Meca Quantique 2021 Résume

Adrien the lover & Léo the Crapito

June 30, 2021

Contents

1 Etat systèmes quantiques

1.1 Généralités

1. Théorème spectral : Soit $A = A^\star \in End(\mathcal{H})$ un opérateur auto-adjoint, $dim(\mathcal{H}) = n$, alors $\exists \lambda_1 > .. > \lambda_n$ les valeurs propres de A et $\exists P_1, .., P_n$ des projections orthogonales telles que :
   (a) $P_i P_j = 0 \ \forall i \neq j$
   (b) $\sum\limits_{i=1}^{n} P_i = Id$
   (c) $A = \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i P_i$
2. On a dans le cas particulier où $A = P$ est une projection orthogonale que $\lambda_i = 0, 1 \ \forall i$ et on peut décomposer $A = 1 \cdot P + 0 \cdot (Id - P)$
3. (check ac qqn) L'ensemble des états d'un système quantique est donné par $\mathcal{E} = \{E \in End(\mathcal{H}) |\, E = E^\star,\, \lambda_1 > .. > \lambda_n,\, Tr(E) = 1\}$
4. E est un état pur $\Longleftrightarrow Tr(E^2) = 1 \Longleftrightarrow$ ses valeurs propres $\lambda_i = 0, 1$ (rajouter des propriétés??)
5. Considérons $\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$ un vecteur décrivant un état pur, alors sa matrice orthogonale associée est donnée par : $P_\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \overline{\begin{pmatrix} \phi_1 & \phi_2 \end{pmatrix}}^T$
6. On définit une loi de probabilité en mécanique avec les définitions suivantes : soit $\{\lambda_1, .., \lambda_n\}$ les val. propres de E (à check)
   (a) La probabilité de trouver un système décrit par un état E dans un état pur décrit par ϕ est donné par : $p_i = Tr(EP_i)$ où P_i correspond à la i-ème projection ortho dans la décomposition de $A = \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i P_i$ et dans le cas où A proj. orthog. on a $A = 1 \cdot P_\phi + 0 \cdot (Id - P_\phi)$
   (b) La moyenne de la distribution : $\overline{A_E} = \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i p_i = Tr(EA)$
   (c) la variance : $Var_E(A) = \sum\limits_{i=1}^{n} (\lambda_i - \overline{A_E})^2 p_i = Tr(E(A - \overline{A_E})^2)$
   (d) l'écart-type : $\sigma_E(A) = \sqrt{Var_E(A)}$
7. Construction opérateur auto-adjoints : soit $A, B \in \mathcal{O} = \{A \in End(\mathcal{H}) |\, A = A^\star\}$, alors $C = \frac{1}{i}[A, B] = \frac{1}{2}(AB - BA)$ est auto-adjoint.
8. Principe d'incertitude de Heisenberg : Soit $E \in \mathcal{E}$ l'état d'un système quantique, $A, B \in \mathcal{O}$, $C = \frac{1}{i}[A, B]$, alors :
$$\sigma_E^2(A)\sigma_E^2(B) \geq \frac{1}{4}\overline{C_E}^2$$

1.2 Cas des particules de spin $\frac{1}{2}$

Soit $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, $(x, y) = \overline{x_1}y_1 + \overline{x_2}y_2$ à continuer si les reins mais pas indispensable

1.2.1 Matrices de Pauli

Les matrices de Pauli sont données par les éléments suivants :

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De plus, elles ont les propriétés suivantes :

$$\sigma_i^2 = Id,\ \sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3,\ \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2,\ \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1,\ \sigma_j\sigma_i = -\sigma_i\sigma_j\ \forall i \neq j$$

1.3 Evolution quantique

L'hamiltonien d'un système quantique $H \in \mathcal{O}$ est l'observable qui correspond à l'énergie, c'est par définition un opérateur auto-adjoint.

Definition 1. Evolution du système

L'opérateur d'évolution du système est donné par :

$$U(t) = e^{-\frac{i}{h}Ht}$$

Definition 2. Equation de Schrödinger
Soit $\phi \in \mathcal{H}$, $(\phi, \phi) = 1$ et $H \in \mathcal{O}$ l'hamiltonien, l'équation est donnée par :

$$ih\frac{\partial\phi}{\partial t} = H\phi \text{ et la cond init } \phi(0) = \phi_0$$

On a les propriétés suivantes :

1. $\|\phi(0)\|^2 = 1 \Rightarrow \|\phi(t)\|^2 = 1$
2. La solution générale de l'équation est donnée par :

$$\phi(t) = U(t)\phi(0)$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, on peut utiliser la solution générale, cependant, il faut ensuite calculer $e^{-\frac{i}{h}Ht}$ avec le thm 24 de réelle 2ème semestre par exemple.

Une autre méthode pour résoudre cette équation est de calculer les vecteurs propres normalisés, ie on calcule les vecteurs propres et on les divise par leur norme.

