# MECANIQUE QUANTIQUE
# Chapitre 4 :
# Formalisme mathématique de la mécanique quantique

**Pr. M. ABD-LEFDIL**
**Université Mohammed V- Agdal**
**Faculté des Sciences**
**Département de Physique**
**Année universitaire 07-08**
**Filières SM-SMI**



# Introduction

- L'objectif de ce chapitre:
- Donner une vue d'ensemble des outils mathématiques de base utilisés en mécanique quantique.
- Regrouper les diverses notions utiles en mécanique quantique en insistant particulièrement sur la commodité des notations de Dirac.
- Connaître des notions sur l'espace des fonctions d'onde,
- Comprendre le concept d'état d'un système physique et l'espace des états du système,
- Savoir utiliser les notations de Dirac et faire des manipulations sur les kets, les bras et les opérateurs.

# I- Espace de fonctions d'ondes $L^2$

- L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule a été donnée au chapitre 2.

$\iiint \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$ représente la probabilité pour que, à l'instant t, la particule soit trouvée dans le volume $d^3r = dxdydz$ autour du point r.

la probabilité totale de trouver la particule dans tout l'espace étant égale à 1, on doit avoir :

$$\iiint_{\text{espace}} \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = 1$$

**Ainsi, on étudiera l'ensemble des fonctions de carré sommable pour lesquelles l'intégrale ci-dessus converge.**



- Étant donné la signification attribuée à la densité de probabilité, les fonctions d'onde effectivement utilisées possèdent certaines propriétés de régularité:

- Des fonctions partout définies, continues, et même indéfiniment dérivables (par exemple, affirmer qu'une fonction est vraiment discontinue en un point donné de l'espace n'a aucun sens physique).

- Des fonctions d'onde à support borné (on est sûr que la particule se trouve dans une région finie de l'espace).

## 1- Définition de $L^2$ :

$L^2$ est l'espace des fonctions de carrés sommables (intégrables).

$$\Re^3, \Re^+ \to C$$
$$(\vec{r},t) \to \psi(\vec{r},t)$$
$$\iiint \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r \quad \text{est finie}$$

## 2- Caractéristiques de $L^2$ :

$L^2$ a une structure d'espace vectoriel sur le corps des nombres complexes

$$\text{Si}: \psi_1 \in L^2 \ \text{ et } \ \psi_2 \in L^2$$
$$(\lambda_1,\lambda_2) \in C^2, \text{alors}: \quad \psi = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in L^2$$

$$\psi \in L^2 \Leftrightarrow |\lambda_1|^2|\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2|\psi_2|^2 + \lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1\psi_2^*$$



Les 2 derniers termes $\lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1\psi_2^*$ ont la même amplitude.
On peut les majorer par $|\lambda_1||\lambda_2|\left(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2\right)$.

$\psi$ est alors une fonction dont l'intégrale converge, puisque $\psi_1$ et $\psi_2$ sont de carré sommable.

## 3- Produit scalaire dans L² :

A tout couple de 2 fonctions $\psi_1$ et $\psi_2$ pris dans cet ordre, on associe un nombre complexe, noté $(\psi_1,\psi_2)$:

$$\psi_1 \in L^2 \ \text{ et } \psi_2 \in L^2$$

$$(\psi_1, \psi_2) = \iiint \psi_1^*(\vec{r},t)\,\psi_2(\vec{r},t)\,d^3r$$

### Propriétés du produit scalaire:

$$(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*$$

$$(\psi, \psi) > 0. \quad \text{Si } (\psi, \psi) = 0 \text{ alors } \psi = 0$$

$$(\lambda_1\psi_1, \lambda_2\psi_2 + \lambda_3\psi_3) = \lambda_1^*\lambda_2(\psi_1, \psi_2) + \lambda_1^*\lambda_3(\psi_1, \psi_3)$$

$$(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1) = 0 : \psi_1 \text{ et } \psi_2 \text{ sont orthogonales}$$

$$(\psi_i, \psi_i) = 1 : \psi_i \text{ est normée}$$

**L² muni du produit scalaire défini comme ci-dessus a une structure d'espace d'Hilbert.**



# II- Opérateurs linéaires:

- Un opérateur linéaire A est, par définition, un être mathématique qui, à toute fonction $\psi$ appartenant à L², fait correspondre une autre fonction de L² notée $\varphi$, la correspondance étant linéaire :

$$A\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t) \ \text{ avec } \ \psi \in L^2 \ \text{ et } \varphi \in L^2$$

On a aussi: $A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(A\psi_1) + \lambda_2(A\psi_2)$

### Exemples:

1- Opérateur parité A=$\pi$: $\pi\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z)$

2- Opérateur multiplication par x, que nous désignerons par X:

$$X\psi(x,y,z) = x\psi(x,y,z)$$

3- Opérateur dérivation par rapport à x: $D_x\psi(x,y,z) = \dfrac{\partial\psi(x,y,z)}{\partial x}$

Des opérateurs comme X et $D_x$, agissant sur une fonction $\psi$ de $L^2$, peuvent la transformer en une fonction qui n'est plus nécessairement de carré sommable.

**Produit d'opérateurs:**

Soient deux opérateurs linéaires A et B. leur produit AB Est défini par:

$$AB\,\psi(\vec{r},t) = A(B\,\psi(\vec{r},t)) = A\varphi(\vec{r},t)$$

On fait d'abord agir B sur $\psi$, ce qui nous donne une fonction $\varphi$, ensuite A sur la fonction $\varphi$.

En général:

$$AB\,\psi(\vec{r},t) \neq BA\,\psi(\vec{r},t))$$

On définit le commutateur [A,B] par: [A,B]=AB - BA

**Exemple:**

$$[X,P_x] = \left[X, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[X, \frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}[X,D_x] = \frac{\hbar}{i}x - 1 = i\hbar$$

# III- Bases orthonormées complètes de $L^2$

Suivant les cas, on aura à utiliser soit une base à indice discret, soit une base à indice continu.

