Ce sont seulement des intermédiaires de calculs commodes pour les opérations à effectuer sur $\Psi(\vec{r})$

On peut généraliser tout ceci à un ensemble de fonction de $\vec{r}$ $\{w_\alpha(\vec{r})\}$, ou α indice continu

Tableau de correspondance.

	Bases discrète $\{u_i(\vec{r})\}$	Base continue $\{w_\alpha(\vec{r})\}$
orthonormalisation	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$ au sens de Dirac
fermeture	$\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(r) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\int d\alpha\, w_\alpha(\vec{r}) w_\alpha^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$
Développement de $\Psi(\vec{r})$	$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\Psi(\vec{r}) = \int c(\alpha) w_\alpha(\vec{r})\, d\alpha$
Les composante de $\Psi(\vec{r})$	$c_i = (u_i, \Psi) = \int u_i^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})\, d^3r$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \Psi) = \int w_\alpha^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})\, d^3r$
produit scalaire	$(\varphi, \Psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \Psi) = \int b^*(\alpha) c(\alpha)\, d\alpha$
Carré de la norme	$(\Psi, \Psi) = \sum_i \lvert c_i \rvert^2$	$(\Psi, \Psi) = \int \lvert c(\alpha) \rvert^2 d\alpha$

III : Espace des états : Notation de Dirac :

Nous allons dans cette partie décrire le système physique par un vecteur d'état appartenant à l'espace de Hilbert noté par $\mathcal{E}$ au lieu des fonctions d'onde $\in F$.

1- Kets et Bras :

Un vecteur de l'espace $\mathcal{E}$ s'appelle un Ket est représenté par un vecteur colonne noté par $|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$.

à chaque Ket on associe un vecteur conjugué de l'espace dual qu'on appelle Bra et noté par $\langle\Psi| \in \mathcal{E}^*$

c'est un vecteur ligne

cette notation due à Dirac permet de simplifier considérablement le formalisme mathématique de la mécanique quantique.

- Produit scalaire de $|\Psi\rangle$ au $|\varphi\rangle$ noté $\langle\varphi|\Psi\rangle$
- symetrie hermitienne : $\langle\varphi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\varphi\rangle^*$
- linéarité en $|\Psi\rangle$ et antilinéarité en $\langle\varphi|$

$$\langle\varphi|\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\Psi_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\Psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\Psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\Psi\rangle$$

notation de produit scalaire $(|\varphi\rangle, |\Psi\rangle) = \langle\varphi|\Psi\rangle$

(bra-ket)

2- Opérateurs linéaires : l'opérateur est représenté par une matrice.

a - Définition :

A : Opérateur linéaire : $|\Psi\rangle \longrightarrow A|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle$

$|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle \in \mathcal{E}$

tel que : $A(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1(A|\Psi_1\rangle) + \lambda_2(A|\Psi_2\rangle$

b.- Opérations sur les opérateurs :

A et $B \longrightarrow$ 2 opérateurs linéaires.

$(A+B)|\Psi\rangle = A|\Psi\rangle + B|\Psi\rangle$

$(\lambda A)|\Psi\rangle = \lambda(A|\Psi\rangle) \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}$

$AB|\Psi\rangle = A(B|\Psi\rangle = A|\Psi'\rangle$ avec $|\Psi'\rangle = B|\Psi\rangle$

$AB \neq BA$ en général

Si $AB = BA$ on dit que les deux opérateurs commutent

Le commutateur de A et $B \longrightarrow [A,B] = AB - BA$.

c.- Exemple d'opérateur : Projecteur :

Soit $|\Psi\rangle$ normé à 1. c.à d $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

Opérateur P_Ψ définie par $P_\Psi\ |\Psi\rangle\langle\Psi|$

$|\varphi\rangle \xrightarrow{P_\Psi} P_\Psi|\varphi\rangle = |\Psi\rangle\underbrace{\langle\Psi|\varphi\rangle}_{\lambda} = \lambda|\Psi\rangle$

