Chapitre 3 Outils mathématiques de la mécanique quantique

3.2 Espace des états. Notation de Dirac :

3.2.1 Kets et bras :

On associe à chaque fonction d'onde $\psi(x) \in F$, un vecteur appelé ket, noté $|\psi\rangle$. Ce vecteur est indépendant du choix de la base (comme un vecteur en géométrie euclidienne).
L'ensemble des kets constitue un espace vectoriel noté ε .

$$\psi(x) \in F \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \varepsilon$$

On associe à une base $\{U_i(x)\} \in F$, une base $\{|U_i\rangle\} \in \varepsilon$ appelée représentation dans ε .

Un ket est représenté par un vecteur 'colonne'.

Par exemple, soit un ket $|\psi\rangle \in \varepsilon$, dont l'espace est à deux dimensions et qui s'exprime en fonction des vecteurs de base de la manière suivante : $|\psi\rangle = c_1|U_1\rangle + c_2|U_2\rangle$, alors on écrit :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

A tout ket $|\psi\rangle \in \varepsilon$, on associe un objet mathématique appelé bra et noté $\langle\psi|$ tel que $\langle\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ c'est-à-dire le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$.

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(x)\varphi(x)dx \qquad (3.24)$$

L'espace des bras est appelé espace dual de ε . Il est noté ε^* .

La notation $\langle\psi|\varphi\rangle$ pour le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$ est appelée notation de Dirac.

Un bra est représenté par un vecteur 'ligne'.

Au ket $|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle$ de l'exemple précédent, on associe le bra $\langle\psi| = c_1^*\langle u_1| + c_2^*\langle u_2|$ et on écrit :

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* \end{pmatrix}$$

3.2.2 Relations caractéristiques d'une base orthonormée :

Les deux relations caractéristiques d'une base orthonormée sont :

Relation d'orthonormalisation :

Pour une base discrète : $(u_i, u_j) = \delta_{ij} \rightarrow \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$ (3.25) pour les bases continues : $(w_\alpha, w_\beta) = \delta(\alpha - \beta) \rightarrow \langle w_\alpha | w_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$ (3.26)

Relation de fermeture :

Pour les bases discrètes : $\sum_i u_i^*(x) u_i(x') = \delta(x' - x) \rightarrow \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathrm{I}_d$ (3.27)

Pour les bases continues. $\int w_\alpha^*(x) w_\alpha(x') d\alpha = \delta(x - x') \rightarrow \int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| d\alpha = \mathrm{I}_d$ (3.28)

Où I_d représente l'opérateur identité.

3.2.3 Quelques propriétés :

$\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*$ (3.29)

$\langle \psi | \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \psi | \varphi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi | \varphi_2 \rangle$ (3.30)

$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$ (3.31)

3.2.4 Opérateurs linéaires :

3.2.4.1 Définition :

Soit $|\psi\rangle \in \varepsilon$. Si un objet A associe au ket $|\psi\rangle$, un ket $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ tel que $|\psi'\rangle \in \varepsilon$ et vérifie la relation :

$A(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$ (3.32)

Alors A est un opérateur linéaire.

Dans l'espace des états, A est représenté par une matrice. Ses éléments matriciels sont donnés par :

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

3.2.4.2 Commutateur de deux opérateurs :

On appelle commutateur de deux opérateurs A et B, l'opérateur noté $[A, B]$ et défini par :

$[A, B] = AB - BA$ (3.33)

Remarque :

Pour les kets, bras et opérateurs, il faut respecter l'ordre dans l'écriture.

Exemples :

$AB \neq BA$

$\langle \psi | \varphi \rangle \neq |\varphi\rangle\langle \psi|$

On ne peut changer la place que des nombres complexes :

Exemples :

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

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

$$\langle\varphi|\lambda|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle$$

3.2.4.3 Projecteur sur un ket normé :

Soit un ket normé $|\psi\rangle \in \varepsilon$, et soit l'opérateur défini par :

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (3.34)$$

En appliquant P_ψ sur un ket $|\varphi\rangle$ on trouve,

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle$$

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

$$= \lambda|\psi\rangle \qquad (3.35)$$

λ est le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$. P_ψ est le projecteur orthogonal sur le ket $|\psi\rangle$. On peut vérifier que :

$P_\psi{}^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$ (puisque $|\psi\rangle$ est normé)

$$P_\psi{}^2 = P_\psi \qquad (3.36)$$

Exemple :

Soit un système physique dont l'espace des états est à deux dimensions. $\{|u_i\rangle\}$, $i = 1,2$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle un ket $|\psi\rangle$ a la représentation suivante :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Ecrire le projecteur sur $|\psi\rangle$ et vérifier que $P_\psi{}^2 = P_\psi$

On commence par écrire le bra associé :

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$P_\psi{}^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = P_\psi$$

3.2.4.4 Projecteur sur un sous espace vectoriel :

Soit ε_q un sous espace vectoriel à q dimensions et { $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots. |\varphi_q\rangle$ } une base dans ce sous espace. On appelle projecteur sur le sous espace ε_q l'opérateur noté P_q, défini par :

$$P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \qquad (3.37)$$

3.2.4.5 Opérateur adjoint :

Soit A un opérateur linéaire qui transforme un ket $|\psi\rangle$ en un ket $|\psi'\rangle$. L'opérateur adjoint de A transforme le bra $\langle\psi|$, en $\langle\psi'|$. On écrit :

$$A : |\psi\rangle \to |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$A^+ : \langle\psi| \to \langle\psi'| = \langle\psi|A^+$$

Remarque : $|A\psi\rangle = A|\psi\rangle$ mais $\langle A\psi| = \langle\psi|A^+$

Propriétés :

$$\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \qquad (3.38)$$

$$(A^+)^+ = A \qquad (3.39)$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \qquad (3.40)$$

$$(A+B)^+ = A^+ + B^+ \qquad (3.41)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \qquad (3.42)$$

Remarque : Pour obtenir la matrice qui représente l'opérateur adjoint on transforme les lignes en colonnes et on prend le complexe conjugué.

Exemple :

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow A^{+} = \begin{pmatrix} a^{*} & c^{*} \\ b^{*} & d^{*} \end{pmatrix}$$

3.2.4.6 Conjugaison hermitique :

Pour obtenir le conjugué hermitique d'une expression il faut :

-Remplacer : les constantes par leurs complexes conjugués.

Les bras par les kets associés et les kets par les bras.

Les opérateurs par leurs adjoints.

Inverser l'ordre des facteurs (saufs les constantes. Leur place n'a pas d'importance)

3.2.4.7 Opérateur hermitique :

Un opérateur est dit hermitique s'il coïncide avec son adjoint.

A est hermitique $\Leftrightarrow A = A^{+}$

Exemple : l'opérateur projecteur sur un ket est hermitique. En effet,

$$P_{\psi} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$P_{\psi}{}^{+} = |\psi\rangle\langle\psi| = P_{\psi}$$

En utilisant la définition d'un opérateur hermitique et la relation (3.38) on obtient :

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^{*} \qquad (3.43)$$