Champs & Particules

Mécanique quantique

Alain Bouquet

Laboratoire AstroParticule & Cosmologie

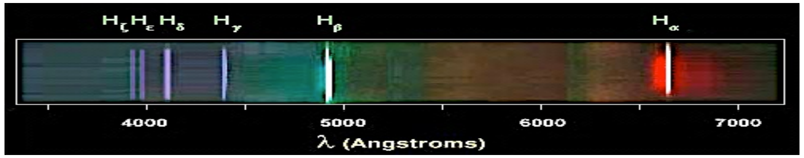
Université Denis Diderot Paris 7, CNRS, Observatoire de Paris & CEA

Petite chronologie de trois axes convergents

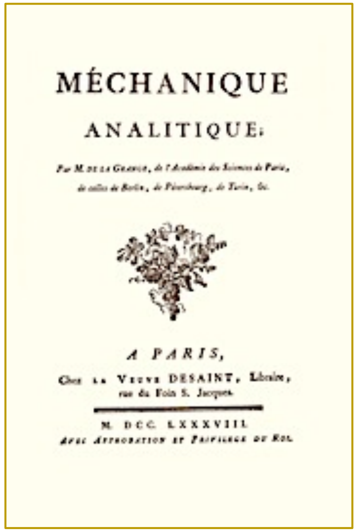
1 - Le corps noir

Kirchhoff (1860) ➛ Stefan (1879) ➛ Boltzmann (1884) ➛ Wien (1893) ➛ Planck (1900) ➛ Einstein (1905) ➛ de Broglie (1924) ➛ Schrödinger (1926)

2 - Les raies spectrales

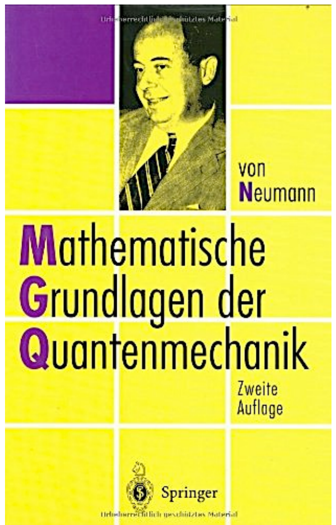


Kirchhoff (1860) ➛ Balmer (1885)➛ Rydberg (1888) ➛ Bohr (1913) ➛ Sommerfeld (1914) ➛ Heisenberg (1925) ➛ Born (1925) ➛ Dirac (1925)



3 - La mécanique analytique

Newton (1687) ➛ Maupertuis (1744) ➛ Lagrange (1788) ➛ Poisson (1811) ➛ Fourier (1822) ➛ Hamilton (1834) ➛ Poincaré (1890) ➛ Dirac (1930) ➛ von Neumann (1932)



Unité de la mécanique quantique

- Mécanique des matrices (1925)
  - Les systèmes physiques sont représentés par des matrices
  - Les résultats de mesures effectuées sont des valeurs propres de ces matrices
  - L'évolution temporelle est donnée par une équation matricielle impliquant le hamiltonien:

$$i \hbar\, \partial X/\partial t = [X,H]$$

- Mécanique ondulatoire (1926)
  - Les systèmes physiques sont représentés par des fonctions (d'onde)
  - Les résultats de mesures effectuées sont les valeurs propres d'opérateurs différentiels
  - L'évolution temporelle est donnée par une équation différentielle impliquant le hamiltonien:

$$i\hbar\, \partial \Psi/\partial t = H\, \Psi$$

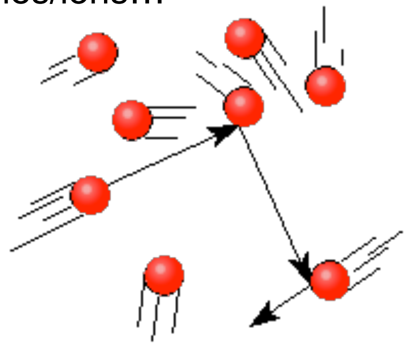
- Dirac (1925)
  - La notion de matrice est secondaire: c'est le commutateur qui importe
- Schrödinger (1926)
  - Mécanique ondulatoire et mécanique des matrices sont *mathématiquement* identiques