**a) Cas d'une base discrète :**

Soit $U_i(x)$ un ensemble de fonctions appartenant à $L^2$ où i = 1,2,…n. n peut être fini ou infini.

i) L'ensemble des $U_i(x)$ est dit orthonormé si :

$$\left(u_i(x),u_j(x)\right) = \int u_i^*(x),u_j(x)\ dx = \delta_{ij}$$

Relation d'orthonormalisation

On rappelle que: $$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

ii) L'ensemble des $U_i(x)$ est dit complet si :

$$\forall\ \psi \in L^2 : \psi(x) = \sum_i c_i\, u_i(x) \quad \text{avec } c_i \in C$$

$\psi$ se décompose suivant les $U_i(x)$ de manière unique.
Cherchons l'expression de $C_i$. Projetons $\psi(x)$ sur $U_j(x)$, c'est-à-dire :

$$\big(u_j(x),\psi(x)\big)=\int u_j^*(x)\,\psi(x)\ dx=\int u_j^*(x)\sum_i c_i u_i(x)\ dx$$

$$\big(u_j(x),\psi(x)\big)=\sum_i c_i\int u_j^*(x)\,u_i(x)\,dx\ =\sum_i c_i\ \delta_{ij}=c_j$$

**iii)** Relation de fermeture :

On a:

$$\psi(x)=\sum_i\int u_i^*(x')\,\psi(x')\,u_i(x)\,dx'=\int\psi(x')\left[\sum u_i^*(x')\ u_i(x)\right]dx'$$

Par conséquent, on a: $\sum_i u_i^*(x')\ u_i(x)=\delta(x-x')$

C'est la relation de fermeture



La relation de fermeture signifie que $\psi(x)$ se décompose de manière unique suivant la base des $U_i(x)$.

$$\psi_1\in L^2\ \ \text{et}\ \psi_2\in L^2$$

$$\psi_1=\sum_i a_i\ u_i(x):\psi_1^*=\sum_i a_i^*\ u_i^*(x)\ \text{ et }\ \psi_2=\sum_i b_j\ u_j(x):$$

Calculons le produit scalaire $(\psi_1,\psi_2)$

$$(\psi_1,\psi_2)=\int_{-\infty}^{+\infty}\sum_i a_i^*\ u_i^*(x)\sum_j b_j\ u_j(x)\ dx$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\sum_i\sum_j a_i^* b_j\int_{-\infty}^{+\infty}u_i^*(x)u_j(x)\ dx=\sum_i\sum_j a_i^* b_j\delta_{ij}$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\sum_i a_i^* b_i$$

**b) Cas d'une base continue :**

Soit $v_\alpha(x)$ un ensemble de fonctions repéré par indice a continu $\alpha \in \Re$

L'ensemble des $v_\alpha(x)$ forme une base si :

i) L'ensemble des $v_\alpha(x)$ est dit orthonormé si :

$$(v_\alpha(x), v_\beta(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(x) v_\beta(x)\ dx = \delta(\alpha - \beta)$$

ii) Relation de fermeture:

$$(v_\alpha(x), v_\alpha(x')) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(x) v_\alpha(x')\ d\alpha = \delta(x - x')$$



**Remarque** : $(v_\alpha(x), v_\alpha(x')) = \delta(0) = \infty$

Même si $v_\alpha(x) \notin L^2$ on peut décomposer $\psi \in L^2$ suivant cette base:

$$\psi(x) = \int c(\alpha)\, v_\alpha(x) dx \quad \text{où} \quad c(\alpha) = (v_\alpha(x), \psi(x))$$

$C(\alpha)$ n'est autre que la composante de $\psi(x)$ suivant $v_\alpha(x)$.

iii) **Produit scalaire** :

$$\psi_1 \in L^2 \ \text{ et } \psi_2 \in L^2$$

$$\psi_1(x) = \int a(\alpha)\, v_\alpha(x)\, d\alpha : \psi_1^*(x) = \int a^*(\alpha)\, v_\alpha^*(x)\, d\alpha$$

$$\text{et } \ \psi_2(x) = \int b(\beta)\, v_\beta(x)\, d\beta$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\int_x\int_\alpha\int_\beta a^*(\alpha)\,v_\alpha^*(x)\,d\alpha\;\; b(\beta)\,v_\beta(x)\,d\beta\;\;dx$$

$$\Leftrightarrow(\psi_1,\psi_2)=\int_\alpha\int_\beta a^*(\alpha)\,b(\beta)\,\delta(\alpha-\beta)\,d\alpha\,d\beta$$

$$\Leftrightarrow(\psi_1,\psi_2)=\int_\alpha a^*(\alpha)\,b(\alpha)\,d\alpha$$

Cas où $\psi_1=\psi_2$:

$$(\psi_1,\psi_1)=\int_\alpha a^*(\alpha)\,a(\alpha)\,d\alpha=\int\left|a(\alpha)\right|^2 d\alpha$$



## Exemples de bases continues :

i) Base continue de Fourier - Base des ondes planes:

$$v_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

Exercice: vérifier les relations d'orthonormalisation et de Fermeture?

Par conséquent, quelle que soit $\psi(x)$ appartenant à $L^2$, on peut la décomposer en une combinaison d'ondes planes.

$$\psi(x)=\int c(p)\,v_p(x)\,dp=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int c(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp$$

**C(p) n'est autre que la T.F.($\psi$(x)):**

$$c(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx$$

## Base continue de Fourier à 3 dimensions

$$v_p(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}}$$

$$\iiint v_p^*(\vec{r}) v_{p'}(\vec{r})\ d^3r = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

$$\iiint v_p^*(\vec{r}) v_p(\vec{r}')\ d^3p = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$\psi(\vec{r}) = \iiint c(\vec{p})\, v_p(\vec{r})\, d^3p$$

$$c(\vec{p}) = \iiint v_p^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})\ d^3r$$



**ii)** Base de Dirac: $v_\alpha(x) = \delta_y(x) = \delta(y-x)$

On vérifie aisément les relations d'orthonormalisation et de fermeture. Par conséquent, quelle que soit $\psi(x)$ appartenant à $L^2$, on peut la décomposer en une combinaison de « fonction » de Dirac.

$$\psi(x) = \int c(y)\,\delta(y-x)\,dy$$

**Une fonction d'onde $\psi(x)$ représentant un état physique doit Appartenir à $L^2$.** $\psi \in L^2$

**On définit une représentation par le choix d'une base orthonormée et complète sur laquelle on développera la fonction d'onde $\psi$.**
**Cette base peut être soit à indice discret, soit à indice continu.**

# IV- Notation de Dirac

## Introduction

Nous avons reporté dans le paragraphe III qu'une même fonction peut être représenté par plusieurs ensembles distincts de composantes, correspondant chacun au choix d'une base.

