitien entre deux états possibles  $|\phi\rangle$  et  $|\psi\rangle$  peut donc aussi s'écrire , dans le cas à une dimension :

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\tilde{\psi}(p)} \tilde{\phi}(p) dp \quad (6)$$

avec une généralisation immédiate à trois dimensions.

- Soit une fonction d'onde normée, on obtient, d'après la formule de Parseval-Plancherel, la relation

$$\langle \phi | \phi \rangle = 1 = \int |\tilde{\phi}(p)|^2 dp$$

ainsi  $|\tilde{\phi}(p)|^2$  est une densité de probabilité dans l'espace des impulsions.

- Noter enfin que la transformation de Fourier inverse s'écrit :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (7)$$

avec une généralisation à trois dimensions analogue.

b. ETAT PHYSIQUE D'UN SYSTEME DE PLUSIEURS PARTICULES

Soit un système de plusieurs particules, par exemple 1 et 2 pour fixer les idées; on le décrit, dans le cas général, par un état physique **unique**  $|\phi_{12}\rangle$ .

Si toutes les particules sont de spin nul, on décrit l'état physique par une fonction d'onde  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  où  $\mathbf{r}_i$  représente la position de la particule  $i$ . **Par définition, on note :**

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \phi_{12} \rangle$$

Le produit hermitien s'écrit donc, pour le cas à une dimension :

$$\langle \psi_{12} | \phi_{12} \rangle = \iint_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x_1, x_2) \phi(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad (8)$$

ce qui se généralise sans problème à trois dimensions. On peut également définir la transformation de Fourier à plusieurs variables et retrouver l'ensemble des résultats précédents.

• **Produit tensoriel**

Lorsque deux particules sont sans interaction (c'est à dire, par exemple, qu'elles sont localisées à deux endroits très éloignés de l'espace, ou encore, qu'elles possèdent des énergies très différentes), on utilise la simplification suivante, qui est fautive en toute rigueur et souvent très discutable : l'état du système de deux particules est le produit tensoriel des états d'une particule, ce qui s'écrit :  $|\phi_{12}\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle$  où le signe produit tensoriel est souvent omis.

L'utilisation du produit tensoriel est extrêmement simple puisque, par définition, la fonction d'onde associée est le **produit** des fonctions d'ondes; autrement dit,

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | (|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle) = \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2)$$

- A titre d'exercice, on peut calculer le produit hermitien entre des états sous forme de produit tensoriel, à une dimension :

$$\begin{aligned} (\langle \psi_1 | \langle \psi_2 |) (|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle) &= \iint_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_1(x_1) \bar{\psi}_2(x_2) \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_1(x) \phi_1(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_2(x) \phi_2(x) dx \\ &= \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle \end{aligned}$$

• **Base des états**

Les produits tensoriels introduits précédemment forment une base des états. Autrement dit, soit  $\{|a_1\rangle\}$  une base de l'espace des états de la particule 1, soit  $\{|a_2\rangle\}$  une base de l'espace des états de la particule 2, tout état  $|\phi_{12}\rangle$  du système des deux particules peut se mettre sous forme d'une combinaison linéaire de produits tensoriels :

$$|\phi_{12}\rangle = \sum_{a_1 a_2} C(a_1, a_2) |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle$$

- **Particules identiques**

Si les particules sont identiques (c'est-à-dire que leurs caractéristiques, la masse, etc, sont les mêmes), deux électrons par exemple, alors, il faut remplacer le produit tensoriel par un produit tensoriel symétrisé ou antisymétrisé, suivant les cas.

c. **ESPACE À PLUSIEURS DIMENSIONS**

Dans les parties précédentes, on a plusieurs fois évoqué les fonctions d'onde à une dimension et celles à trois dimensions. Considérons une particule sans spin, il peut être parfois intéressant d'exprimer les états à plusieurs dimensions par un produit tensoriel d'états à une dimension  $|\psi\rangle = |\phi_x\rangle |\phi_y\rangle |\phi_z\rangle$ . Dans ce cas, la fonction d'onde est le produit des fonctions d'onde à une dimension :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle &= \langle x | \phi_x \rangle \langle y | \phi_y \rangle \langle z | \phi_z \rangle \\ \text{i.e.} \quad \psi(\mathbf{r}) &= \phi_x(x) \phi_y(y) \phi_z(z) \end{aligned}$$

où  $(x, y, z)$  sont les composantes de  $\mathbf{r}$ .

Il s'agit d'une simple séparation des variables. Malgré la ressemblance formelle, ce produit tensoriel, que l'on retrouvera avec le spin, n'a pas le même sens physique que celui du §b. Ici, l'état physique de la particule est le produit **complet** des trois composantes, qui n'ont séparément aucune signification.