Proposition 3. $\frac{da}{dt}$
Soit $A \in \mathcal{O}$, considérons $a(t) = \overline{A}_{\phi(t)} = (\phi(t), A\phi(t))$, alors :

$$\frac{da}{dt} = \frac{i}{h}(\phi(t), [H, A]\phi(t)) \text{ où } [H, A] = HA - AH$$

Definition 4. Quantité conservée

On dit que $A \in \mathcal{O}$ est une quantité conservée si $[H, A] = 0$. (Ceci implique que $\dfrac{da}{dt} = 0 \, \forall \phi$)

Proposition 5. *solution Schrödinger*

Si ϕ est une solution de l'équation de Schrödinger, alors :

1. $\dfrac{\partial}{\partial t} P_{\phi(t)} = \dfrac{1}{ih}[H, P_\phi]$
2. $P_{\phi(t)} = U(t) P_{\phi(0)} U(t)^{-1}$

Definition 6. équation de Schrödinger pour les états quantiques

$\dfrac{\partial E}{\partial t} = \dfrac{1}{i\hbar}[H, E]$ et $E(t) = U(t)E(0)U(t)^{-1}$

1.4 Produit tensoriel de matrices

Soit $A = (a_{ij}), B$ deux matrices alors, leur produit tensoriel est donné par : $A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{21}B & .. & a_{n1}B \\ . & & & \\ a_{1m}B & & & a_{nm}B \end{pmatrix}$

1.5 Symétries d'un système quantique

Definition 7. Symétrie

On dit que $S \in End(\mathcal{H})$ est une symétrie si :

- $SS^\star = S^\star S = Id$, S est dit unitaire.
- $SU(t) = U(t)S \ \forall t$

$\Longrightarrow \phi_0 \in \mathcal{H}$ est un état pur...

Soit $\{e_1, .., e_n\}$ une base de vecteurs propres de H avec $He_i = E_i e_i$, on a : $U(t)_{ij} = \delta_{ij} exp(-\frac{i}{\hbar} E_i t)$

Proposition 8. *Symétrie*

S est une symétrie $\Longleftrightarrow$ S est unitaire et $S_{ij} = 0$ si $E_i \neq E_j$ où

Definition 9. Groupe de symétries

Le groupe de symétries est donné par :

$$\mathcal{S}(H) := \{S \in End(H); S \text{ est une symétrie }\}$$

C'est un groupe avec les éléments suivants :

1. l'élément neutre I
2. le produit $(S_1, S_2) \mapsto S_1 S_2$
3. l'inverse $S \mapsto S^{-1}$

Definition 10. $U(n)$

- $U(n) = \{S \in End(\mathbb{C}^n); S \text{ est unitaire}\}$
- $U(1) = \{z \in \mathbb{C}; |z| = 1\} \approx \mathbb{S}^1$
- $\mathcal{S}(H) = \{\begin{pmatrix} S_1 & & 0 \\ & S_2 & \\ 0 & & . \end{pmatrix}; S_i \text{ est unitaire}\}$

1.6 Quantités conservées

Proposition 11. $[H, A] = 0$

Soit $A \in \mathcal{O}$, alors pour tout état pur $\frac{d}{dt}\overline{A}_{\phi(t)} = 0 \Longleftrightarrow [H, A] = 0$ ie A est une quantité conservée.

Theorem 12. *Quantité conservée et symétrie*

Soit $A \in \mathcal{O}$une quantité conservée, alors $S = e^{isA}, s \in \mathbb{R}$, est une symétrie.

De plus, on a que $\{e^{isA}; s \in \mathbb{R}\}$ est un groupe avec : $S(0) = I$; $S(s_1)S(s_2) = S(s_1+s_2)$; $S(s)^{-1} = S(s)$

Definition 13. $\mathcal{C}_H$

$\mathcal{C}_H = \{A \in \mathcal{O}; A \text{ est une quantité conservée}\}$ De plus, c'est une algèbre de Lie par rapoort au crochet $\frac{1}{i}[A, B]$

Definition 14. Système intégrable

On dit que $(H, A_1, ..A_k)$ avec $A_i \in \mathcal{O}$, est un système intégrable si :

$$[H, A_i] = 0 \ \ \forall i \text{ et si } [A_i, A_j] = 0 \ \forall i, j$$

Definition 15. $\mathcal{S}(H, A_1, .., A_k)$

$\mathcal{S}(H, A_1, .., A_k) = \{S \in End(\mathcal{H}); SS^\star = S^\star S = I; SU(t) = U(t)S \Leftrightarrow SH = HS; Se^{isA_i} = e^{isA_i}S \Leftrightarrow SA_i = A_iS \ \forall i\}$

Definition 16. Complétement intégrable

On dit que $(H, A_1, .., A_k)$ est complétement intégrable si $\mathcal{S}(H, A_1, .., A_k) \cong U(1) \times ... \times U(1)$ k fois.