$P_\Psi|\varphi\rangle$ est la projection de $|\varphi\rangle$ sur $|\Psi\rangle$

P_Ψ : projecteur sur le ket $|\Psi\rangle$

$P_\Psi^2 = P_\Psi P_\Psi = P_\Psi$ car $|\Psi\rangle\underbrace{\langle\Psi|\Psi\rangle}_{1}\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi| = P_\Psi$

d : Action sur les bras :

$|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$

on a le produit scalaire $\langle\varphi|\Psi'\rangle = \langle\varphi|(A|\Psi\rangle)$

on associe $\langle\varphi'|$ tel que $\langle\varphi'|\Psi\rangle = (\langle\varphi|A)|\Psi\rangle$

La correspondance $\langle\varphi| \xrightarrow{A} \langle\varphi'|$ défini l'action de A sur le bra $\langle\varphi|$

Il convient de poser $\langle\varphi'| = \langle\varphi|A$

3°/ Opérateur adjoint

Déf : $|\Psi\rangle \in \mathcal{E} \longrightarrow \langle\Psi| \in \mathcal{E}^*$

$$A|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle \longrightarrow \langle\Psi'|$$

avec $\langle\Psi'| = \langle\Psi|A^+$: A^+ est l'opérateur adjoint de A

Relation essentielle : $\langle\varphi|A|\Psi\rangle = (\langle\Psi|A^+|\varphi\rangle)^*$

Dém : $|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$

$$\langle\varphi|\Psi'\rangle = \langle\Psi'|\varphi\rangle^* \equiv \langle\varphi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^+|\varphi\rangle^*$$

c'est la conjugaison hermétique.

Propriétés :

$(A^+)^+ = A$; $(\lambda A + \mu B)^+ = \lambda^* A^+ + \mu^* B^+$

$(A.B)^+ = B^+ A^+$

Règle de conjugaison hermétique

conjugaison hermétique : $\lambda \longrightarrow \lambda^*$ complexe conjugué

$$|\Psi\rangle \longrightarrow \langle\Psi|$$
$$\langle\Psi| \longrightarrow |\Psi\rangle$$
$$A \longrightarrow A^+$$

Conjugué hermétique d'une expression :

remplacer : λ par λ^*, $|\Psi\rangle$ par $\langle\Psi|$, $\langle\Psi|$ par $|\Psi\rangle$ et A par A^+

et inverser l'ordre des termes.

cherchons le conjugué hermétique de :

$I = \lambda \langle u|A|v\rangle |w\rangle\langle\Psi|$: opérateur

$I^+ = |\Psi\rangle\langle w|\langle v|A^+|u\rangle \lambda^*$

$= \lambda^* \langle v|A^+|u\rangle |\Psi\rangle\langle w|$

4°/ Opérateur hermétique :

• A est un opérateur hermétique si $A = A^+$

cette définition est équivalente à

- $\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^*$
- $\langle \varphi | A | \psi \rangle \in \mathbb{R} \ \forall \ |\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle$

. Si A et B 2 opérateurs hermetiques: on a:

$$(AB)^+ = AB \quad \text{Si} \quad [A,B] = 0$$

Dém: $(AB)^+ = B^+ A^+$

or : $B^+ = B$ et $A^+ = A$ donc $(AB)^+ = BA$

si $[A,B] = 0$ c.à d: $AB - BA = 0 \Rightarrow AB = BA$

d'où: $\boxed{(AB)^+ = AB \quad \text{si} \quad [A,B] = 0}$.

* 5. Base orthonormé:

a: Base orthonormée discrète: si $\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{E}$ se décompose d'une manière unique suivant les $|u_i\rangle$: tel que

$$|\varphi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \text{ alors } \{|u_i\rangle\} \text{ forme une base}$$

. orthonormalité: $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$

. Relation de fermeture: on a: $|\varphi\rangle = \sum c_i |u_i\rangle$ et $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$.