- Dirac (1930)
  - c-nombres et q-nombres
- von Neumann (1932)
  - état $\rightleftharpoons$ vecteur (espace de Hilbert)
  - observable $\rightleftharpoons$ opérateur
  - mesure $\rightleftharpoons$ projecteur ☛ probabilités

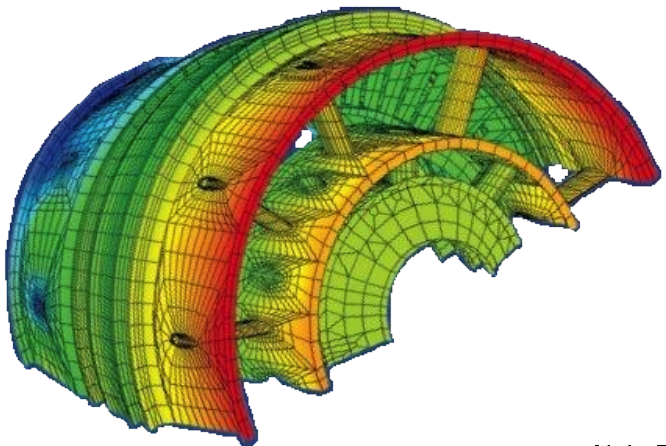
MÉCANIQUE
CLASSIQUE

Systèmes

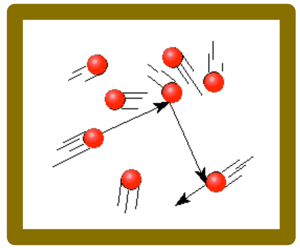
- Objets
  - particules/corpuscules/molécules/atomes/ions…



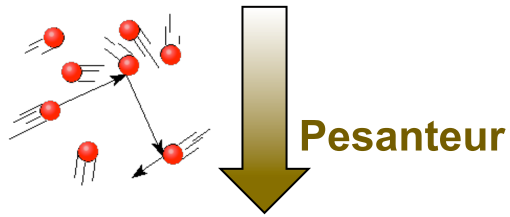
  - objets étendus [modélisables comme des ensembles d'objets élémentaires ou des objets continus: fluides, champs]



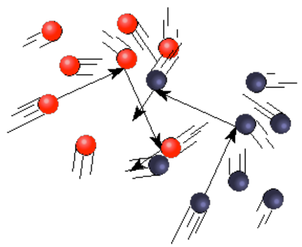
- Environnement
  - inexistant ou négligeable ⇔ système isolé