2 Théorie avec dimension infinie

2.1 Propriétés Sympatiques

- $\sum_{i=1}^{\infty} \left|(e_i, \psi)\right|^2 \leq \|\psi\|^2$
- $\sum_{i=1}^{\infty} \left|(e_i, \psi)\right|^2 = \|\psi\|^2 \iff \sum_{i=1}^{\infty}(e_i, \psi)e_i \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \psi$
- Perseval: $\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int_0^{2\pi} |\psi(x)|^2 \ dx = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |(e_n, \psi)|^2 \implies \{e_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ est une base hilbertienne.

- L'intégrale Gaussienne: $\Re(a) > 0,\ \Re(\sqrt(a)) > 0$

$$\int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{1}{2}ap^2 + bp\right)\ dp = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left(\frac{1}{2}\frac{b^2}{a}\right)$$

2.2 Opérateurs bornés

2.2.1 Def: Opérateur borné

Un opérateur $A:\ \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ est borné s'il existe $C > 0$ tel que

$$\|A\psi\| \leq C\|\psi\| \qquad \forall\psi \in \mathcal{H}$$

2.2.2 Def: Norme d'un opérateur

$$\|A\| = \sup_{\psi\neq 0} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|} = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\|$$

Adjoint Si A est un opérateur borné alors il exist un unique adjoint tel que:

$$(\varphi, A\psi) = (A^*\varphi, \psi) \qquad \forall\varphi, \psi \in \mathcal{H}$$

2.2.3 Lexique:

- $A = A^* \implies A$ est auto-adjoint
- $AA^* = A^*A = I \implies A$ est unitaire

2.3 Opérateurs non-bornés

2.3.1 Def: Symétrique

$A:\ D(A) \to \mathcal{H}$ est symétrique si $(A\varphi, \psi) = (\varphi, A\psi) \qquad \forall\varphi, \psi \in D(A)$. Notons que $D(A)$ varie un peu comme on veut. Un opérateur peut être symétrique sur un domaine mais par sur un autre.

2.3.2 Def: Extension

On dit que $B:\ D(B) \to \mathcal{H}$ est une extension de A si:

1. $D(A) \subset D(B)$
2. $B\psi = A\psi \qquad \forall\psi \in D(A)$

2.3.3 Opérateur Adjoint

Soit $A:\ D(A) \to \mathcal{H}$ un opérateur.

$$D(A^*) = \{\varphi \in \mathcal{H} \mid \ell\ :\ \psi \mapsto (\varphi, A\psi) \text{ est forme lin. bornée sur } D(A)\}$$

L'idée ici c'est que si $D(A)$ est dense, alors ℓ admet une unique extension sur $\mathcal{H}$. Par Riesz il existe un unique vecteur $\chi \in \mathcal{H}$ tel que:

$$(\varphi, A\psi) = (\chi, \psi)$$

On pose ensuite: $A^*\varphi = \chi$

2.3.4 Prop: Extension d'opérateur

Soit $A: D(A) \to \mathcal{H}$ un opérateur symétrique. Alors A^* est une extension de A. Ce qui implique:

1. $D(A) \subset D(A^*)$
2. $A^*\psi = A\psi \qquad \forall \psi \in D(A)$

2.3.5 Def: Auto-adjoint

On dit que $A: D(A) \to \mathcal{H}$ est auto-adjoint si:

1. A est symétrique
2. $D(A^*) = D(A)$

2.4 Le Spectre

2.4.1 Def: Résolvant

Soit $A: D(A) \to \mathcal{H}$ une opérateur. L'ensemble résolvant $\rho(A)$ est définit comme l'ensemble: $\Big\{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists B: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ borné tel que:

- $\text{im}(B) \subset D(A),\ (A - \lambda I)B\psi = \psi \qquad \forall \psi \in \mathcal{H}$
- $B(A - \lambda I)\psi = \psi \qquad \forall \psi \in D(A) \qquad \Big\}$

Le Spectre: Le spectre de A est défini comme le complémentaire du résolvant: $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$

2.4.2 Prop: Valeur propre

Si λ est une valeur propre de A, alors $\lambda \in \sigma(A)$

Faits:

- $\rho(A)$ est ouvert et $\sigma(A)$ est fermé.
- Si A est auto-adoint alors $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$

2.5 L'intégrale de Riemann-Stieltjes

2.5.1 Mesure de proba

On prend $\mu: \mathcal{A} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ une mesure de probabilité. ($\mathcal{A}$ est la σ algèbre borélienne de $\mathbb{R}$) On notera $\mu(\lambda) := \mu\big((-\infty, \lambda)\big)$ et on défini le support de μ:

$$\text{supp}(\mu) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \mu(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) > 0 \qquad \forall \varepsilon > 0\}$$