$\Rightarrow \langle u_i | \varphi \rangle = c_i$: composante de $|\varphi\rangle$ suivant le vect $|u_i\rangle$ de base

$\Rightarrow |\varphi\rangle = \sum_i \langle u_i | \varphi \rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \varphi \rangle = \sum_i P_{u_i} |\varphi\rangle$

$\Rightarrow \boxed{\sum P_{u_i} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = I}$: relation de fermeture et qui exprime que $\{|u_i\rangle\}$ est une base

P_{u_i} : projecteur sur l'état $|u_i\rangle$

b: Base continue:

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{E} : |\varphi\rangle = \int c_{(\alpha)} |w_\alpha\rangle \, d\alpha$$

. orthonormalisation $\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$

. Relation de fermeture:

$$|\varphi\rangle = \int c_{(\alpha)} |w_\alpha\rangle \, d\alpha$$

$$c_{(\alpha)} = \langle w_\alpha | \varphi \rangle$$

$$\Rightarrow |\varphi\rangle = \int \langle w_\alpha|\varphi\rangle |w_\alpha\rangle d\alpha = \int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\varphi\rangle d\alpha$$
$$= \left(\int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| d\alpha\right) |\varphi\rangle$$

$\int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| d\alpha = I$ Relation de fermeture (base continue)

6: Représentation dans une base discrète

a: Représentation d'un ket:

$|\varphi\rangle = \sum c_i |u_i\rangle \Rightarrow c_i = \langle u_i|\varphi\rangle$: donc $|\varphi\rangle$ est représenté par $\{c_i\}$ dans la base $\{|u_i\rangle\}$

$$|\varphi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1|\varphi\rangle \\ \langle u_2|\varphi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_n|\varphi\rangle \end{pmatrix}$$ Vect colone

b: Représentation d'un bra:

$$\langle\varphi| = \langle\varphi|I = \langle\varphi|\sum P_{u_i} = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|$$
$$= \sum_i c_i^* \langle u_i|$$

$\langle\varphi| \rightarrow (\langle u_1|\varphi\rangle^*, \langle u_2|\varphi\rangle^*, \dots \langle u_n|\varphi\rangle^*)$: vect ligne

$\rightarrow (c_1^*, c_2^* \dots c_n^*)$

c: Représentation d'un opérateur:

soit un operateur supposé linéaire A

A est donné par les $A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$ qui déterminent l'élement de matrice de A entre $|u_i\rangle$ et $|u_j\rangle$ avec $i = 1, 2, \dots n$ et $j = 1, 2 \dots n$

$$A \longrightarrow A_{ij}: \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & \dots & \dots & A_{2n} \\ \vdots & & & \\ A_{n1} & & & A_{nn} \end{pmatrix}$$ ds la base $\{|u_i\rangle\}$

d: Représentation de l'operateur adjoint:

$$\langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^* \Rightarrow (A^+)_{ij} = A_{ji}^*$$

A^+ est représenté par la matrice $\begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \cdots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & & & A_{n2}^* \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{1n}^* & & & A_{nn}^* \end{pmatrix}$

dans la base $\{|u_i\rangle\}$

si A est hermitique c.a.d $A = A^+$

alors $A_{ij} = A_{ji}^*$

Pour $i = j$: $A_{ii} = A_{ii}^* \Rightarrow A_{ii} \in \mathbb{R}$ $\Big\} \Rightarrow$ symétrie conjugué % à la diagonale Principale

La matrice représentant A est appelé matrice hermitique.

e/ Représentation du transformé d'un ket.

