Résumé personnel de mécanique quantique

Marc Chamberland
Département de physique
Université de Sherbrooke

4 juillet 2006

Résumé

Voici mes notes personnelles de mécanique quantique que j'ai prises en lisant le manuel Mécanique Quantique I de Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë. Il s'agit en fait d'un résumé des principaux outils mathématiques de la mécanique quantique. Ce document ne devrait servir que d'aide-mémoire et ne se substitue pas à une lecture approfondie d'un ouvrage écrit.

Soit ₣ l'espace des fonctions des fonctions d'onde pour lesquelles l'intégrale $\int |\psi|^2 \, d^3r$ diverge.

1 Produit scalaire

$$(\phi, \psi) = \int \phi^* \psi d^3 r$$

2 Norme

$$\sqrt{(\psi, \psi)} = \sqrt{\int d^3 r \, |\psi|^2}$$

vaut 0 ssi $\psi \equiv 0$.

3 Opérateurs linéaires

Définition :

$$\begin{aligned} \forall \psi & \in & \text{₣} \longrightarrow \psi' \in \text{₣} \\ & \rightsquigarrow & \psi' = A\psi \end{aligned}$$

Propriétés :

$$\begin{aligned} A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) &= \lambda_1 A\psi_1 + \lambda_2 A\psi_2 \\ (AB)\psi &= A(B\psi) \end{aligned}$$

4 Commutateur

Notation :

$$[A, B] = AB - BA$$

A et B commutent ssi $[A, B] = 0 \rightsquigarrow AB = BA$.

5 Base orthonormée discrète

Soit $u_1, u_2, u_3, ... \in \mathrm{F}$.

Si $\psi = \sum_i c_i u_i$ est unique et $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$, alors $\{u_i\}$ est une base orthonormée.

$$c_i = (u_i, \psi)$$

6 Produit scalaire : composantes

Soit $\psi = \sum_j c_j u_j$ et $\phi = \sum_i b_i u_i$, alors :

$$\begin{aligned} (\phi, \psi) &= \sum_i b_i^* c_i \\ (\psi, \psi) &= \sum_i |c_i|^2 \end{aligned}$$

7 Relation de fermeture

Si $\sum_i u_i(\overrightarrow{r})\, u_i^*(\overrightarrow{r}') = \delta(\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}')$, alors $\{u_i\}$ est une base.

8 Base orthonormée continue

Orthonormalité :

$$(w_a, w_{a'}) = (\phi, \psi) = \int w_a^* w_{a'} d^3r = \delta(a - a')$$

Fermeture :

$$\int w_a\left(\overrightarrow{r}\right) w_{a'}\left(\overrightarrow{r}'\right) da = \delta\left(\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}'\right)$$

$$\begin{aligned}
&\rightsquigarrow \quad \psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \int c\left(a\right) w_a\left(\overrightarrow{r}\right) da : unique \\
&\rightsquigarrow \quad c\left(a\right) = \left(w_a, \psi\right) = \int w_a^*\left(\overrightarrow{r}'\right) \psi\left(\overrightarrow{r}'\right) d^3r' \\
&\rightsquigarrow \quad \left(\phi, \psi\right) = \int b^*\left(a\right) c\left(a\right) da \\
&\rightsquigarrow \quad \left(\psi, \psi\right) = \int \left|c\left(a\right)\right|^2 da
\end{aligned}$$

9 Espace des états

État quantique défini par fonction d'onde à temps t donné.
Tout état quantique caractérisé par *vecteur d'état.*
ε_r : espace des états

10 Notation de Dirac : ket

Ket :

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) \in \text{Ғ} \Leftrightarrow \left|\psi\right\rangle \in \varepsilon_r$$

11 Fonctionnelle linéaire

$\left|\psi\right\rangle \in \varepsilon_r \xrightarrow{\chi}$ nb complexe $\chi\left|\psi\right\rangle$
Ensemble des fonctionnelles linéaires définies sur ε_r forme espace dual de $\varepsilon : \varepsilon^*$.

12 Bra

Vecteurs de ε^*, notés $\left\langle\chi\right|$.
$\rightsquigarrow \left\langle\chi\right|\left.\psi\right\rangle$: nb (complexe) obtenu en faisant agir χ sur $\left|\psi\right\rangle$.

13 Produit scalaire

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

14 Élément de matrice de A entre $|\phi\rangle$ et $|\psi\rangle$

$$\langle\phi|\left(A\left|\psi\right\rangle\right)$$

15 Projecteur

Projecteur orthogonal sur ψ :

$$P_\psi = \left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$$

16 Opérateurs linéaires sur bras

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

17 Opérateur adjoint $A^\dagger$ de A : conjugué hermitique

On a :

$$\begin{aligned}
\left|\psi'\right\rangle &= A\left|\psi\right\rangle \\
\left|\psi'\right\rangle &\in \varepsilon \longrightarrow \left\langle\psi'\right| \in \varepsilon^* \\
\left|\psi\right\rangle &\in \varepsilon \longrightarrow \left\langle\psi\right| \in \varepsilon^*
\end{aligned}$$

Donc :

$$\left\langle\psi'\right| = \left\langle\psi\right| A^\dagger$$

et :

$$\begin{aligned}
\left|\psi\right\rangle \xrightarrow{A} \left|\psi'\right\rangle &= A\left|\psi\right\rangle \\
\left\langle\psi'\right| \xrightarrow{A^\dagger} \left\langle\psi'\right| &= \left\langle\psi\right| A^\dagger
\end{aligned}$$

Définition :

$$\begin{aligned}
\left|\psi'\right\rangle &= A\left|\psi\right\rangle \Leftrightarrow \left\langle\psi'\right| = \left\langle\psi\right| A^\dagger \\
&\leadsto \left\langle\phi\right| A\left|\psi\right\rangle^* = \left\langle\psi\right| A^\dagger\left|\phi\right\rangle
\end{aligned}$$

18 Produits d'opérateurs

$$(AB)^{\dagger} = B^{\dagger} A^{\dagger}$$

19 Conjugué hermitique d'une expression

1. Réécrire de droite à gauche.
2. Remplacer constantes par complexes conjugués.
3. Remplacer opérateurs par adjoints.

20 Opérateurs hermitiques

$$A^{\dagger} = A$$

Aussi appelés "observables".

Valeurs propres d'un opérateur hermitique sont *réelles*. Valeurs de l'observable = valeurs propres de l'opérateur.

21 Valeur moyenne d'une observable

Valeur moyenne de A dans l'état $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle_{\psi} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$