2.5.2 Def: Integrale de Riemann-Stieltjes

On prend $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continue et bornée:

$$\int_{\mathbb{R}} f \, d\mu = \lim_{R\to\infty} \left(\lim_{\delta\to 0} \sum_i f(\lambda_i) \, \mu\big([\lambda_i, \lambda_{i+1})\big) \right)$$

Où R est l'intervale d'intégration: $[-R, R]$ et $\delta = \max |\lambda_{i+1} - \lambda_i|$

2.5.3 Def: Mesure dans les projections

On dit que $P : \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ($\mathcal{B}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs bornés) est une mesure à valeurs dans l'ensemble des projections orthogonales si:

1. $P(\varnothing) = 0, \; P(\mathbb{R}) = I$
2. $P(E)^2 = P(E), \; P(E)^* = P(E) \qquad \forall E \in \mathcal{A}$
3. $E_1 \cap E_2 = \varnothing, \; E = E_1 \cup E_2 \implies P(E) = P(E_1) + P(E_2)$
4. $E_i \cap E_j = \varnothing \quad i \neq j, \; E = \bigsqcup_{n=1}^{\infty} E_n \implies \sum_{n=1}^{N} P(E_n) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} P(E)$

Passer à une mesure de Proba: En prenant une mesure $P : \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$ avec les hypothèse d'avant et soit $\psi \in \mathcal{H}$ tel que $\|\psi\| = 1$. Alors:

$$\mu_\psi(E) = \big(\psi, \; p(E)\psi\big)$$

Est une mesure de probabilité sur $\mathbb{R}$.

2.6 Le théorème spectral

(1) Soit $P : \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$ est une mesure telle que voir au dessus.
Posons $D(A) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 \, d\mu_\psi < +\infty\} \qquad (\star)$.
Alors $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dP(\lambda) = \lim_{R\to\infty} \left(\lim_{\delta\to 0} \sum_i \lambda_i \, P\big([\lambda_i, \lambda_{i+1})\big) \right) \qquad (\star\star)$ est un opérateur auto-adjoint.

(2) Soit $A : D(A) \to \mathcal{H}$ un opérateur auto-ajoint. Alors, il existe une mesure telle que cf. au dessus $P : \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$ telle que $(\star)$ et $(\star\star)$ sont vérifiées.

(3) $\lambda \in \sigma(A)$ si et seulement si

$$P\big((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)\big) \neq 0 \qquad \forall \varepsilon > 0$$

Notons que ça implique que: $\|A\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 \, d\mu_\psi$

2.7 Calcul fonctionnel

Posons ici $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continue. Le nouveau domaine est défini comme:

$$D(f(A)) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 \, d\mu_\psi < +\infty\}$$

Et $f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) \, dP(\lambda)$ est un opérateur $f(A): D(f(A)) \to \mathcal{H}$

- $f(A)^* = \bar{f}(A) \implies \bar{f} = f \implies f(A)$ auto-adjoint.
- Si f est bornée sur $\delta(A) \implies f(A)$ est aussi borné.
- f, g bornées alors $(fg)(A) = f(A)g(A)$.

2.8 La matrice fondamentale, 'fin je sais pas vraiment comment elle s'appelle

$f_s(\lambda) = \exp(i \cdot s\lambda) \quad s \in \mathbb{R}, U(s) = \exp(i \cdot sA)$

- $U(s)$ est borné pour tout s.
- $U(s_1)U(s_2) = U(s_1 + s_2)$.
- $U(0) = I$.
- $U(s)^* = U(-s) = U(s)^{-1} \implies U(s)$ est unitaire!!!!!!!!!!!!

2.9 Applications en Méca Quantique

Soit $H: D(H) \to \mathcal{H}$ l'hamiltonien du système. L'opérteur d'évolution du système est:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \; : \; \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

Prenons un opérateur auto-adjoint qui représentera l'observable: $A: D(A) \to \mathcal{H}$. Un vecteur $\psi \in \mathcal{H}$ avec $\|\psi\| = 1$ (notre état pur) et une mesure de proba satisfaisant les hypothèses voulues: $P: \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Ça induit une mesure de probabilité sur $\mathbb{R}$: $\mu_\psi(E) = (\psi, \; P(E)\psi)$.

Alors avec l'interprétation de Copenhague $\mu_\psi(E) =$ la probabilité de mesurer l'observable A dans l'ensemble E.

2.10 Sur les systèmes quantiques

2.10.1 Thm

$d = 1, 2, 3$, le potentiel de la forme: $V = V_1 + V_2 + V_3 \; : \; \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ où:

- $V_1(x)$ est bornée.
- $V_2 \in L^2(\mathbb{R}^2)$.

- $V_3 \geq 0,\ V_3 \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ (C'est à dire L^2 sur tous les compacts de $\mathbb{R}^d$)

Alors l'opérateur: $H:\ C^2_{\text{comp}}(\mathbb{R}^d) \to L^2(\mathbb{R}^d)$ défini par:

$$H\psi = -\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi(x)$$

admet une unique extension auto-adjointe. On dit que H est essentiellement auto-adjoint.