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

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ $\quad |\psi'\rangle = \sum_i c_i' |u_i\rangle$ et $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$

$$c_i' = \langle u_i|\psi'\rangle = \langle u_i|A|\psi\rangle = \langle u_i|A\overbrace{\Big(\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\Big)}^{I}|\psi\rangle$$

$$= \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle \underbrace{\langle u_j|\psi\rangle}_{c_j} = \sum_j (\langle u_i|A|\, c_j|u_j\rangle$$

$$= \langle u_i|A\Big[\sum_j c_j|u_j\rangle$$

$$= \sum_j c_j \langle u_i|A|u_j\rangle \qquad \begin{matrix} i = 1 \cdots n \\ j = 1 \cdots n \end{matrix}$$

$$c_i' = \sum_j c_j A_{ij} \qquad n: \text{dimension de l'espace } \mathcal{E}$$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ c_i' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{i1} & \cdots & A_{in} \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

7: Changement de base

changement de représentation : $\{|u_i\rangle\} \rightarrow \{|t_k\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{et} \quad |\psi\rangle = \sum_k b_k |t_k\rangle$$

$$b_k = \langle t_k|\varphi\rangle = \sum_i \langle t_k|u_i\rangle \underbrace{\langle u_i|\varphi\rangle}_{c_i}$$

$$b_k = \sum_i S_{ki}\, c_i$$

avec $S_{ki} = \langle t_k|u_i\rangle$: élément de matrice $S = (S_{ki})$

$S = (S_{ki})$: matrice de changement de base.

$$b_k = \sum_i S_{ki}\, c_i$$

changement inverse : $\{|t_k\rangle\} \longrightarrow \{|u_i\rangle\}$

- $c_i = \langle u_i|\varphi\rangle = \sum_k \langle u_i|t_k\rangle \underbrace{\langle t_k|\varphi\rangle}_{b_k}$

$\langle u_i|t_k\rangle = S^*_{ki} = S^+_{ik}$: S^+ : matrice conjuguée hermitique de S

donc : $c_i = \sum_k S^*_{ik}\, b_k$

- A opérateur : $A_{k\ell} = \langle t_k|A|t_\ell\rangle$

$$= \sum_{i,j} \underbrace{\langle t_k|u_i\rangle}\, \underbrace{\langle u_i|A|u_j\rangle}\, \underbrace{\langle u_j|t_\ell\rangle}$$

$$= \sum_{ij} S_{ki}\; A_{ij}\; S_{j\ell}$$

8 Représentation dans une base continue.

$\{|w_\alpha\rangle\}$ base continue

$$|\varphi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \downarrow \quad \alpha \text{ variable continue}$$

$$\langle\varphi| \longrightarrow \left(\cdots \langle w_\alpha|\varphi\rangle^* \cdots \right)$$
$$\xrightarrow{\quad\alpha\quad}$$

$$A \longrightarrow \begin{array}{cc} & \xrightarrow{\quad\alpha'\quad} \\ \downarrow \alpha & \begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & A(\alpha,\alpha') & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix} \end{array}$$

IV : Valeurs et vecteurs propres ; Observables.

1°/ Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur

Déf : on dit que $|\Psi\rangle$ est un vecteur propre (V.P) associé à la valeur propre (v.p) a de l'opérateur linéaire A si

$$\underbrace{A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle}_{\text{équation aux valeurs propres}} \quad ; \ a \in \mathbb{R} \text{ ou } a \notin \mathbb{C}$$

↳ équation aux valeurs propres.

on appelle spectre de A, l'ensemble de ses valeurs propres.

- Si $|\Psi\rangle$ est V.P associé à v.p a alors $\lambda|\Psi\rangle$ ($\lambda \in \mathbb{C}$) est aussi V.P associé à a en effet

$$A(\lambda|\Psi\rangle) = \lambda A|\Psi\rangle = \lambda a|\Psi\rangle = a(\lambda|\Psi\rangle)$$

$\Rightarrow$ Les vecteurs propres sont tjs définies à un coefficient multiplicatif près.