Nous nous trouvons alors dans une situation analogue à celle que l'on connaît bien pour l'espace ordinaire $R^3$.

Banach, Fréchet et Hilbert ont eu l'idée d'employer un langage géométrique pour résoudre des problèmes d'analyse en considérant des fonctions comme des vecteurs appartenant à des espaces appropriés (abstraits).

De ce fait, **Dirac** a transposé cette idée aux fonctions $\psi(x)$: tout état quantique d'une particule sera caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace abstrait $\xi$, appelé espace des états d'une particule.



En réalité, l'introduction des vecteurs d'état et de l'espace des états n'apporte pas seulement une simplification du formalisme. Elle permet aussi sa généralisation.

En effet, il existe des systèmes physiques dont la description quantique ne peut pas se faire à partir d'une fonction d'onde: Nous verrons que c'est le cas, même si l'on a affaire à une seule particule, lorsque l'on tient compte des degrés de liberté de **spin**.

Nous allons donc, dans le reste de ce chapitre, développer le calcul vectoriel dans $\xi$. Les notions que nous allons introduire et les résultats que nous obtiendrons sont valables quel que soit le système physique considéré.

# Vecteur ket et espace des états

- on a vu que :

- $C_i = (U_i(x), \psi(x))$ base discrète
- $C(\alpha) = (v_\alpha(x), \psi(x))$ base continue

Ceci est analogue à la représentation d'un vecteur usuel suivant une base, par exemple $\vec{V}.\vec{i} = V_x$

Un élément quelconque, ou vecteur, de l'espace $\xi$ est appelé vecteur ket, ou plus simplement ket. On le note par le symbole $|\ \rangle$ en mettant à l'intérieur un signe distinctif permettant de caractériser le ket correspondant par rapport à tous les autres, par exemple : $|\psi\rangle$



Maintenant, nous allons définir l'espace $\xi_r$ des états d'une particule en associant à toute fonction d'onde de carré sommable $\psi(\vec{r},t) \in L^2$ un vecteur ket $|\psi\rangle \in \xi_r$

En résumé: $\psi(\vec{r},t) \in L^2 \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \xi_r$

Nous désignerons par $\xi_x$ l'espace des états d'une particule (sans spin) à une seule dimension, correspondant à des fonctions d'onde dépendant de la seule variable x.

Insistons sur le fait qu'il n'apparaît plus dans $|\psi\rangle$ de dépendance par rapport à $\vec{r}$ mais seulement la lettre $\psi$ qui rappelle à quelle fonction il est associé :

$\psi(\vec{r})$ sera interprétée comme l'ensemble des composantes de $|\psi\rangle$

Par convention $|\psi>$ sera représenté par une matrice (ou vecteu colonne) contenant les composantes de $|\psi>$ dans la base correspondante. Par exemple:

$$\psi(x) = \sum_i c_i\, u_i(x) \rightarrow |\psi\rangle = \sum_i c_i\, |u_i\rangle \;\; \text{avec } i \in N^*$$

$$\psi(x) = \int c(\alpha)\, v_\alpha(x)\; d\alpha \rightarrow |\psi\rangle = \int c_\alpha\, |\alpha\rangle\, d\alpha \;\; \text{avec} \alpha \in \Re$$

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

**Base discrète B.D.**

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c(\alpha^1) \\ c(\alpha^2) \\ . \\ . \\ c(\alpha^n) \\ . \end{pmatrix}$$

**Base continue B.C.**



# Vecteur bra et l'espace dual des états

- A tout vecteur ket $|\psi>$ de $\xi$ , on associera un vecteur dit vecteur bra, noté $<\psi|$ appartenant à un espace appelé espace dual de $\xi$ et qu'on note $\xi^*$.

  Là les composantes du vecteur bra seront représentées par une matrice ligne contenant les composantes conjuguées des coordonnées de $|\psi>$.

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^*, .., c_n^*, ..) \qquad \langle\psi| = (c^*(\alpha^1), c^*(\alpha^2), .. c^*(\alpha^n), ..)$$

**B.D.** **B.C.**

$<\psi|$ et $|\psi>$ sont adjoints l'un de l'autre, ou encore $<\psi|$ est le transposé conjugué de $|\psi>$ et vis versa.

**Remarque:** En anglais, le symbole < | > est appelée « bracket » (c'est-à-dire crochet), d'où l'appellation Bra pour la partie gauche et< | , et ket pour la partie droite | >.

## Correspondance entre |ψ> et <ψ|

Soit $\lambda \in C$,

$$\left|\psi\right\rangle \in \xi \rightarrow \left\langle\psi\right| \in \xi^*$$

$$\lambda\left|\psi\right\rangle \in \xi \rightarrow \left\langle\psi\right|\lambda^* \in \xi^*$$

$$\lambda_1\left|\psi_1\right\rangle + \lambda_2\left|\psi_2\right\rangle \in \xi \rightarrow \left\langle\psi_1\right|\lambda_1^* + \left\langle\psi_2\right|\lambda_2^* \in \xi^*$$



## Produit scalaire en notation de Dirac

- Le produit scalaire de kets $|\psi_1>$ par $|\psi_2>$ est noté par: $\left\langle\psi_2\middle|\psi_1\right\rangle$

