Rappels de Mécanique Quantique

Espace de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimension finie ou infinie (selon les cas)

- Vecteur de $\mathcal{H}$: $\left|\Phi\right\rangle, \left|\Psi\right\rangle \ldots$

- $\mathcal{H}$ est muni d'un produit scalaire $\left\langle \Phi \middle| \Psi \right\rangle$ $\qquad \left\langle \Psi \middle| \Phi \right\rangle = \left\langle \Phi \middle| \Psi \right\rangle^*$

- $\left|n\right\rangle$ base orthonormée $\quad \left\langle \mathrm{n} \middle| \mathrm{m} \right\rangle = \delta_{n,m}$

$\longrightarrow$ Expression d'un vecteur d'état dans la base $\left|n\right\rangle$

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_n a_n \left|n\right\rangle \qquad a_n = \left\langle n \middle| \Psi \right\rangle$$

$\longrightarrow$ Expression du produit scalaire dans la base $\left|n\right\rangle$

$$\left\langle \Phi \middle| \Psi \right\rangle = \sum_n b_n^* a_n \qquad \left\|\Psi\right\|^2 = \sum_n \left|a_n\right|^2$$

Operateurs linéaires sur $\mathcal{H}$

Opérateur A

- Expression de l'operateur dans la base $|n\rangle$

$$|Am\rangle = \sum_n A_{n,m} |n\rangle \qquad A_{n,m} = \langle n | A m \rangle$$

- Opérateurs Hermitiques $A^{\dagger} = A$

$$\longrightarrow \quad A^{*}_{m,n} = A_{n,m}$$

$\longrightarrow$ Diagonalisable dans une base orthonormée $AX_{\alpha} = \lambda_{\alpha} X_{\alpha}$

- Opérateurs unitaires $UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = Id$

$\longrightarrow$ Les opérateurs unitaires correspondent à des changements de base orthonormées

$$|\Psi\rangle_{/U} = U|\Psi\rangle \qquad \text{(conserve l'orthogonalité)}$$

$\longrightarrow$ Opérateur Hermitique $A = UDU^{-1}$

Notations de Dirac

- bras et kets   ket $|\varphi\rangle \rightleftarrows$ bra (dual) $\langle\varphi|$

$$\lambda|\varphi\rangle \rightleftarrows \lambda^*\langle\varphi|$$

On écrit $A|\varphi\rangle$ et $\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\psi|\left(A|\varphi\rangle\right)$

- Opérateur projection

$$P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi| \qquad \text{avec} \qquad \langle\varphi|\varphi\rangle = 1$$

- Relation de fermeture $\sum_n |n\rangle\langle n| = Id$

- Moyenne d'un opérateur dans l'état $|\Psi\rangle$

$$\langle A\rangle_\Psi = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$$

Spectre d'un opérateur

A Opérateur hermitique

$$A\left|n\right\rangle = \lambda_n \left|n\right\rangle$$

En dimension infini le spectre peut-être continu

$$A = \sum_n \left|n\right\rangle \lambda_n \left\langle n\right|$$

Méthode variationnelle

$$\lambda_0 \leq \underset{\langle\Psi|\Psi\rangle=1}{\mathrm{Min}} \left\langle \Psi \middle| A \middle| \Psi \right\rangle$$

Dans le cadre d'une parametrisation des fonctions d'ondes $\left|\Psi(\alpha)\right\rangle$
Le meilleur choix est celui qui conduit à un minimum de l'opérateur moyen

$$\frac{d\left\langle A\right\rangle_{\Psi_\alpha}}{d\alpha} = 0$$

Retour vers le réel

- Le ket $\left| r \right\rangle$

$$\left\langle r \middle| \Psi \right\rangle = \Psi(r)$$

$$\left\langle \Psi \middle| \Psi \right\rangle = \int \left| \Psi(r) \right|^2 d^3r = 1 \qquad \left| \Psi \right\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

$$\left\langle r \middle| r' \right\rangle = \delta(r - r')$$

- Opérateurs position et impulsion

$$\left\langle r \middle| X \middle| \Psi \right\rangle = x\Psi(r)$$

$$\left\langle r \middle| P_x \middle| \Psi \right\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(r)$$

$$\left[X_\alpha, P_\beta \right] = i\hbar \delta_{\alpha,\beta} I$$

- Hamiltonien d'une particule en interaction avec un potentiel

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$