- Si la v.p a lui correspond un seul V.P (à un coefficient multiplicatif près) on dit que a est non dégénérée.
- S'il existe un nombre $g \geq 2$ de V.P ($|\Psi^i\rangle$) linéairement indépendant pour une valeur propre a. c.à.d.

$$A|\Psi^i\rangle = a|\Psi^i\rangle \qquad i = 1 \dots g \quad (g \geq 2)$$

on dit que a est dégénérée : g le degré de dégénérescence

- Soit $|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i |\Psi^i\rangle$

$$A|\Psi\rangle = \sum_{i}^{g} c_i A|\Psi^i\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i a|\Psi^i\rangle = a\sum_{i=1}^{g} c_i|\Psi^i\rangle$$

$$= a|\Psi\rangle \quad \forall c_i$$

$\Rightarrow$ $|\Psi\rangle$ est aussi V.P associée à la v.p a

$\mathcal{E}_a^g$: $\{|\Psi^i\rangle, i = 1 .. g\}$ est un sous éspace de $\mathcal{E}$ de dimension g : associé à la v.p a.

. $A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ Par conjugaison hermitique $\langle\Psi|A^+| = a^*|\Psi\rangle$

$\Rightarrow$ le conjugué de a : (a^*) est une v.p de l'adjoint A^+ de A

b : Recherche de v.p et V.P

Soit. $\mathcal{E}$ un espace de dimension N :

. A un opérateur représenté dans une base $\{|u_i\rangle\}$ par une matrice $\mathcal{A}$ d'élément

$A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$ ($\mathcal{A}$ est une matrice N.N)

$|\Psi\rangle$ V.P de A on a :

$A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$

$\Rightarrow \langle u_i|A|\Psi\rangle = a\langle u_i|\Psi\rangle = ac_i$

or : $\langle u_i|A|\Psi\rangle = \langle u_i|AI|\Psi\rangle = \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle$

$= \sum_j A_{ij} c_j$

donc $ac_i = \sum_j A_{ij} c_j \Leftrightarrow \sum_j (A_{ij} - \delta_{ij} a) c_j = 0$

$$= \begin{pmatrix} A_{11}-a & \dots & & A_{1N} \\ A_{21} \dots & A_{22}-a & \dots & A_{2N} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & & & A_{NN}-a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Système de N équation à N inconnues c_j

Il faut que $\det(A - aI) = 0$ { I : matrice identité ; det : déterminant

équation caractéristique

. Les valeurs propres de A sont solutions de l'équation caractéristique qui peut s'écrire d'une façon générale.

$$\sum_{n=1}^{N} q_n a^n = 0$$
$$= (a-a_1)(a-a_2)\cdots(a-a_n) = 0$$
$$= (a-a_1)^{p_1}(a-a_2)^{p_2} \cdots = 0$$

p_1 : degré de multiplicité de la racine a_i (dégénérescence)

supposons que $p_1 = 1$. c.à.d a_1 : racine simple

1 seul V.P pour a_1 : a_1 v.p non dégénérée

soit $\{C_j^1\}$ sont les composante c_j^1 du vecteur propre dans la base $\{|u_i\rangle\}$ sont solution du système d'équation

$$\sum_j (A_{ij} - \delta_{ij}) C_j^1 = 0$$

- Si $A = A^+$ toute les v.p de A sont réelles.
- Si $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$ sont deux V.P de A associe à 2 v.p a et à differentes donc $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$ sont orthogonale c.à.d $\langle\Psi|\Psi'\rangle = 0$ (à condition $A = A^+$)

2: Observables

α Définition : Soit A operateur hermitique dans $\mathcal{E}$ de dimension $\to \infty$

$$A|\Psi_n^i\rangle = a_n|\Psi_n^i\rangle \qquad i = 1 .. \underbrace{g_n}_{}$$

degré de dégénérescence de a_n

l'ensemble $\{|\Psi_n^i\rangle, i = 1 .. g_n\} \to \mathcal{E}^n$ sous espace propre relatif à a_n

Soit $\mathcal{E}^m$ sous espace propre relatif à la v.p a_m avec $a_m \neq a_n$.