2.10.2 Prop: Opérateur Auto-adjoint

Soit $A:\ D(A) \to \mathcal{H}$ un opérateur auto-adjoint. Alors les énoncés suivants sont équivalents:

1. $\sigma(A) \subset [\lambda_0, +\infty)$
2. $(\psi, A\psi) \geq \lambda_0(\psi,\psi) \qquad \forall\psi \in D(A)$

2.10.3 Prop: Convergence sur opérateur auto-adjoint

Soit $A:\ D(A) \to \mathcal{H}$ un opérateur auto-adjoint. Alors $\lambda_0 \in \sigma(A)$ si et seulement s'il existe $\{0 \neq \psi_n\}_{n=1}^{\infty} \subset D(A)$ telle que

$$\frac{\|(A-\lambda_0 I)\psi_n\|}{\|\psi_n\|} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

Remarque: $A\psi = \lambda_0\psi$, on pose alors $\psi_n = \psi \qquad \forall n$.

3 Contexte: Oscillateur harmonique

Rappel: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ et $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{kq^2}{2}$.

On peut définir les opérateurs $a, a^*:\ C^\infty(\mathbb{R}) \to C^\infty(R)$:

$$\begin{aligned}
a &= -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx} - i\sqrt{\frac{k}{2\hbar\omega}}x \\
a^* &= -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx} + i\sqrt{\frac{k}{2\hbar\omega}}x \\
\omega &= \frac{\sqrt{k}}{m}
\end{aligned}$$

Alors ils ont certaines propriétés:

- $[a, a^*] = I$
- $[a^*a, a] = -a$
- $[a^*a, a^*] = a^*$
- $H = \hbar\omega\left(a^*a + \dfrac{1}{2}\right)$

De plus l'équa diff $a\psi = 0$ possède une unique solution ψ_0 (à cst près) et

$$\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}) \qquad H\psi_0 = E_0\psi_0 \quad \text{où} \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

De plus: $\psi_n := (a^*)^n \psi_0$, alors:

- $\psi_n \in L^2(\mathbb{R})$
- $(\psi_n, \psi_n) = n!(\psi_0, \psi_0)$
- $H\psi_n = E_n\psi_n$ où $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

3.1 New domaine de fonction

Dans cette section un peu bizarre on introduit le domaine des fonction découpée en deux, i.e., plus mathématiquement:

$$D_\alpha(H) = \{(\psi_-, \psi_+) \mid \psi_+ \in C^\infty_{\text{comp}}([0, +\infty)), \psi_- \in C^\infty_{\text{comp}}((-\infty, 0]), \psi_+(0) = \psi_-(0), \psi'_+(0) - \psi'_-(0) = \alpha\psi(0)\}$$

Pro tips pour dériver ces fonctions biscornues:

$$\frac{d}{dx}\psi'(x) = \psi''(x)_{\text{reg}} + (\psi'_+(0) - \psi'_-(0))\delta(x)$$

En gros dériver chill sauf en 0 où il y a discontinuité.

4 Intégrale de chemin en MQ

But : Reformuler la mécanique quantique avec les outils de mécanique classique

4.1 Rappels: Mécanique Lagrangienne et principe de moindre action

Considérons $\overrightarrow{q} = (q_1, .., q_n) \in \mathbb{R}^n$ des coordonnées généralisées et $\overrightarrow{v} = (v_1, .., v_n) \in \mathbb{R}^n$ des vitesses généralisées. Rappelons que le Lagrangien est une fonction lisse donnée par :

$$L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R} \text{ et } L(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{v}, t) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n m_i \overrightarrow{v_i}^2 - V(q)$$

V est le potentiel et $T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n m_i \overrightarrow{v_i}^2$ est l'énergie cinétique.

Nota bene : on peut facilement passer du Lagrangien à l'Hamiltonien et vice versa :

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L(\overrightarrow{q}, \dot{\overrightarrow{q}}, t)$$

On a de plus les relations suivantes :

- $\frac{dq}{dt} = \dot{q} = v$
- $p = mv = \frac{\partial L}{\partial v}$

Définition (fonctionnel d'action)

Soit $\mathcal{P} = P_{\overrightarrow{q_0},t_0}^{\overrightarrow{q_f},t_f} = \{\overrightarrow{q} : [t_0, t_f] \to \mathbb{R}^n : \overrightarrow{q}(t_0) = \overrightarrow{q_0},\ \overrightarrow{q}(t_f) = \overrightarrow{q_f}\}$ l'espace des chemins lisses de $\overrightarrow{q_0}$ à $\overrightarrow{q_f}$, on définit le fonctionnel d'action $S : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ par :

$$\int_{t_0}^{t_f} L(\overrightarrow{q}(t), \overrightarrow{d_t q(t)}, t) dt$$

Afin de pouvoir résoudre cette intégrale il faut trouver ce que vaut $q(t)$ explicitement. Pour cela, utilisons les équations d'Hamilton-Jacobi/Lagrange :