## 2 Opérateurs

*On travaille ici à une dimension, mais tout se généralise sans difficulté à trois dimensions*

a. **OPÉRATEURS À UNE PARTICULE**

Comme on a pu le constater, les paramètres de la mécanique classique, comme la position  $x$ , l'impulsion  $p$  ou l'énergie  $E$  d'une particule, n'apparaissent plus dans la fonction d'onde qui permet de définir son état physique (le paramètre  $x$  de la fonction d'onde désigne toutes les positions possibles de l'espace et non une position particulière de la particule). Bien sûr, on peut parfois les retrouver incidemment, par exemple, si la fonction d'onde est très pointue en un point  $x_o$ , ce point représente assez bien la position de la particule. Cependant, dans un cas général, cela n'est pas aussi aisé, et il convient de trouver un formalisme simple et adapté à toutes les situations.

A chaque paramètre correspond un opérateur qui agit dans l'espace des états.

- Soit  $O$  un opérateur,  $|\phi\rangle$  et  $|\psi\rangle$  des états et  $\lambda \in \mathbb{C}$ ,  $O$  vérifie les propriétés de linéarité suivantes :

$$O(\lambda|\phi\rangle) = \lambda(O|\phi\rangle) \tag{9}$$

$$O(|\phi\rangle + |\psi\rangle) = O|\phi\rangle + O|\psi\rangle \quad (10)$$

(voir également d'autres propriétés des opérateurs au §d)

## b. OPÉRATEURS ÉLÉMENTAIRES

### • Position

L'opérateur position est noté  $\hat{x}$  ou plus simplement  $x$ . A un état sans spin  $|\phi\rangle$  est associée son image  $\hat{x}|\phi\rangle$ , qui a pour fonction d'onde :

$$\begin{aligned} \langle x | (\hat{x}|\phi\rangle) &\equiv x \langle x | \phi \rangle \\ &= x\phi(x) \end{aligned} \quad (11)$$

le terme de gauche se note  $\langle x | \hat{x} | \phi \rangle$  (voir §f plus loin).

- On définit les états propres de l'opérateur position, notés  $|x\rangle$ . **Par définition, on a :**  $\hat{x}|x_o\rangle = x_o|x_o\rangle$ . L'état  $|x_o\rangle$  est un état où la particule est entièrement localisée au point  $x_o$ . De même que les ondes planes (libres), cet état n'est pas (en toute rigueur) un état physique.
- On démontre la relation (cf relation de fermeture) :

$$|\phi\rangle = \int |x\rangle \phi(x) dx \quad (12)$$

on déduit de (11) et (12) :

$$\begin{aligned} \hat{x}|\phi\rangle &= \hat{x} \int |x\rangle \phi(x) dx \\ &= \int (\hat{x}|x\rangle) \phi(x) dx \\ &= \int |x\rangle x\phi(x) dx \end{aligned} \quad (13)$$

où le terme de droite est une combinaison linéaire des états  $|x\rangle$ .

### • Impulsion

L'opérateur impulsion est noté  $\hat{p}$  ou plus simplement  $p$ . A un état sans spin  $|\phi\rangle$  est associée son image  $\hat{p}|\phi\rangle$ , qui a pour fonction d'onde :

$$\langle x | (\hat{p}|\phi\rangle) \equiv -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(x) \quad (14)$$

le terme de gauche se note  $\langle p | \hat{p} | \phi \rangle$  (voir §f plus loin).

- On définit les états propres de l'opérateur impulsion, notés  $|p\rangle$ . Leur fonction d'onde est une onde plane. Ce sont des états libres que l'on a rencontrés précédemment. Avec les conditions de normalisation de la transformation de Fourier, on a exactement :

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-iph/\hbar} \quad (15)$$

**Par définition, on a :**  $\hat{p}|p_o\rangle = p_o|p_o\rangle$ .

- De façon analogue à la formule utilisant les états propres de position, on établira la relation  $|\phi\rangle = \int |p\rangle \tilde{\phi}(p) dp$ , d'où également l'écriture :

$$\hat{p}|\phi\rangle = \int |p\rangle p \tilde{\phi}(p) dp \quad (16)$$

ou, si l'on travaille avec les états propres de position,

$$\hat{p}|\phi\rangle = \int |x\rangle \left( -i\hbar \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right) dx \quad (17)$$

- **Parité**

On définit l'opérateur parité, que l'on note  $\Pi$ . Il agit sur un état  $|\phi\rangle$  selon la règle :

$$\langle x|(\Pi|\phi\rangle) = \langle -x|\phi\rangle$$

donc, soit  $|\phi'\rangle = \Pi|\phi\rangle$ , sa fonction d'onde associée est  $\phi'(x) = \phi(-x)$ .