$\forall |\Psi_n^i\rangle \in \mathcal{E}^n$ et $\forall |\Psi_m^j\rangle \in \mathcal{E}^m$ on a :

$$\langle\Psi_n^i|\Psi_m^j\rangle = 0 \qquad \forall_{i,j}$$

En choisissant l'ensemble $\{|\Psi_n^i\rangle, i=1..g_n\}$ orthonormé dans chaque sous-espace $\mathcal{E}^n$. c.à.d $\langle\Psi_n^i|\Psi_n^j\rangle = \delta_{ij}\ \forall n$

$$\Rightarrow \langle\Psi_n^i|\Psi_m^j\rangle = \delta_{nm}\delta_{ij}$$

$\{|\Psi_n^i\rangle\} \rightarrow$ système orthonormé de V.P de A.

Donc A est une observabl si $\{|\Psi_n^i\rangle\}$ forme une base dans $\mathcal{E}$ (de dimension infinie). i.e Si

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{g_n} |\Psi_n^i\rangle\langle\Psi_n^i| = I}$$

Remarque importante Si $\mathcal{E}$ est de dimension finie tout opérateur hermitique est une observabl.

3: Ensembl Conplet d'observabl qui Commutent (E.C.O.C)

a: Théorème: Si deux observabl A et B ont des V.P communs et que ceux ci forment une base alors $[A,B]=0$

Dém: $\{|u_{np}\rangle\}$ base formé par les V.P communs à A et B:

$A|u_{np}^i\rangle = a_n|u_{np}^i\rangle$

$B|u_{np}^i\rangle = b_p|u_{np}^i\rangle$

i distinction entre les $\neq$ V.P commun à A et B $|u_{np}\rangle$ associés aux v.p a_n, b_p.

$AB|u_{np}^i\rangle = Ab_p|u_{np}^i\rangle = b_p a_n|u_{np}^i\rangle$

$BA|u_{np}^i\rangle = Ba_n|u_{np}^i\rangle = a_n b_p|u_{np}^i\rangle$

$\Rightarrow [A,B]|u_{np}^i\rangle = 0 \quad \forall i, n, p$

Comme $\{|u_{np}^i\rangle\}$ est une base, $\forall|\Psi\rangle \in \mathcal{E}$: $|\Psi\rangle = \sum_{i,n,p} C_{inp}|u_{np}^i\rangle$.

b / Réciproque :

Le théorème réciproque est vraie, si les observable A et B commutent, alors il existe une base orthonormée formé de V.P communs à A et B

Dém : dans le cas ou les v.p sont non dégénérée.

on a : $[A,B]=0$

soit $\{|\Psi_n\rangle\}$ base orthonormé formé de V.P de A

on a : $AB|\Psi_n\rangle = BA|\Psi_n\rangle = a_n B|\Psi_n\rangle \Rightarrow B|\Psi_n\rangle$ V.P de a avec v.p a_n

Donc $\left.\begin{matrix}|\Psi_n\rangle \\ B|\Psi_n\rangle\end{matrix}\right\}$ V.P de A associe à la v.p a_n qui est non dégénérée.

Ceci n'est possible que si $B|\Psi_n\rangle = \lambda|\Psi_n\rangle$ où $\lambda \in \mathbb{C}$.

C.à d $B|\Psi\rangle$ differe de $|\Psi_n\rangle$ par un coefficient multiplication près. $|\Psi_n\rangle$ est aussi V.P de B $\forall n$

$\Rightarrow$ A et B ont les V.P $|\Psi_n\rangle$ commun

$\Rightarrow \{|\Psi_n\rangle\}$ base constitue de V.P communs à A et B.