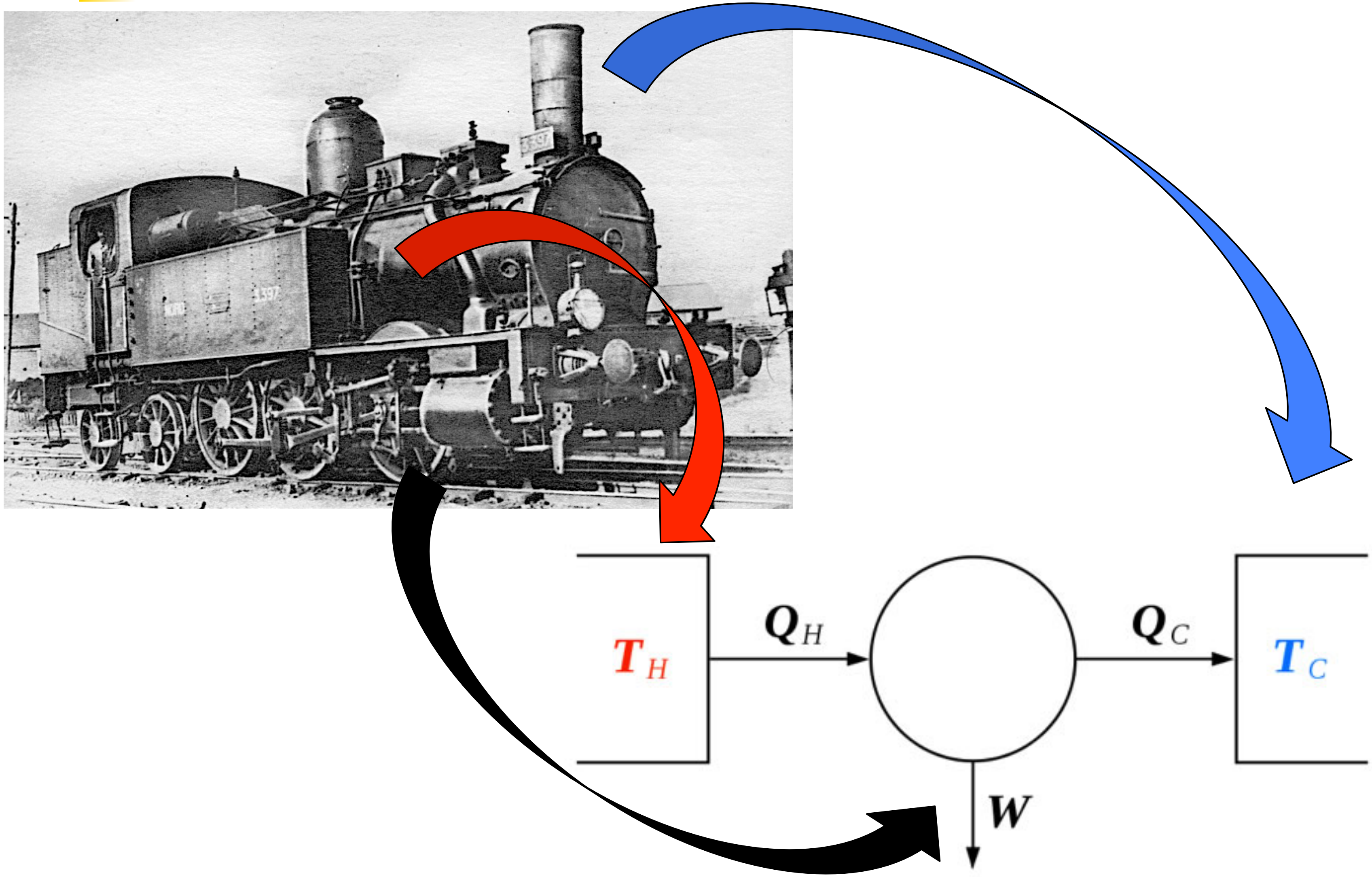
  - représenté par une force extérieure



  - représenté par un autre système

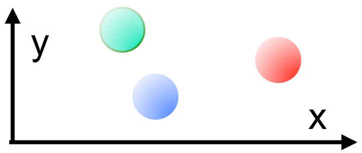


Modélisation

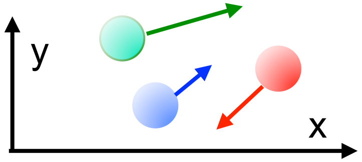


États d'un système classique (non quantique)

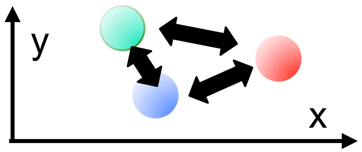
- État d'un système
  - Coordonnées de position de chacun des composants
  - Système de 3 particules isolées en 2 dimensions ➡ x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3



  - Insuffisant car l'évolution du système dépend aussi des vitesses ➡ v_{x1}, v_{y1}, v_{x2}, v_{y2}, v_{x3}, v_{y3}



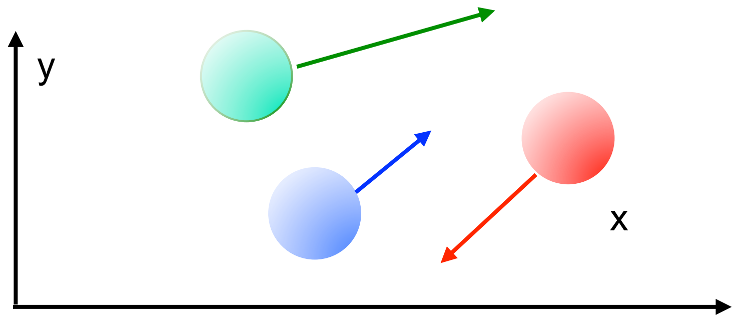
  - Et – éventuellement – des forces entre les particules ➡ F_{12}, F_{23}, F_{13}