### c. OPÉRATEURS COMPOSÉS

- **Composition des opérateurs**

La somme et la composition des opérateurs sont définis comme pour les fonctions. A titre d'exercice, écrivons deux exemples de compositions :

$$\hat{x}^2|x_o\rangle = \hat{x}(\underbrace{\hat{x}|x_o\rangle}_{\text{état propre}}) = \hat{x}(x_o|x_o\rangle) = x_o(\hat{x}|x_o\rangle) = x_o(x_o|x_o\rangle) = x_o^2|x_o\rangle$$

(où on a sorti  $x_o$  suivant la relation (9) ) et, d'autre part,

soit un état  $|\phi\rangle$ , l'état  $\hat{p}|\phi\rangle$  a pour fonction d'onde  $-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(x)$  (d'après (14) ) donc l'état  $\hat{p}^2|\phi\rangle = \hat{p}(\hat{p}|\phi\rangle)$  a pour fonction d'onde

$$-i\hbar \frac{\partial (-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x})}{\partial x}(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x)$$

- En règle générale, les opérateurs **ne commutent pas**. L'ordre dans lequel on les fait agir est donc primordial. Avec les notations de Dirac, il suffit de faire agir les opérateurs dans l'ordre où ils se présentent (y compris quand on les fait agir par la gauche, comme au §d).

- *Exercice* : Soit un état  $|\phi\rangle$  donné, calculer successivement les fonctions d'ondes associées à  $\hat{p}|\phi\rangle$ ,  $\hat{p}^2|\phi\rangle$ ,  $\Pi\hat{p}^2|\phi\rangle$  puis à  $\Pi|\phi\rangle$ ,  $\hat{p}\Pi|\phi\rangle$  et  $\hat{p}^2\Pi|\phi\rangle$ . En conclure que  $\Pi$  l'opérateur parité et  $\hat{p}$  ne commutent pas mais que  $\Pi$  commute avec  $\hat{p}^2$ .

- **Potentiel**

Pour tout potentiel  $V(x)$  on définit l'opérateur  $\hat{V}$  suivant (à une particule) : à l'état  $|\phi\rangle$  est associé l'état  $\hat{V}|\phi\rangle$  dont la fonction d'onde s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle x | (\hat{V}|\phi\rangle) &= V(x) \langle x | \phi \rangle \\ &= V(x) \phi(x) \end{aligned} \quad (18)$$

On peut encore écrire  $\hat{V} = V(\hat{x})$ , comme une fonction de l'opérateur  $\hat{x}$ .

Noter alors que les états  $|x\rangle$  sont des états propres du potentiel, d'où la formule :

$$\hat{V}|\phi\rangle = \int |x\rangle V(x)\phi(x)dx \quad (19)$$

- **Energie**

On définit l'énergie d'une particule libre par l'opérateur cinétique :  $\hat{p}^2/2m$  où  $m$  désigne la masse de la particule. C'est un cas particulier de la composition des opérateurs, les états propres sont les états libres  $|p\rangle$ .

- Si une particule est plongée dans un potentiel  $V$ , son énergie est définie par le Hamiltonien  $H = \hat{p}^2/2m + \hat{V}$ .

Les états propres de  $H$  sont les états stationnaires  $|\phi_n\rangle$  définis par :

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (20)$$

où  $E_n$  désigne l'énergie de l'état. On a l'évolution dans le temps :

$$|\phi_n(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n(0)\rangle \quad (21)$$

*Démonstration* : L'équation de Schrödinger,  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi_n(t)\rangle = H|\phi_n(t)\rangle$  devient, pour un état stationnaire  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi_n(t)\rangle = E_n|\phi_n(t)\rangle$  dont la solution est bien donnée par la formule (21).

- *Exemple* : l'oscillateur harmonique (à une dimension). Les états propres  $|n\rangle$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) de  $H = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$ , où  $\omega$  désigne la pulsation de l'oscillateur, vérifient :

$$H|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle$$

ils ne dépendent évidemment pas du temps, et, dans la formule (21), on posera, par exemple :  $|\phi_n(0)\rangle = |n\rangle$ .

- Dans l'exemple précédent de l'oscillateur harmonique, on peut définir un opérateur de création  $a^\dagger$  qui relie deux états d'énergies successives :

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (22)$$

on exprime  $a^\dagger$  à partir des opérateurs élémentaires :

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (23)$$

- On définit l'opérateur de translation  $T_{x_o} = e^{i\hat{p}x_o/\hbar}$ . La fonction d'onde associée à l'état  $T_{x_o}|\phi\rangle$  est  $\phi(x+x_o)$ . Pour le démontrer, on peut développer l'exponentielle :

$$e^{i\hat{p}x_o/\hbar} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \frac{i}{\hbar} \hat{p} x_o \right)^k$$

car  $\hat{p}$  commute avec lui-même; en appliquant cet opérateur sur l'état  $|\phi\rangle$  on trouve, d'après (14) :

$$\langle x | T_{x_o} | \phi \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x_o^k}{k!} \underbrace{\left( \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) \right)^k}_{=1} \left( \frac{\partial^k \phi}{\partial x^k} \right) (x)$$

on obtient exactement le développement de Taylor-Young de la fonction d'onde. Si celle-ci est bien analytique (c'est-à-dire développable en série entière), le résultat en découle immédiatement.