**Propriétés du produit scalaire:**

$$\left\langle\psi_2\middle|\psi_1\right\rangle = \left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle^*$$

$$\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle > 0. \quad \text{Si } \left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle = 0 \text{ alors } \left|\psi\right\rangle = 0$$

$$\left\langle\lambda_1\psi_1\middle|\lambda_2\psi_2 + \lambda_3\psi_3\right\rangle = \lambda_1^*\lambda_2\left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle + \lambda_1^*\lambda_3\left\langle\psi_1\middle|\psi_3\right\rangle$$

$$\left\langle\psi_2\middle|\psi_1\right\rangle = \left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle = 0 : \left|\psi_1\right\rangle \text{ et } \left|\psi_2\right\rangle \text{ sont orthogonales}$$

$$\left\langle\psi_i\middle|\psi_i\right\rangle = 1 : \left|\psi_i\right\rangle \text{ est normée}$$

# Choix d'une représentation

- Choisir une représentation, c'est choisir une base orthonormée, discrète ou continue, dans l'espace des états $\xi$.
- Les vecteurs et opérateurs sont alors représentés dans cette base par des **nombres** : composantes pour les vecteurs, éléments de matrice pour les opérateurs.
- Le calcul vectoriel devient alors le calcul matriciel sur ces nombres.
- Le choix d'une représentation est en principe arbitraire. Dans chaque cas, on l'effectue de façon à simplifier au maximum les calculs.



# Relations d'orthonormalisation en notation de Dirac

- Un ensemble discret $\{|u_i\rangle\}$, ou continu $\{|v_\alpha\rangle\}$, de kets est dit **orthonormé** si les kets de cet ensemble satisfont à la relation d'orthonormalisation:

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

$$\langle v_\alpha | v_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

On note que $\langle v_\alpha | v_\alpha \rangle$ n'existe pas. Les $\{|v_\alpha\rangle\}$ ont une norme infinie et n'appartiennent donc pas à $\xi$.

## Relations de fermeture en notation de Dirac- cas discret

- Un ensemble discret $\{|u_i\rangle\}$ de kets constitue une base si tout ket $|\psi\rangle$ de $\xi$, peut être développé d'une façon et d'une seule suivant les $\{|u_i\rangle\}$.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle, \text{ calculons la projection de } |\psi\rangle \text{ sur } |u_j\rangle :$$

$$\langle u_j|\psi\rangle = \sum_i c_i \langle u_j|u_i\rangle = \sum_i c_i\, \delta_{ij} = c_j$$

$$\text{D'où : } |\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle |u_i\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i\|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \left[\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right]|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad 1\mathrm{I} = \left[\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right] :$$

**C'est la relation de fermeture**



## Relations de fermeture en notation de Dirac- cas continu

- Un ensemble continu $\{|v_\alpha\rangle\}$, de kets constitue une base si tout ket $|\psi\rangle$ de x peut être développé d'une façon et d'une seule suivant les $\{|v_\alpha\rangle\}$.

$$|\psi\rangle = \int c(\alpha)|v_\alpha\rangle\, d\alpha, \text{ calculons la projection de } |\psi\rangle \text{ sur } |v_{\alpha'}\rangle :$$

$$\langle v_{\alpha'}|\psi\rangle = \int c(\alpha)\langle v_{\alpha'}|v_\alpha\rangle\, d\alpha = \int c(\alpha)\,\delta(\alpha-\alpha')\, d\alpha = c(\alpha')$$

$$\text{D'où : } |\psi\rangle = \int c(\alpha)|v_\alpha\rangle\, d\alpha = \int \langle v_\alpha|\psi\rangle|v_\alpha\rangle\, d\alpha$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle\, d\alpha$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \left[\int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\, d\alpha\right]|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad 1\mathrm{I} = \left[\int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\, d\alpha\right] :$$

**C'est la relation de fermeture**

**1I désigne l'opérateur identité dans $\xi$**

## Equation de Schrodinger avec la notation de Dirac:

**Equation dépendante du temps:**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = H\left|\psi\right\rangle$$

**Equation indépendante du temps:**

$$H\left|\phi\right\rangle = E\left|\phi\right\rangle$$



# V- Représentation de A par une matrice «carrée»

- **1- Définition** :

  On peut définir les opérateurs linéaires dans $\xi$ comme on l'a fait dans $L^2$ (paragraphe II).

  Supposons qu'à chaque ket $|\psi>$ de $\xi$ corresponde un certain ket $|\psi'>$ de $\xi$. On dira que $|\psi'>$ résulte de l'action d'un opérateur A sur $|\psi>$.

  Si de plus cette correspondance est linéaire, l'opérateur A ainsi défini est un opérateur linéaire:

$$A|\psi> = |\psi'>$$

- **2- Propriétés et opérations** :

**i)** A est nul si $|\psi'\rangle = 0$, quel que soit $|\psi\rangle$ :

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = 0$$

**ii)** A et B sont égaux si $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|B|\psi\rangle$

**iii)** Si la correspondance entre $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ est biunivoque, elle définit deux opérateurs linéaires A et B : $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ et $|\psi\rangle = B|\psi'\rangle$

A et B sont alors par définition inverses l'un de l'autre.

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = A(B|\psi'\rangle)$$

$$|\psi\rangle = AB|\psi\rangle$$

$$AB = 1$$



- **iv)** La somme des opérateurs linéaires est commutative et associative :

$$A + B = B + A$$

$$A + (B + C) = (A + B) + C$$

- **v)** Le produit est associatif et distributif par rapport à l'addition :

$$A(BC) = (AB)C$$

$$A(B + C) = AB + AC$$

- **vi)** Le produit n'est pas commutatif (en général)

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

Si $[A,B] = 0$: on dit que A et B commutent.