Théorème (équations de Lagrange)

Une trajectoire $\overrightarrow{q}(t)$ est un extremum du fonctionnel d'action ssi elle satisfait les équations de Lagrange :

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = 0$$

5 Notation physique bra ket à mine

5.1 Généralités et propriétés élémentaires

Rappel : $\rho, \psi \in \mathcal{H}$, pour $(.,.)$ un produit intérieur on a pour $\lambda \in \mathbb{C}$, $(\lambda\rho, \psi) = \lambda^\star(\rho, \psi)$ et $(\rho, \lambda\psi) = \lambda(\rho, \psi)$. On a $\mathcal{H}^\star \approx \mathcal{H}$ et $\phi \in \mathcal{H}^\star \to \hat{\phi}$. Ceci amène à la notation $\phi(\psi) = (\hat{\phi}, \psi)$

Considérons maintenant les notations de Dirac. Soit $\psi \in \mathcal{H}$ et $\phi \in \mathcal{H}^\star$, on a :

1. $|\psi >$ dit "ket", l'état de l'espace de Hilbert
2. $< \phi|$ dit "bra", l'état dual
3. $\phi(\psi) :=< \phi|\psi >$ le produit intérieur

5.1.1 Propriétés fondamentales

Pas oublier : si $A \in \mathcal{O}$, alors A est autoadjoint.

1. $< \phi|\psi >= \int_E dx\, \phi^\star \psi$
2. $< A|^\star = |A >$
3. $< \phi|A|\psi >=< \phi|\, A\psi >=< A^\star\phi|\psi >$ et donc si A est autoadjoint on a : $< \phi|\, A\psi >=< A\phi|\psi >$
4. $< \phi|\,(c_1|\psi_1 > +c_2|\psi_2 >) = c_1 < \phi|\psi_1 > +c_2 < \phi|\psi_2 >$
5. idem dans l'autre sens : $(c_1 < \phi_1| + c_2 < \phi_2|)|\psi >= c_1 < \phi_1|\psi > +c_2 < \phi_2|\psi >$
6. On a que la moyenne d'un opérateur sur un état est donné par : $< A >_\phi = \overline{A} =< \phi|A|\phi >$ et on en déduit que $\sigma_\phi(A) =< A^2 >_\phi - < A >_\phi^2$

5.1.2 Opérateurs principaux

De plus, on a aussi les états propres généralisés suivants :

1. l'opérateur de position $|q> \dashrightarrow \delta(x-q) \notin L^2(\mathbb{R})$ qui vaut 0 sauf en 0. On a que $f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0)$
2. l'opérateur d'impulsion $<p| \dashrightarrow \psi_p(x) = \dfrac{e^{ipx/h}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ qui représente graphiquement une onde plate.

La notation de Dirac sur ces opérateurs nous donne :

1. $\psi(q) =< q|\psi >= (\delta(x-q), \psi(x)) = \int_{\mathbb{R}} \psi(x)\delta(x-q)dx$
2. $\hat{\psi}(p) =< p|\psi >= \int_{\mathbb{R}} \dfrac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x)dx$

Définissons quelques opérateurs généraux :

1. $|q >< q|\,(|\psi >) = |q >< q|\psi >= \psi(q)|q >$ est un opérateur pour la position.
2. $\mathbf{1} = \int_{\mathbb{R}} dq\,|q >< q|$ est l'opérateur de résolution de l'identité pour la position. Il nous permet de voir directement que $< \phi|q >=< q|\phi >^\star = \phi^\star(q)$.
3. $\mathbf{1} = \int_{\mathbb{R}} dp\,|p >< p|$ est l'opérateurde résolution de l'identité pour l'impulsion.
4. $< p|q >=< q|p >^\star = \dfrac{e^{-ipq/h}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$
5. Soit $\hat{\mathcal{O}}$ un opérateur sur $\mathcal{H}$, posons $|\psi >= |q >, |\phi >= |q' >$, alors $\mathcal{O}(q', q) :=< q'|\hat{\mathcal{O}}|q >$ est *le noyau intégral* de $\hat{\mathcal{O}}$. Et on a que :
   (a) $\hat{\mathcal{O}}|\psi >$ est un état
   (b) $< q|\hat{\mathcal{O}}|\psi >= \int_{\mathbb{R}} dq'\,\mathcal{O}(q', q)\psi(q')$ est la fonction d'onde associée à $|\psi >$

6 Propagateur en mécanique quantique

6.0.1 Construction de l'opérateur d'évolution

En Méca quantique, on a que l'évolution dans le temps est contrôlée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t) >= \hat{H}|\psi(t) > \ \text{(en notation de Dirac)}$$

Pour résoudre cette équation, on va essayer de l'intégrer afin de pouvoir connecter l'état initial et final au temps t. On veut avoir un opérateur $\mathcal{U}$, dit l'opérateur d'évolution, qui satisfait :

$$|\psi(t) >= \mathcal{U}|\psi(0) >$$

Et on a que connaître $\mathcal{U}(t)$ est équivalent à résoudre l'évolution temporelle.