#### d. ADJOINT

- **Opérateur agissant sur les bras**

Notons  $O\phi$  la fonction d'onde associée à  $O|\phi\rangle$ , on a  $O|\phi\rangle = |O\phi\rangle$ . Par définition, on note :

$$\langle O\phi | \equiv \langle \phi | O^\dagger \quad (24)$$

- A partir de cette relation et de la relation (1), on en déduit :

$$\left( \langle \psi | O^\dagger \right) | \phi \rangle = \overline{\langle \phi | (O | \psi \rangle)} \quad (25a)$$

soit, en retirant les parenthèses :

$$\langle \psi | O^\dagger | \phi \rangle = \overline{\langle \phi | O | \psi \rangle} \quad (25b)$$

cette relation définit parfaitement l'action de  $O^\dagger$ , aussi bien par la droite que par la gauche (et ainsi que celle de tout opérateur par la gauche).

- On a les règles suivantes :

$$(O_1 + O_2)^\dagger = O_1^\dagger + O_2^\dagger \quad (26)$$

$$(O_1 O_2)^\dagger = O_2^\dagger O_1^\dagger \quad (27)$$

$$\text{et d'après (2) : } (\lambda O)^\dagger = \bar{\lambda} O^\dagger \quad (28)$$

Lorsque l'on a une représentation matricielle, on peut écrire  $O^\dagger = {}^t\bar{O}$  où  ${}^tO$  est la transposée de  $O$ .

- *Exemple* : l'adjoint de l'opérateur de création  $a^\dagger$  (défini pour l'oscillateur harmonique) est l'opérateur de destruction  $a$ . Avec les règles précédentes, on tire de (23) :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (29)$$

et on démontre (voir §e) :

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (30)$$

en particulier :  $a|0\rangle = 0$ .

- **Opérateurs auto-adjoints**

Tous les opérateurs physiques, c'est-à-dire décrivant un paramètre physique (observable), sont auto-adjoints (= hermitiens), c'est-à-dire que  $O^\dagger = O$ , c'est le cas de  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$ ,  $H$  mais pas de l'opérateur de déplacement  $T_{x_0}$ , ni de l'opérateur  $a^\dagger$ .

e. RELATION DE FERMETURE

- **Opérateur**  $|\psi\rangle\langle\phi|$

L'écriture  $|\psi\rangle\langle\phi|$  est bien un opérateur. Pour s'en convaincre, il suffit de le faire agir sur un état  $|\phi_o\rangle$  : on a

$$\left(|\psi\rangle\langle\phi|\right)|\phi_o\rangle = |\psi\rangle\langle\phi|\phi_o\rangle$$

où le second facteur est un scalaire.

- Cet opérateur est en fait un projecteur, le cas le plus intéressant étant celui de  $|\phi\rangle\langle\phi|$  qui est un projecteur orthogonal sur la direction de  $|\phi\rangle$ .

- **Base des états propres**

Soit un opérateur auto-adjoint, ses états propres forment une base orthogonale (hilbertienne en dimension infinie) de l'espace des états.

Ainsi on a déjà vu que les pseudo-états  $|x\rangle$  forment une base des états d'une particule, de même que les pseudo-états  $|p\rangle$ .

Les états stationnaires d'un Hamiltonien forment également une base (orthogonale). Par exemple, les états stationnaires  $|n\rangle$  de l'oscillateur harmonique.

- **Relation de fermeture**

Soit une base orthogonale  $|\phi_n\rangle$  de l'espace, les projecteurs  $|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$  sont orthogonaux deux à deux, en particulier ils commutent; leur somme (qui est dite pour cette raison orthogonale) est l'identité :

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = I$$

Par exemple, on a :

$$\sum_{k=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = I \quad (31)$$

mais aussi  $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = I \quad (32)$

et  $\int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle\langle p| dp = I \quad (33)$

- L'intérêt de ces relations est qu'on peut les introduire dans n'importe quel jeu d'écriture (puisque  $I|\phi\rangle = |\phi\rangle$ ). Par exemple, pour démontrer la relation (17) à partir de (14), on écrit :

$$\hat{p}|\phi\rangle = \underbrace{I}_{=\int |x\rangle\langle x| dx} \hat{p}|\phi\rangle = \int |x\rangle\langle x| \hat{p}|\phi\rangle dx = \int |x\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) dx$$

ou bien, pour démontrer la relation (30), on applique la relation (25) :

$$\begin{aligned}
 \langle m|a|n\rangle &= \overline{\langle n|a^\dagger|m\rangle} \\
 &= \overline{\langle n|\sqrt{m+1}|m+1\rangle} \\
 &= \sqrt{m+1} \overline{\langle n|m+1\rangle} \\
 &= \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1}
 \end{aligned}$$

où l'on a appliqué l'orthogonalité des états propres. D'où finalement :

$$\begin{aligned}
 a|n\rangle = I a|n\rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m|a|n\rangle \\
 &= \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n} \\
 &= |n\rangle \sqrt{n}
 \end{aligned}$$

On aurait pu également utiliser la relation (24), qui s'écrit ici  $\langle n|a = \langle n+1|\sqrt{n+1}$ .