- **Opérations** :

**i)** Soit $\lambda$ un nombre complexe et A un opérateur

$\lambda_1 A_1|\psi_1\rangle = A_1(\lambda_1|\psi_1\rangle)$

$\langle\psi_2|A_2\lambda_2 = \lambda_2 \langle\psi_2|A_2$

**ii)** A, B deux opérateurs tel que : S = A + B

$S|\psi\rangle = (A + B)|\psi\rangle$

$= A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$

$\langle\psi|S = \langle\psi|A + \langle\psi|B$

**iii)** P = AB

$P|\psi\rangle = (AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) = A|\psi'\rangle = |\psi''\rangle$

$\langle\psi|P = \langle\psi|(AB) = (\langle\psi|A)B = \langle\psi_1|B = \langle\psi_2|$



**Remarques :**

- On dit aussi que A et B sont inverses l'un de l'autre si AB = BA = 1

car $|\psi\rangle = B|\psi'\rangle = B(A|\psi\rangle)$

$|\psi\rangle = BA|\psi\rangle \Leftrightarrow 1 = BA$

$AB = BA = 1 \Leftrightarrow [A,B] = 0$

- L'inverse d'un opérateur A n'existe pas toujours. Lorsqu'il existe, on le note $A^{-1}$.

- Si deux opérateurs A, C possèdent chacun un inverse, le produit AC possède un inverse tel que : $(AC)^{-1} = C^{-1}A^{-1}$.

## 3- Représentation matricielle d'un opérateur :

On a vu que : $|\psi\rangle = \Sigma\, C_i\, |U_i\rangle$

où $\{|U_i\rangle\}$ forme une base orthonormée complète dans $\xi$.

Appliquons un opérateur A à $|\psi\rangle$ tel que :

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

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \text{et} \quad |\psi'\rangle = \sum_j c_j' |u_j\rangle$$

$$c_j' = \langle u_j|\psi'\rangle = \sum_i c_i \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i c_i A_{ji}$$

$$c_1' = c_1 A_{11} + c_2 A_{12} + c_3 A_{13} + \ldots + c_n A_{1n}$$



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

$$\Leftrightarrow$$

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ . \\ . \\ c_n' \\ . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \ldots & A_{1n} & .. \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \ldots & A_{2n} & .. \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & A_{n3} & \ldots & A_{nn} & .. \\ . & & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ c_n \\ . \end{pmatrix}$$

**4- Calcul de $<\psi_2|A|\psi_1>$ :**

$$|\psi_1\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle \quad \text{et} \quad |\psi_2\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$$

$$\langle\psi_2|A|\psi_1\rangle = \sum_i \sum_j a_i b_j^* \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i \sum_j a_i b_j^* A_{ji}$$

**5- Exemple d'opérateur linéaire : opérateur de projection ou projecteur** :

Soit $|\psi>$ appartenant à $\xi$ tel que $<\psi|\psi> = 1$

$<\psi|$ de $\xi^*$. On définit l'opérateur projecteur par :

$$P_\psi = |\psi> <\psi|$$

**i-** $P_\psi |\psi_1> = (|\psi> <\psi|) |\psi_1>= |\psi> <\psi|\psi_1> = \lambda |\psi>$

**ii-** $P^2_\psi = P_\psi P_\psi = (|\psi> <\psi|) (|\psi> <\psi|) = |\psi> <\psi|\psi> <\psi|$

$= |\psi> <\psi|= P_\psi$

D'où: une projection est équivalente à deux projections.



# VI- Opérateurs adjoints :

**1- Définition** :

Deux opérateurs A et B sont dits adjoints l'un de l'autre si leurs matrices représentatives (dans un représentation bien définie) sont adjointes l'une de l'autre.

**Notation**: L'adjoint de A est noté $A^+$ et l'adjoint de B est noté $B^+$.

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

$$A_{ji}^* = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

$$\langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

**Exemple 2 matrices adjointes l'une de l'autre :**

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} a_1^* & a_3^* \\ a_2^* & a_4^* \end{pmatrix}$$

D'une manière générale, l'adjoint $A^+$ de A est défini par :

$<\psi_2|A^+|\psi_1> = (<\psi_1|A|\psi_2>)^*$

**2- Propriétés :**

**Soit $\lambda$ un nombre complexe. A et B sont des opérateurs.**

**i) $(\lambda A)^+ = (\lambda A)^{*T}$ conjugué du transposé**

**$= \lambda^{*T} A^{*T} = \lambda^* A^+$**

**ii) $(A + B)^+ = A^+ + B^+$**

**iii) $(AB)^+ = B^+A^+$**

**iv) $(A^+)^+ = A$**

**v) Un opérateur A est dit unitaire s'il est l'inverse de son propre adjoint : $AA^+ = A^+A =1$**

**Le produit C = AB (tel que A,B soient unitaires) est aussi unitaire.**



- **Règle importante** :
  Pour obtenir l'expression adjointe d'une expression quelconque (contenant des nombres complexes, des opérateurs, des ket et bra), on procède de la façon suivante :
  **i)** On inverse l'ordre des termes.
  **ii)** Les bra deviennent ket et les ket deviennent bra.
  Les complexes deviennent complexes conjugués et les opérateurs deviennent opérateurs adjoints.

- **Exemple** :
  Soit: $\lambda$ un nombre complexe.
  A, B, C et D sont des opérateurs. $|\psi_1>$ et $<\psi_2|$

  $\lambda$ ABCD $|\psi_1><\psi_2|$ a pour expression adjointe :

  $|\psi_2><\psi_1| D^+C^+B^+A^+ \lambda^*$

# VII/ Opérateur hermitique (ou auto-adjoint) :

- **1- Définition** :

  **A est hermitique si $A^+ = A$**

  **Dans $|U_i\rangle$ : $A^*_{ij} = A^*_{ji} = A_{ij}$**

- **2- Exemples:**

  **a) $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$**

  **$P^+_\psi = (|\psi\rangle\langle\psi|)^+$**

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

  **L'opérateur projecteur est hermitique.**

  **b)**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix} \text{ et } A^+ = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix} : A = A^+$$



- **3- Définition** :

  B est dit anti-hermitique si : $B^+ = -B$

- **Conséquences** :

  Un opérateur quelconque peut être écrit (et d'une seule façon) sous la forme d'une somme d'opérateurs hermitique et anti-hermitique.