C : E.C.O.C : Ensemble Coplet des opservables qui Commutent

- Si toutes les v.p d'une observable A sont non dégénerées. c.à d $\forall a_n$ $g_n = 1$ alors il existe une base unique de V.P de A   A forme un E.C.OC

- A et B : 2 observables

a_n : v.p de A avec $g_n \neq 1$

on peut former une base (mais pas unique) de V.P de A

$B \to$ v.p $b_p \to g_p \neq 1$

si $[A,B]=0 \Rightarrow \{|u_n^i\rangle\} \rightarrow$ base orthonormée formée de V.P commun à A et B

si cette base est unique. c.a.d si $\forall (a_n, b_n)$ $i=1$ (il correspond a un V.P $|u_{np}\rangle$ unique)

$\Rightarrow \{A,B\} \rightarrow$ E.C.O.C

généralisation :

Un ensemble d'observable A.B.C ... forme un E.C.O.C s'il existe une et une seule base orthonormée de V.P communs c.à.d à chaque ensemble de v.p $(a_n, b_p, c_q \dots)$ correspond un V.P unique $|u_{npq\dots}\rangle$.

V. Exemples de representation :

L'état d'une particule est décrite par $\underbrace{\Psi(\vec{r}) \in F}$ $\longmapsto$ $\underbrace{|\Psi\rangle \in \mathcal{E}}$

Espace des fonction d'onde — Espace des états (notation de Dirac)

1 Representation $\{|x\rangle\}$:

à une dimension : $\forall\ \Psi(x) \in F$ on peut écrire

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x_0)\ \delta(x-x_0)\, dx_0$$

avec $\sigma_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$: fct de Dirac centrée en x_0

nous avons vu que $\sigma_{x_0}(x)$ $\rightarrow \notin \mathcal{L}^2$; $\rightarrow$ dépend de l'indice x_0

$$\Rightarrow \Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x_0)\ \sigma_{x_0}(x)\, dx$$

$\Psi(x)$ peut se développer d'une manière unique suivant les $\delta_{x_0}(x)$

$\{\delta_{x_0}(x)\} \rightarrow$ base continue (des fcts réelles)

$$\Psi(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)\, \delta(x_0 - x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)\, \delta^*_{x_0}(x)\, dx = (\delta_{x_0}, \Psi)$$

$\hookrightarrow$ composante de $\Psi(x)$ suivant la fonction de base $\xi_{x_0}(x)$

* Dans l'espace des états (Notation de Dirac) on associe

$$\delta_{x_0}(x) \longmapsto |x_0\rangle \quad \text{(Ket)}$$

- $\langle x'_0 | x_0 \rangle = \int \delta^*_{x'_0}(x)\, \delta_{x_0}(x)\, dx = \int \delta(x - x'_0)\, \delta(x - x_0)\, dx$

$= \delta(x' - x_0) \rightarrow$ relation d'orthonormalisation

- $\int |x_0\rangle\langle x_0|\, dx_0 = I$ relation de fermeture.

Soit $|\Psi\rangle$ Ket représentant l'état d'une particule en mouvement le long de $\vec{Ox}$

$$|\Psi\rangle = \int |x_0\rangle\langle x_0|\Psi\rangle\, dx_0$$

La composante de $|\Psi\rangle$ dans la base $\{|x_0\rangle\}$

$$\langle x_0|\Psi\rangle = \int \delta^*_{x_0}(x)\, \Psi(x)\, dx = \int \delta(x - x_0)\, \Psi(x)\, dx$$

$= \Psi(x_0) \rightarrow$ la valeur de la fct d'onde au pt x_0

l'indice o de $|x_0\rangle$ est superflu

donc en représentation $\{|x\rangle\}$ on a:

$$\begin{cases} \langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \\ \int |x\rangle\langle x|\, dx = I \\ \langle x|\Psi\rangle = \Psi(x) \end{cases}$$

Produit scalaire :

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

on retrouve le fait que le produit scalaire de deux kets est identique à celui des fonctions correspondantes dans F.

. Soit A un operateur.