- *Application* : Calcul de la valeur moyenne d'un opérateur hermitien.

Par définition, la valeur moyenne d'un opérateur hermitien  $A$  dans l'état  $|\phi\rangle$  s'écrit :  $\langle A \rangle = \langle \phi|A|\phi\rangle$ . En introduisant la relation de fermeture sur la base  $\{|a\rangle\}$  des états propres de cet opérateur, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \langle \phi|IAI|\phi\rangle \\
 &= \langle \phi|(\sum_a |a\rangle\langle a|)A(\sum_a |a\rangle\langle a|)|\phi\rangle \\
 &= \sum_{a a'} \langle \phi|a\rangle\langle a|A|a'\rangle\langle a'|\phi\rangle \\
 &= \sum_{a a'} \langle \phi|a\rangle a \delta_{aa'} \langle a'|\phi\rangle \\
 &= \sum_a |\langle \phi|a\rangle|^2 a \\
 &= \sum_a p_\phi(a) a
 \end{aligned}$$

où l'on a appliqué l'orthogonalité des états propres d'un opérateur hermitien et l'on définit  $p_\phi(a)$  la probabilité de trouver un état  $|\phi\rangle$  donné dans l'état propre  $|a\rangle$ .

f. RÈGLES DE CALCUL FORMEL

- **Règle d'associativité**

Lorsque l'on écrit une séquence avec les notations de Dirac, on peut associer de façon quelconque les facteurs successifs. Pour cette raison, on peut supprimer les parenthèses. Par exemple :

$$|u\rangle\langle v|A\lambda|y\rangle\langle z| = |u\rangle(\langle v|A\lambda|y\rangle)\langle z| = (|u\rangle\langle v|)A\lambda(|y\rangle\langle z|) = \text{etc}$$

Attention cependant, lorsqu'il existe des produits tensoriels, à ce que les termes correspondant au même espace peuvent parfois se regrouper (voir §g).

- **Règle de conjugaison hermitique**

La conjuguée hermitique d'une séquence donnée s'obtient en prenant la séquence dans l'ordre inverse, et en remplaçant chaque terme par son conjugué, suivant la correspondance suivante :

$$\begin{aligned} \lambda &\longleftrightarrow \bar{\lambda} \\ |x\rangle &\longleftrightarrow \langle x| \\ A &\longrightarrow A^\dagger \end{aligned}$$

- *Exemple :*

$$\left(|u\rangle\langle v|A|w\rangle\langle x|\lambda|y\rangle\langle z|\right)^\dagger = |z\rangle\langle y|\bar{\lambda}|x\rangle\langle w|A^\dagger|v\rangle\langle u|$$

- *Exercice :*

- Quelle est la nature de la séquence précédente: nombre, ket, bra, opérateur?
- Calculer  $(|\phi\rangle\langle\psi|)^\dagger$ .

g. OPÉRATEUR À PLUSIEURS PARTICULES

De même que l'on a défini l'état d'un système à plusieurs particules (mettons deux particules notées 1 et 2), on définit des opérateurs à plusieurs particules, l'exemple le plus courant étant simplement le Hamiltonien d'un système de particules en interaction.

Ces opérateurs s'écrivent très souvent, mais pas systématiquement, sous la forme tensorielle  $O_1O_2$  (le signe tensoriel est presque toujours omis).

Si l'état physique est lui-même séparé, l'opérateur 1 agira sur la particule 1 et idem pour 2, soit :

$$O_1O_2|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle = (O_1|\phi_1\rangle)(O_2|\phi_2\rangle) \tag{34}$$

Dans une somme, on rencontrera parfois un opérateur  $O_1$  que l'on fait agir sur l'état d'un système de deux particules. Par exemple, le Hamiltonien d'un système de particules libres s'écrit usuellement  $H = p_1^2/2m + p_2^2/2m$  où chacun des termes n'agit que sur l'état d'une particule et laisse implicitement l'état de l'autre invariant. Il faudrait écrire en toute rigueur  $O_1 \otimes I_2$ .

#### h. ESPACE À PLUSIEURS DIMENSIONS

De même que pour les états, on pourra définir des produits tensoriels qui, bien que formellement ressemblant aux précédents, n'ont pas la même signification physique. Soit par exemple le Hamiltonien précédent auquel on ajoute un terme d'interaction entre les deux particules :  $V(x_1 - x_2)$  (à une dimension). On prendra, pour fixer les idées,  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  le potentiel d'un oscillateur harmonique.