$$A = H_A + I_A$$

$$\text{Où } H_A = \frac{A + A^+}{2} \text{ et } I_A = \frac{A - A^+}{2}$$

$$\text{On a} : H_A^+ = H_A \quad \text{et } I_A^+ = -I_A$$

**- Toute combinaison linéaire à coefficients réels d'opérateurs hermitiques est hermitique.**

**- Le produit AB de deux opérateurs hermitiques n'est pas nécéssairement hermitique.**

$$(AB)^{+} = B^{+}A^{+} = BA$$

**- si BA = AB : A et B commutent, alors $(AB)^{+} = AB$**

**Remarque:**

$$AB = \frac{AB+BA}{2} + \frac{1}{2}[A,B]$$



# VIII/ Problème de valeurs propres :

- **1- Définition :**

  Soit A un opérateur linéaire. Par définition, on dira que le nombre complexe $a_n$ est valeur propre de A associé au vecteur propre $|\psi_n>$ si : $A|\psi_n> = a_n |\psi_n>$

- **Exemple :**

  **$H|\psi> = E|\psi>$ équation de Schrödinger**

  De même $<\psi'_n|A = a'_n <\psi'_n|$

- Soit $|\psi_n>$ un vecteur propre **$V_p$** de A avec la $v_p$ $a_n$ .

  soit $\lambda$ un complexe.

  $\lambda |\psi_n>$ est aussi **$V_p$** de A avec la même $v_p$ $a_n$.

$$A|\lambda|\psi_n> = \lambda(A |\psi_n> )$$
$$= \lambda(a_n |\psi_n> ) = a_n (\lambda |\psi_n> )$$

- Si $<\psi_n| \lambda^* \lambda | \psi_n> = 1$

  $\lambda^* \lambda < \psi_n| \psi_n> = 1$

  $\lambda^* \lambda = 1$

  $\lambda = e^{i\theta}$ : facteur de phase

  Si deux **$V_p$** ne diffèrent que par un facteur de phase, ils représentent le même état quantique.



- **2- Dégénérescence** :

  S'il existe plusieurs kets propres linéairement indépendants relatifs à la même valeur propre $a_n$, toute combinaison linéaire de ces kets est aussi ket propre de l'opérateur A relatif à la même $v_p$ $a_n$.

  En d'autres termes, l'ensemble des kets propres de A (relatifs à une valeur propre donnée $a_n$) forme un espace vectoriel que l'on appelle sous espace relatif à la $v_p$ $a_n$.

  Distinguons deux cas :

  **a)** Si ce sous espace n'a qu'une dimension, on dira que la $v_p$ $a_n$ n'est pas dégénérée. En effet, à une $v_p$ correspond un **$V_p$** seul .

  **b)** Si ce sous espace est de dimension $g_n$, on dira que la $v_p$ est **dégénérée** $g_n$ fois.

  $g_n$ est appelé ordre de dégénérescence de la $v_p$ $a_n$.

  $$A|\psi_{in}> = a_n \, | \, \psi_{in} > \qquad \text{où } i = 1, 2, \ldots g_n$$

- **3- <u>Remarques</u> :**

**a)** $g_n$ peut être infini.

**b)** Le texte énoncé en 2) est valable aussi pour les bra propres de A.

**c)** Si A est un opérateur quelconque, il n'existe pas de relation simple entre le problème de valeurs propres relatif aux ket et celui relatif aux bra.

Par contre, ces deux problèmes sont étroitement liés si A hermitique, ce qui est un cas d'interêt pratique. En effet, si A est hermitique ($A = A^+$), on a :

**i)** Les deux spectres de $v_p$ de A sont identiques.

**Langage:** L'ensemble des $v_p$ d'un opérateur A est appelé spectre de A.

**ii)** Toutes les $v_p$ sont réelles. En effet : $A = A^+$ et

$A|\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$ et $\langle \psi_n |A| \psi_n\rangle = a_n \langle \psi_n|\psi_n\rangle$

**iii)** Tout bra conjugué d'un ket propre de A est bra propre relatif à la même valeur propre et inversement.

Autrement dit, le sous espace des bra propres relatifs à une valeur propre donnée est le dual du sous espace des kets propres relatifs à la même $v_p$.



- **Les $V_p$ relatifs à des $v_p$ d'un opérateur hermitique sont orthogonales.**

En effet, soit A opérateur hermitique $A = A^+$

Soient: $A|\psi_1\rangle = a_1 |\psi_1\rangle$ et $A|\psi_2\rangle = a_2 |\psi_2\rangle$

avec $a_1$ différente de $a_2$

$$\langle \psi_2 |A = \langle \psi_2 |a_2 = a_2 \langle \psi_2 |$$

$$\Leftrightarrow \langle \psi_2 |A| \psi_1\rangle = a_2 \langle \psi_2 | \psi_1\rangle$$

$$\Leftrightarrow \langle \psi_2 |A| \psi_1\rangle = a_1 \langle \psi_2 | \psi_1\rangle$$

$$(a_2 - a_1) (\langle \psi_2 | \psi_1\rangle) = 0$$

Comme $(a_2 - a_1)$ est différent de zéro: $\langle \psi_2 | \psi_1\rangle) = 0$

**$|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont alors orthogonaux**

## 4- Equation caractéristique d'un opérateur:

Soit un opérateur tel que : $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$A|\psi\rangle = a\sum_i c_i |u_i\rangle \text{ et } A|\psi\rangle = \sum_i c_i A|u_i\rangle$$

On multiplie par le bra $\langle u_j|$, on obtient:

$$\left.\begin{array}{l} a\sum_i c_i \langle u_j|u_i\rangle = a\sum_i c_i\,\delta_{ji} \\ \text{et } \sum_i c_i \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i c_i\,A_{ji} \end{array}\right) \quad \sum_i c_i\left(A_{ji} - a\,\delta_{ji}\right) = 0$$



- Si i = 1, 2, …, n, on est en présence d'un système linéaire à n inconnues, il aura pour solution (autre que $C_i = 0$):

**Det (A - a I) = 0**

I est la matrice unité.

C'est l'équation caractéristique de l'opérateur A ou équation aux valeurs propres dont les solutions sont les $v_p$ a.