Introduisons cela dans l'équation de Schrödinger pour trouver :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{U}(t)|\psi(0)>= \hat{H}\,\mathcal{U}(t)|\psi(0)> \Longleftrightarrow i\hbar\frac{d\mathcal{U}}{dt}|\psi(0)>= \hat{H}\,\mathcal{U}|\psi(0)>$$

Et vu que $|\psi(0)>$ est arbitraire, on a :

$$i\hbar\frac{d\mathcal{U}}{dt} = \hat{H}\mathcal{U}$$

Cette edo est facilement résoluble et on trouve : ...

$$\mathcal{U}(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H})$$

La difficulté consiste en calculer l'exponentielle de ce bordel. (cf Wiki et Réelle)

6.0.2 Noyau intégral de l'opérateur d'évolution et propriétés

1. $K(q_f, q_0; t) :=< q_f|exp(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H})|q_0 >$ est le noyau intégral de l'opérateur d'évolution, appelé le propagateur mécano-quantique.
2. $|K(q_f, q_0; t)|^2$ = proba qu'une particule en q_0 au temps $t = 0$ soit au point q_f au temps t
3. $\psi(q, t) :=< q|\psi(t) >= \int_{\mathbb{R}} dq' K(q_f, q_0; t)\psi(q', 0)$ où $\psi(q', 0) = \delta(q' - q_0)$ et on a trouvé cette intégrale en ajoutant un opérateur identité dépendant de q'.
4. $|\psi(q, t)|^2 = |K(q, q_0; t)|^2$ = proba de trouver la particule à la position q au temps t.

6.0.3 Exemples de propagateurs mécano-quantique

Cas de la particule libre : $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ et $V(\hat{q}) = 0$
Alors,

$$K(q_f, q_0; T) =< q_f|exp(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}T)|q_0 >= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}exp(\frac{im}{2T}(q_f - q_0)^2)$$

et $|K(q, q_0; t)|^2 = \dfrac{m}{2\pi\hbar t}$ qui est donc la proba.

Ce cas-là a aussi un propriété très stylée, rappelons-nous que la la trajectoire classique est : $q_c(t) = \dfrac{q_f - q_0}{T}t + q_0$ pour $t \in [0, T]$ et l'action classique (le fonctionnel d'action) : $\mathcal{S}(q_c(t)) = \mathcal{S}_c(q_f, q_0; T) = \dfrac{m}{2}\dfrac{(q_f - q_0)^2}{T}$ ce qui nous donne dans notre propagateur :

$$K(q_f, q_0; T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_c(q_f, q_0; T))$$

6.0.4 Représentation du propagateur comme une intégrale de chemin

7 Séries Trucs à retenir

7.1 Série 1

Exo 2: Si on prend P, Q deux projections orthogonales sur $V := \Im(P)$ et $U := \Im(Q)$. Il y a équivalence entre tout ça:

1. Les sous-espces U et V sont orthogonaux.
2. $PQ = 0$
3. $QP = 0$
4. $\mathrm{im}(Q) \subset \mathrm{Ker}(P)$
5. $\mathrm{im}(P) \subset \mathrm{Ker}(Q)$

Exo 3: Utile pour calculer les proba. Soient $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ deux veteurs de norme 1, Q, P des projection orthogonales sur $\mathbb{C}\varphi$ et $\mathbb{C}\psi$ alors:

$$\mathrm{Tr}(PQ) = \left|(\varphi, \psi)\right|^2$$

Exo 4: L'état $E \in \mathcal{E}$ est un état pur si et seulement si $\mathrm{Tr}(E^2) = 1$.

7.2 Série 2

Exo 1: Juste un petit exemple rapide de calcul. Soit

$$E = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \qquad \phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Alors la proba de trouver le système E dans l'état pur décrit par ϕ se calcule:

$$\mathrm{Tr}(EP_\phi) = \mathrm{Tr}((\frac{1}{2}P_1 + \frac{1}{2}P_2)P_\phi) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P_1 P_\phi) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P_2 P_\phi) = \frac{1}{2}|(e_1, \phi)|^2 + \frac{1}{2}|(e_2, \phi)|^2 = \frac{1}{2}$$

Remarque générale sur les proba/notation bra-ket: On a vu en Opti qu'on peut définir un produit scalaire sur les matrices: $< A, B >:= \mathrm{Tr}(A^T B)$. Vu qu'on travaille qu'avec des états purs #ProjectionOrthogonaleLife ça implique généralement que $A^* = A$. Je pense qu'on peut donc voir ces trucs comme des produits scalaires sur des espaces vectoriels complex, i.e.: $< A|B >= \mathrm{Tr}(A^* B) = \mathrm{Tr}(AB)$.