Pour trouver les états stationnaires, on fait le changement de variables

$x_{\pm} = x_2 \pm x_1$ . On peut écrire les solutions sous la forme  $|\phi_+\rangle |m_-\rangle$  d'où :

$$\begin{aligned} \langle x_+ | \langle x_- | \phi_+ \rangle | m_- \rangle &= \langle x_+ | \phi_+ \rangle \langle x_- | m_- \rangle \\ &= \phi_+(x_+) \quad \phi_{m_-}(x_-) \end{aligned}$$

où  $\phi_+$  est une fonction d'onde libre et  $\phi_{m_-}$  est la fonction d'onde de l'état  $|m_-\rangle$  d'une particule dans un oscillateur harmonique. Bien que l'on parle alors de pseudo-particule par analogie, chaque partie du produit tensorielle comporte des informations sur les **deux** particules ( $x_+$  correspond au centre de masse et  $x_-$  à la distance relative).

## B Commutateurs

### 1 DÉFINITION

Soit deux opérateurs  $A$  et  $B$  agissant dans un espace  $\mathcal{E}$ . On appelle commutateur de  $A$  et  $B$  l'opérateur  $AB - BA$  et on le note  $[A, B]$ .

### 2 PROPRIÉTÉS UTILES

$$[A, B] = -[B, A] \quad (35)$$

$$[\lambda A, B] = \lambda[A, B] \quad (36)$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad (37)$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (38)$$

- *Exercices* :
  - Démontrer ces propriétés.
  - Montrer que le produit de deux opérateurs hermitiens n'est hermitien que si ces deux opérateurs commutent. Donner des exemples.
- Commutateurs importants :

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

$$[V(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}(\hat{x})$$

$$[\hat{x}, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p}(\hat{p})$$

## C Rappels sur les espaces hermitiens (dim. finie)

Dans cette partie on suppose connues les définitions et propriétés suivantes :

- espace vectoriel, base
- opérateur linéaire agissant sur un espace vectoriel
- valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur
- matrice représentant un opérateur linéaire dans une base, diagonalisation.

Soit  $\mathcal{E}$  un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$ , de dimension finie.

## 1 Produit scalaire (Forme hermitienne non dégénérée positive)

C'est une application  $F$  de  $\mathcal{E} \times \mathcal{E}$  dans  $\mathbb{C}$  qui vérifie les relations suivantes:

- $\forall x, x', y, y' \in \mathcal{E}$  et  $\forall \lambda \in \mathbb{C}$   
 $F(x + x', y) = F(x, y) + F(x', y)$  et  $F(\lambda x, y) = \bar{\lambda}F(x, y)$   
 $F(x, y + y') = F(x, y) + F(x, y')$  et  $F(x, \lambda y) = \lambda F(x, y)$   
 $F$  est semi-linéaire par rapport à la première variable et linéaire par rapport à la seconde (notation des physiciens) ( $F$  est sesquilinéaire).
- $F(y, x) = \overline{F(x, y)} \quad \forall x, y \in \mathcal{E}$  ( $F$  est hermitienne)
- $F(x, x) = 0 \quad \forall x \in \mathcal{E} \implies x = 0$  ( $F$  est non dégénérée)  
(ou, ce qui est équivalent  $F(x, y) = 0 \quad \forall y \in \mathcal{E} \implies x = 0$ )
- $F(x, x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathcal{E}$  ( $F$  est positive)

## 2 Espace Hermitien

- On choisit un produit scalaire  $F$  quelconque. On notera  $F(x, y)$  sous la forme  $(x|y)$ .
- $\mathcal{E}$  muni de ce produit scalaire est un **espace hermitien**.
- On appelle norme de  $x$  le réel positif  $\sqrt{(x|x)}$  et on le note  $\|x\|$ .
- On a l'**inégalité de Cauchy-Schwarz**

$$|(x|y)| \leq \|x\| \|y\| \quad \forall x, y \in \mathcal{E}$$

qui est équivalente à l'inégalité triangulaire :

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in \mathcal{E}$$

- Deux vecteurs  $x$  et  $y$  sont **orthogonaux** (relativement à  $F$ ) si et seulement si

$$(x|y) = 0$$

- Il existe des **bases orthonormées**  $e_i$  de  $\mathcal{E}$  qui vérifient :

$$(e_i|e_j) = \delta_{ij} \quad \begin{cases} \delta_{ij} = 1 & \text{si } i = j \\ \delta_{ij} = 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

- Un vecteur  $u$  quelconque se décompose sur une base orthonormée :

$$u = \sum_i (e_i|u) e_i$$

et on a pour tout couple de vecteurs  $u$  et  $v$  :

$$(u|v) = \sum_i \overline{(e_i|u)} (e_i|v)$$

- On appelle **forme linéaire** une application linéaire de  $\mathcal{E}$  dans  $\mathbb{C}$  :  
 $x \in \mathcal{E} \mapsto f(x) \in \mathbb{C}$  qui vérifie :