# IX/ Observables:

- **1- Définition** :

  Une observable est un opérateur hermitique dont le système de $\mathbf{V_p}$ forme une base orthonormée complète dans l'espace des états.

  $A|U^i_n\rangle = a_n\,|U^i_n\rangle \qquad i = 1, 2,\dots, g_n$

  ($g_n$ degré de dégénérescence)

  On a : $\langle U^i_n|U^i_{n'}\rangle = \delta_{nn'} \qquad i = 1, 2,\dots, g_n$

  A l'intérieur du sous espace de $a_n$ (qu'on notera $\xi_n$), on peut choisir les $|U^i_n\rangle$ tel que : $\langle U^i_n|U^j_n\rangle = \delta_{ij}$

d'où:

$$\langle U^i_n|U^j_{n'}\rangle = \delta_{ij}\,\delta_{nn'}$$



- L'ensemble des $|\,U^i_n\rangle$ est complet :

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u^i_n\rangle\langle u^i_n| = 1$$

Soit $P_n$: projecteur sur le sous espace $\xi_n$

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u^i_n\rangle\langle u^i_n|$$

$$\sum_n P_n = 1$$

## 2- Exemples d'observables :

**a)** Projecteur :

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

**b)** Opérateur position X :

Soit $|\psi\rangle$ de $\xi$ tel que $X|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ de $\xi$

Dans la représentation $\{|x\rangle\}$ (base de Dirac),

X vérifie : $\langle x|X|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\,\psi(x)$

**i)** Montrer que X est hermitique :

$\langle\varphi|X|\psi\rangle = \langle\psi|X|\varphi\rangle^*$

**ii)** Chercher les $v_p$ de X:

$X|x'\rangle = \lambda|x'\rangle$

x $\langle x|$ … $\lambda = x'$

**Conclusion :**

L'opérateur X appelé aussi opérateur position est donc une observable.



**c)** Opérateur impulsion P :

Soit $|\psi\rangle$ de $\xi$ tel que $P|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ de $\xi$

**1)** Dans la représentation $\{|p\rangle\}$ : base de Fourier

$\langle p|P|\psi\rangle = p\,\langle p|\psi\rangle = p\,\psi(p)$

**i)** Montrer que P est hermitique :

$\langle\varphi|P|\psi\rangle = \langle\psi|P|\varphi\rangle^*$

**ii)** Chercher les $v_p$ d P

**2)** Dans la représentation $\{|x\rangle\}$

Calculons $\langle x|P|\psi\rangle$ et introduisons la relation de fermeture:

$$\int |p\rangle\langle p| \; dp = 1$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int \langle x|p\rangle\langle \mathbf{p}|P|\psi\rangle dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\mathbf{p}\,\langle \mathbf{p}|\psi\rangle dp$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\mathbf{p}\,\psi(p)\,dp$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial\psi(x)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\langle x|\psi\rangle$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \langle x|\frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}|\psi\rangle$$

$$\text{D'où : } P \rightarrow \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

**Conclusion:** P est hermitique et {|p>} forme une base orthonormée et complète, alors l'opérateur impulsion P est une observable.



- **3- Fonctions d'observables** :

Soit A|ψ> = a|ψ>  A est une observable

Toute fonction f(a) des valeurs propres a d'une observable A permet de définir un opérateur linéaire fonction de cette observable.

Par définition :

**f(A) |ψ> = f(a) |ψ>**

**Remarques :**

**i)** Si f est une fonction polynôme, cette définition coïncide avec celle que l'on obtient par application des règles de l'algèbre des opérateurs.

**ii)** Tout $\mathbf{V_p}$ de A est $\mathbf{V_p}$ de f(A).

**iii)** Cas de dégénérescence : les $\mathbf{V_p}$ de A relatifs à une même $v_p$ a sont aussi $\mathbf{V_p}$ de f(A) avec la même $v_p$ f(a).

- **Exemples** :

  **i)** $e^A\, e^B \neq e^{A+B}$

  **ii)** $e^A\, e^B = e^B\, e^A$ si $[A,B] = 0$

  **iii)** $X|x\rangle = x|x\rangle$

  iv) au potentiel $V(x)$, on associe l'observable $V(X)$

  $$V(X)|x\rangle = V(x)|x\rangle$$

  et

  $$\langle x'|V(X)|x\rangle = V(x)\,\langle x'|x\rangle = V(x)\,\delta(x' - x)$$



# X/ Observables qui commutent et variables compatibles :

- Considérons deux observables A et B et supposons que le spectre des $v_p$ est discret et qu'elles possèdent une fonction propre commune $|\psi_n\rangle$.

  $$A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$$

  $$B|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$$

  Pour que ces deux équations soient vérifiées simultanément, une condition s'impose :

  $$(AB - BA)\,|\psi_n\rangle = [A,B]\,|\psi_n\rangle = 0\,|\psi_n\rangle = 0$$

  c'est-à-dire que le commutateur $[A,B]$ a $|\psi_n\rangle$ comme $\mathbf{V_p}$ correspondant à une $v_p$ nulle. En effet :

$AB|\psi_n\rangle = A\,(B|\psi_n\rangle)$
$= A\,(b_n|\psi_n\rangle)$
$= b_n\,(A|\psi_n\rangle) = b_n\, a_n|\psi_n\rangle$

$BA|\psi_n\rangle = B\,A|\psi_n\rangle = B\,a_n|\psi_n\rangle = a_n B|\psi_n\rangle = a_n b_n|\psi_n\rangle$

$(AB - BA)\,|\psi_n\rangle = 0 = 0\,|\psi_n\rangle$

**D'une manière générale, on a le théorème suivant : Si deux observables commutent, elles possèdent un système de base commun à A et B, et réciproquement.**

- **Langage :**

  - Un système de base d'une observable donnée est tout système orthonormé complet de $\mathbf{V_P}$ de cette observable.

  - Les $\mathbf{V_P}$ qui diffèrent entre eux par un facteur de phase ne sont pas considérés comme distincts. Ils représentent le même état quantique.