A est représenté dans la base $|x\rangle$ par une matrice continue c.à.d par une fonction de x et de x'

$$A_{(x,x')} = \langle x | A | x' \rangle$$

. Soit $|\varphi\rangle = A |\psi\rangle$

on a : $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle = \langle x | A \int |x'\rangle\langle x'| \psi \rangle \, dx'$

$$= \int \langle x | A | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \, dx'$$
$$= \int A_{(x,x')} \psi(x') \, dx'$$

• Opérateur position X

Soit $|\psi\rangle \longrightarrow \psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

L'operateur position X est définie par $X |\psi\rangle = |\psi'\rangle$

$$\longmapsto \psi'(x) = \langle x | \psi' \rangle \quad \text{tel que} \quad \psi'(x) = x \, \psi(x)$$

X operateur multiplication par x en representation $\{|x\rangle\}$

cette définition est équivalente à

$$\boxed{\langle x | X | \psi \rangle = \langle x | \psi' \rangle = x \langle x | \psi \rangle}$$

X : operateur hermitique.

2 : Representation $\{|p\rangle\}$:

Nous avons vu que les fcts d'ondes $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$

forme une base dans F

on associe à $v_p(x) \longmapsto$ le ket $|p\rangle \Rightarrow \{|p\rangle\}$ base dans $\mathcal{E}$

- relation d'orthonormalisation $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$.

$$\equiv \left(\int_{-\infty}^{+\infty} v_p^*(x) . v_{p'}(x) dx \right.$$

- relation de fermeture. $\int |p\rangle\langle p| dp = I$

- Composante de $|\Psi\rangle$ sur le vecteur $|p\rangle$

$$\langle p|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} v_p^*(x)\, \Psi(x) dx = \bar{\Psi}(p)$$

Donc un ket $|\Psi\rangle$ est représenté par $\langle p|\Psi\rangle = \bar{\Psi}(p)$

dans la base $\{|p\rangle\}$

$$\langle p|\Psi\rangle = \int \underbrace{\langle p|x\rangle}_{\langle x|p\rangle^*} \underbrace{\langle x|\Psi\rangle}_{\Psi(x)} dx$$

par identification $\langle x|p\rangle = v_p(x)$

$\Rightarrow$ les kets $|p\rangle$ sont représenté dans $\{|x\rangle\}$ par

$$\langle x|p\rangle = v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

- Le produit scalaire

$$\langle \varphi|\Psi\rangle = \int \langle \varphi|p\rangle\langle p|\Psi\rangle dp$$
$$= \int \bar{\varphi}^*(p)\; \bar{\Psi}(p)\, dp$$

- Opérateur : A un opérateur $A_{(p,p')} = \langle p|A|p'\rangle$

supposons $A_{(x,x')}$ connu on cherche $A_{(p,p')}$

$$A_{(p,p')} = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\langle p|x\rangle}_{v^*_p(x)} \langle x|A|x'\rangle \underbrace{\langle x'|p'\rangle}_{v^*_{p'}(x')} \, dx\, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} v^*_{p(x)} \, A_{(x,x')} \, v_{p'(x')} \, dx\, dx'$$

• Operateur P : défini par $\langle p|P|\Psi\rangle = p\langle p|\Psi\rangle$

action de P en representation $\{|x\rangle\}$

$$\langle x|P|\Psi\rangle = \int \langle x|p\rangle\langle p|P|\Psi\rangle \, dp = \int v_p(x)\, p\, \bar{\Psi}(p)\, dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{i\frac{px}{\hbar}}\, p\, \bar{\Psi}(p)\, dp$$

Propriété de la transformé de Fourier :

$$T.F\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^n \Psi(x)\right] = \left(\frac{i}{\hbar}p\right)^p \bar{\Psi}(p)$$

pour $n = 1$:

$$p\,\bar{\Psi}(p) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Psi(x)$$

donc $\langle x|P|\Psi\rangle = i\hbar \dfrac{d\Psi(x)}{dx} = i\hbar \dfrac{d}{dx}\langle x|\Psi\rangle$

d'où : $P \longrightarrow$ multiplication par p en representation $\{|p\rangle\}$

$\quad\;\; \longrightarrow i\hbar\dfrac{d}{dx}$ en representation $\{|x\rangle\}$

ma $[x, P_x] = i\hbar$

* P est hermitique

les Kets $|p\rangle$ sont V.P de P avec la v.p : $\underline{\underline{p}}$