$$f(\lambda x) = \lambda f(x)$$

$$f(x + y) = f(x) + f(y)$$

- L'ensemble des formes linéaires définies sur  $\mathcal{E}$  est un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$  appelé dual de  $\mathcal{E}$ , noté  $\mathcal{E}^*$ .
- Le dual de  $\mathcal{E}^*$  est  $\mathcal{E}$ , autrement dit :  $(\mathcal{E}^*)^* = \mathcal{E}$ .
- On établit une **bijection**  $\varphi$  entre  $\mathcal{E}$  et  $\mathcal{E}^*$  : l'application qui à tout élément  $y \in \mathcal{E}$  fait correspondre la forme linéaire  $f \in \mathcal{E}^*$  définie par :

$$f(x) = (y|x)$$

$\varphi$  est bijective donc pour toute forme linéaire  $f \in \mathcal{E}^*$  il existe un élément unique  $y \in \mathcal{E}$  tel que :

$$f(x) = (y|x) \quad \forall x \in \mathcal{E}$$

### 3 Propriétés sur les opérateurs

- On définit l'**adjoint** d'un opérateur linéaire  $A$  de  $\mathcal{E}$  dans  $\mathcal{E}$  : c'est l'unique opérateur linéaire unique  $A^\dagger$  de  $\mathcal{E}$  dans  $\mathcal{E}$  tel que :

$$(A^\dagger(y)|x) = (y|A(x)) \quad \forall x, y \in \mathcal{E}$$

- On dit qu'un opérateur est **hermitien** lorsqu'il vérifie :

$$(A(y)|x) = (y|A(x)) \quad \forall x, y \in \mathcal{E}$$

- *Théorème*

$$A \text{ hermitien} \iff A = A^\dagger$$

(aussi, en dimension finie on dit indifféremment auto-adjoint ou hermitien).

- Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles.
- Les sous-esp. propres associés à deux val. propres distinctes sont orthogonaux ( $u_1$  de val. propre  $a_1$  et  $u_2$  de val. propre  $a_2$ , alors :  $a_1 \neq a_2 \implies (u_1|u_2) = 0$ ).
- Il existe des bases orthonormées de  $\mathcal{E}$  formées de vecteurs propres de  $A$  (donc la matrice représentant  $A$  est diagonale dans une telle base).
- On dit qu'un opérateur est **unitaire** s'il vérifie l'une quelconque des propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} (U(x)|U(y)) &= (x|y) \quad \forall x, y \in \mathcal{E} \\ \|U(x)\| &= \|x\| \quad \forall x \in \mathcal{E} \\ U^\dagger U &= I \quad (I \text{ est l'identité dans } \mathcal{E}) \\ UU^\dagger &= I \end{aligned}$$

$U$  a un inverse et  $U^{-1} = U^\dagger$

## 4 Exercice

On utilise les notations définies précédemment. On appelle transposé de  $A$  et on note  ${}^tA$  l'opérateur de  $\mathcal{E}^*$  dans  $\mathcal{E}^*$  qui, à la forme linéaire  $f$  fait correspondre la forme linéaire  $f \circ A$  :

$$f \in \mathcal{E}^* \mapsto {}^tA(f) = f \circ A \in \mathcal{E}^*$$

Montrer que:  $A^\dagger = \varphi^{-1} {}^tA \varphi$ .

## D Rappels sur les espaces de Hilbert (dim. infinie)

Soit  $\mathcal{H}$  un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$ , de dimension infinie.

### 1 Produit hermitien

On définit sur  $\mathcal{H}$  un produit hermitien (ou forme hermitienne non dégénérée positive), exactement comme en dimension finie.

## 2 Espace de Hilbert

- On appelle **suite de Cauchy** une suite  $x_n$  d'éléments de l'espace normé  $\mathcal{H}$  qui vérifie :

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ m \rightarrow \infty}} \|x_n - x_m\| = 0$$

- Un espace normé  $\mathcal{H}$  est dit **complet** si toute suite de Cauchy admet une limite dans  $\mathcal{H}$ .
- On appelle **espace de Hilbert** un espace vectoriel  $\mathcal{H}$  sur  $\mathbb{C}$ , de dimension infinie, muni d'un produit scalaire et complet.
- On retrouve dans  $\mathcal{H}$ , comme en dimension finie :
  - l'inégalité de Schwarz,
  - la définition des vecteurs orthogonaux.

## 3 Bases hilbertiennes

Tout espace vectoriel, de dimension finie ou non, a au moins une base : tout vecteur de l'espace peut s'exprimer comme combinaison linéaire finie d'éléments de la base.

Mais dans les espaces de dimension infinie les bases ne sont, en général, pas simples à utiliser. En particulier les bases des espaces de Hilbert (de dimension infinie) ne sont pas dénombrables et, si l'on peut montrer leur existence, on ne peut en général pas les exhiber explicitement.