- **Signification physique du théorème :**

  Les variables dynamiques représentées par ces deux observables qui commutent peuvent être définies de façon précise simultanément : ce sont des variables compatibles (ou variables simultanément mesurables).

- **Remarques** :

  X, $P_x$ ne sont pas compatibles car $[X, P_x] = i\hbar$

## Théorème 1 :

Soient $|\psi_1>$ et $|\psi_2>$ deux vecteurs propres de A tel que :

$A|\psi_1> = a_1|\psi_1>$

avec $\boxed{a_1 \neq a_2}$

$A|\psi_2> = a_2|\psi_2>$

Si $[A,B] = 0$, alors $<\psi_2|B|\psi_1> = 0$

En effet, calculons

$$<\psi_2|[A,B]|\psi_1> = <\psi_2|AB - BA|\psi_1>$$

$$0 \quad = <\psi_2|a_2B - Ba_1|\psi_1>$$

$$= a_2 <\psi_2|B|\psi_1> - a_1 <\psi_2|B|\psi_1>$$

$$= (a_2 - a_1) <\psi_2|B|\psi_1>$$

Or $\boxed{a_1 \neq a_2}$ : $<\psi_2|B|\psi_1> = 0$



## Théorème 2 :

Si $|\psi^i_n>$ est **$V_P$** de A avec la $v_p$ $a_n$, alors $B|\psi^i_n>$ est aussi **$V_P$** de A dans le cas où $[A,B] = 0$.

Le sous espace $\xi_n$ est invariant sous l'effet de B.

$\xi_n$ est l'espace de dégénérescence de $a_n$.

En effet :

$[A,B]\ |\psi^i_n> = 0$ car A et B commutent

$A(B|\psi^i_n>) - B(A|\psi^i_n>) = 0$

$A(B|\psi^i_n>) = a_n\ (B|\psi^i_n>)$

# XI/ E.C.O.C : Ensemble Complet d'Observables qui Commutent:

- **1- Définition** :

On dit qu'un ensemble A, B, C… d'observables forme un E.C.O.C si :

**i)** les observables commutent toutes deux à deux : $[A,B] = [A,C] = [B,C] = \ldots = 0$

**ii)** Si leur système de base commun est défini de façon unique.

A chaque ensemble de $v_p$ a,b,c… d'observables (A,B,C…), correspond **un et un seul $V_p$** commun (à un facteur de phase près).



Ce vecteur propre peut être regardé comme fonction des $v_p$ a,b,c…

Ce vecteur est parfois noté |abc…> ou encore $|\psi_{abc\ldots}>$

$A|_{abc\ldots}> = a\ |_{abc\ldots}>$

$A|\psi_{abc\ldots}> = a\ |\psi_{abc\ldots}>$

$B|_{abc\ldots}> = b\ |_{abc\ldots}>$

$C|_{abc\ldots}> = c\ |_{abc\ldots}>$

## a) Cas d'une seule observable :

**i)** Si A est observable et si aucune des $v_p$ n'est dégénérée, alors la donnée de la $v_p$ détermine de manière unique les $\mathbf{V_p}$ correspondant.

A forme à elle seule un E.C.O.C.

$$A|\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$$

A observable et $a_n$ non dégénérée: A est un E.C.O.C

**ii)** Si $a_n$ est dégénérée

$A|\psi^i_n\rangle = a_n |\psi^i_n\rangle$ $\qquad$ $i = 1, 2,\ldots g_n$

A n'est pas un E.C.O.C.



## b) Cas de deux observables :

Soient deux observables A, B tel que : $[A,B] = 0$.

Par diagonalisation de B dans le sous espace propre $a_n$. On détermine les $\mathbf{V_P}$ communs à A et B qu'on peut noter $\{|\psi_{n,p}\rangle\}$ ou $|np\rangle$, avec :

$A|\psi_{n,p}\rangle = a_n |\psi_{n,p}\rangle$ $\qquad$ et $\qquad$ $B|\psi_{n,p}\rangle = b_p |\psi_{n,p}\rangle$

**i)** Si à $\{a_n,b_p\}$ correspond un $\mathbf{V_P}$ unique, alors $\{A,B\}$ est un E.C.O.C.

**ii)** Si $a_n$ est dégénérée ($g_n$: ordre de dégénérescence)

ou $b_p$ est dégénérée ($g_p$: ordre de dégénérescence)

alors $\{A,B\}$ n'est pas un E.C.O.C.

On prend alors une 3ème observable C tel que : $[A,C] = [B,C] = 0$ et on la diagonalise dans $\xi_{n,p}$ ($\xi_{n,p}$ sous espace propre de $b_p$).

## 2- Remarques :

**i)** On convient généralement à former un E.C.O.C avec le minimum d'observables possibles, tel que si on enlève une observable, cet ensemble cesse d'être un E.C.O.C.

**ii)** Soit {A,B,C} trois observables formant un E.C.O.C tel que:

A $\longrightarrow$ $v_p$ $a_n$, B $\longrightarrow$ $v_p$ $b_p$ et C $\longrightarrow$ $v_p$ $c_q$

Le **$V_P$** commun et unique sera noté : $|\psi_{npq}>$ ou encore $|a_n b_p c_q>$

**iii)** Rôle des E.C.O.C dans la détermination de l'état quantique d'un système : connaître l'état quantique d'un système, c'est avoir fait sur le système le maximum de mesures compatibles.

Soit $a_n$ une $v_p$ dégénérée d'une observable A. L'état quantique du système n'est pas alors parfaitement connu. On fait intervenir une autre observable jusqu'à l'obtention de l'E.C.O.C.



## Exemples :

**a-** Particule sur un axe ox :

X|x> = x|x> X est l'observable position

X est un E.C.O.C car à chaque $v_p$ correspond un seul vecteur propre |x>.

**b-** Particule dans le plan oxy :

X|xy> = x|xy> où y est quelconque

X n'est pas un E.C.O.C car à chaque $v_p$ correspond plusieurs vecteurs propres |xy>

**c-** {X,Y} est un E.C.O.C

A chaque {x,y} un seul vecteur propre |xy>

{X,Y} une observable position: suivant ox et suivant oy.