En quoi ça nous aide ? En supposant que tout ça tient aussi dans le cas d'espace infini ça nous permet de mieux comprendre ce qu'il se passe. $\bar{A}$ représente la proba de trouver A en état ϕ, presque comme $\mathbb{P}(A = \phi)$:

$$\bar{A_\phi} = \mathrm{Tr}(A^* P_\phi) = \mathrm{Tr}(P_\phi A P_\phi) =< P_\phi \mid A \mid P_\phi >\approx \int x|\phi(x)|^2 \, dx$$

En voyant ça comme tel on peut voir un lien direct entre la variance d'une VA et la variance d'un observable:

$$\sigma^2(X) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2$$

$$\begin{aligned}\sigma^2_\phi(A) &= \mathrm{Tr}(P(A - \bar{A})^2) = \mathrm{Tr}(PA^2 - 2\bar{A}PA + P\bar{A}^2) \\ &=< P|A^2|P > -2\bar{A} < P|A|P > +\bar{A}^2 < P|\, Id\, |P > \\ &=< P|A^2|P > -\bar{A}^2\end{aligned}$$

J'ai utilisé la notation bra-ket alors qu'on est en dim finie, mais justement psk il me semble qu'il faut comprendre la chose en dimension infine comme ça. Dans la correction de la série 8 il est écrit:

$$\sigma^2(p) =< \psi|p^2|\psi > -(< \psi|p|\psi >)^2$$

Exemple pour la moyenne de l'opérateur de position:

$$\bar{q} =< \psi|q|\psi >= \int \psi^*(x) q \psi(x)\, dx = \int \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x)\, dx$$

7.3 Série 3

Exo 2: Le spectre d'energie d'un système H est donné par l'ensemble de ses valeurs propres. On peut donner un exemple de calcul de solution en passant par la matrice $u(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} ht\right)$ donné en cours avec: $\phi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = (-a) \cdot P_{\varphi_1} + a \cdot P_{\varphi_2} \qquad \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Donc:

$$U(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} ta\right) P_{\varphi_1} + \exp\left(-\frac{i}{\hbar} ta\right) P_{\varphi_2} \rightsquigarrow \phi(t) = U(t) \cdot \phi(0)$$

Exo 3: Notons que l'implication $U^*U = Id \implies UU^* = Id$ est fausse généralement. Néanmoins, elle est vraie en si $\dim \mathcal{H} < \infty$. Il suffit aussi (je crois) de rajouter l'hypothèse que U est surjectif pour que l'implication devienne vrai.

7.4 Série 6

Exo 2: Indications pour la partie b). Pour montrer que q est auto adjoint ($q(\psi(x)) := x \cdot \psi(x)$), il faut montrer que $D(q^*) = D(q)$. Prenons $\phi \in D(q^*)$, alors par définition de l'ensemble l'opérateur suivnt est linéaire et borné sur $D(q)$:

$$\ell : \ \psi \to (\phi, q\psi)$$

L'idée est alors de définir une suite de fonction: $\psi_N(x) := \begin{cases} x \cdot \psi(x) & |x| \leq N \\ 0 & |x| > N \end{cases}$

Alors clairement $\psi_N \in D(q)$, et comme ℓ est borné $\ell(\psi_N) < \infty$. Par linéarité de ℓ on peut écrire:

$$\ell(\lim_{N\to\infty} \psi_N) = \lim_{N\to\infty} \ell(\psi_N) = \int_{\mathbb{R}} x^2 |\phi(x)|^2 \, dx < \infty$$

Donc comme $\psi_N \longrightarrow \phi \implies \phi \in D(q)$ aussi.

7.5 Série 7

Exo 1: Il s'agit de montrer que $\|A\varphi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 \, d\mu_\varphi$. Ce qu'il faut retenir est la formulation suivante de la mesure:

$$< \varphi, P\big([\lambda_i, \lambda_{i+1})\big)\varphi >= \mu_\varphi\big([\lambda_i, \lambda_{i+1})\big)$$

7.6 Série 9

Exo 1: Dans le calcul de a^*a il faut bien faire attention, les opérateurs ne sont pas vraiment commutatif $\frac{d}{dx}x \neq x\frac{d}{dx}$!

D'ailleurs on voit que $\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx} = Id$ en cours:

$$\left(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx}\right)\varphi = \frac{d}{dx}(x\varphi(x)) - x \cdot \varphi'(x) = \varphi(x) + x\varphi'(x) - x\varphi'(x) = \varphi$$

Autre note sur ces opérateurs on à vu en cours que $aa^* = a^*a + 1$