Dans les espaces de Hilbert il est plus intéressant pour les applications de définir, quand c'est possible, des bases hilbertiennes. Une base hilbertienne est un sous-ensemble  $\{e_i\}$  d'éléments de  $\mathcal{H}$  ayant les propriétés suivantes :

- $(e_i | e_j) = \delta_{ij}$  (les  $e_i$  sont orthonormés).
- Tout élément  $x \in \mathcal{H}$  s'écrit de manière unique sous forme d'une série convergente au moyen des  $e_i$ :

$$x = \sum_{k=0}^{+\infty} x_k e_k \quad \text{avec } x_k \in \mathbb{C} \quad (\iff \lim_{N \rightarrow +\infty} \|x - \sum_{k=0}^N x_k e_k\| = 0)$$

Les bases hilbertiennes ne sont pas des bases car sur une base un vecteur s'écrit comme combinaison linéaire **finie**. On a les propriétés suivantes:

$$x_k = (e_k | x) \quad \sum_{k=0}^{+\infty} |x_k|^2 \quad \text{est convergente}$$

$$\|x\|^2 = \sum_{k=0}^{+\infty} |x_k|^2 \qquad (x|y) = \sum_{k=0}^{+\infty} \overline{x_k} y_k \quad (\text{Parseval})$$

c'est à dire les propriétés (généralisées à une somme infinie) que l'on connaît déjà pour les bases orthonormées en dimension finie.

L'existence d'une base hilbertienne dans un espace de Hilbert est un problème délicat, que l'on résoud difficilement quand les espaces de Hilbert ont la propriété supplémentaire d'être séparables.

En mécanique quantique, on supposera son existence et on confondra dans le vocabulaire et les notations base et base hilbertienne.

## 4 Formes linéaires

- Si on définit le dual comme l'espace vectoriel des formes linéaires continues (et non l'espace de toutes les formes linéaires), il y a alors la même bijection  $\varphi$  entre  $\mathcal{H}$  et  $\mathcal{H}^*$  qu'en dimension finie, grâce au théorème de Riesz (qui s'énonce :  $f$  forme linéaire continue  $\iff (y_i \text{ converge vers } 0 \implies f(y_i) \text{ converge vers } 0)$ ). Grâce à cette bijection, on peut définir, pour tout  $y \in \mathcal{H}$ , une forme linéaire  $f \in \mathcal{H}^*$ :

$$x \xrightarrow{f} f(x) = (y|x)$$

Et réciproquement, toute forme linéaire  $f$  de  $\mathcal{H}^*$  peut-être mise sous la forme d'un produit scalaire par un vecteur  $y$  fixé, tel que :

$$f(x) = (y|x) \quad \forall x \in \mathcal{H}$$

- *Exercice* : montrer que  $\varphi$  est semi-linéaire.

## 5 OPÉRATEURS

*Remarque importante* : les définitions données dans ce paragraphe sont peu précises du point de vue mathématique, en particulier on ne tiendra pas compte du fait que le domaine de définition des opérateurs considérés n'est pas toujours l'espace  $\mathcal{H}$  en entier. On n'indique que ce qui sera utilisé en mécanique quantique et se ramène à des recettes.

- On appelle adjoint d'un opérateur  $A$  l'opérateur  $A^\dagger$  unique défini par:

$$(A^\dagger y|x) = (y|Ax) \quad \forall x, y \in \mathcal{H}$$

L'adjoint d'un opérateur n'existe pas toujours contrairement au cas de la dimension finie, mais les opérateurs que nous considérerons en mécanique quantique auront un adjoint et

nous admettrons en général que cet adjoint vérifie les propriétés que l'on connaît déjà en dimension finie:

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad (\lambda A + \mu B)^\dagger = \bar{\lambda}A^\dagger + \bar{\mu}B^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$\text{si } A^{-1} \text{ existe } (A^{-1})^\dagger = (A^\dagger)^{-1}$$

bien que cela ne soit pas vrai pour tous les opérateurs.

- Un opérateur est dit auto-adjoint s'il vérifie :  $A = A^\dagger$ .
- Un opérateur est dit hermitien s'il vérifie :

$$(Ay|x) = (y|Ax) \quad \forall x, y \in \mathcal{H}$$

En dimension infinie hermitien et auto-adjoint ne coïncident pas pour tous les opérateurs. En mécanique quantique on ne fera pas la distinction.

- Comme en dimension finie on a :
  - les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles.
  - les sous-espaces associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.
 L'existence d'une base de vecteurs propres orthogonaux n'est pas assurée mais nous l'admettrons en mécanique quantique.
- On dit qu'un opérateur est **unitaire** s'il vérifie les trois propriétés suivantes :
  - son domaine de définition est  $\mathcal{H}$  entier
  - son image est  $\mathcal{H}$  entier
  - $(Ux|Uy) = (x|y) \quad \forall x, y \in \mathcal{H}$  ( $U$  est isométrique)
- Si  $U$  est unitaire  $U$  est bijectif et donc il existe  $U^{-1}$ .
- Soit  $U$  défini sur  $\mathcal{H}$  entier, on a les trois équivalences suivantes :

$$U \text{ unitaire} \iff U^\dagger = U^{-1} \iff U^\dagger U = U U^\dagger = I$$

- *Exemple* : la transformation de Fourier est un opérateur unitaire sur  $L^2$ .