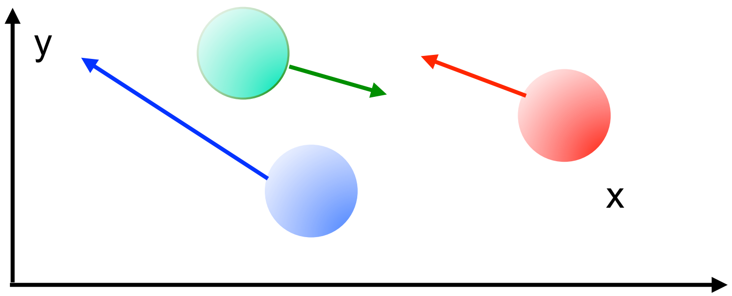
  - lesquelles dépendent en général des positions et parfois aussi des vitesses

États d'un système classique (non quantique)

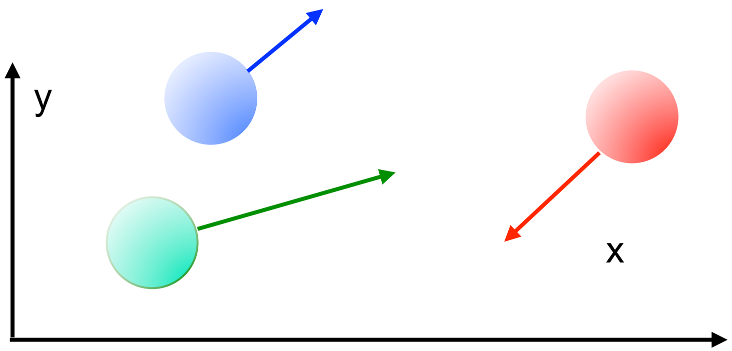
- Définis pour N particules par la donnée des coordonnées q_i [i = 1…N] et des vitesses q'_i (ou des impulsions $p_i = m_i q'_i$)



Un état



Un autre état



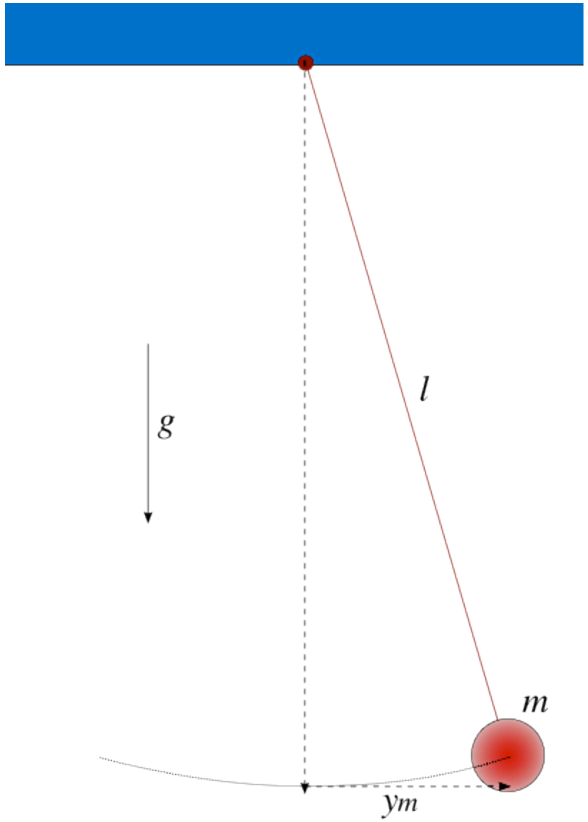
Un autre état encore

L'*ensemble* des états d'un système classique n'a aucune structure particulière

La somme de deux états n'a aucun sens

Pendule simple dans un champ de gravité uniforme

modélisation



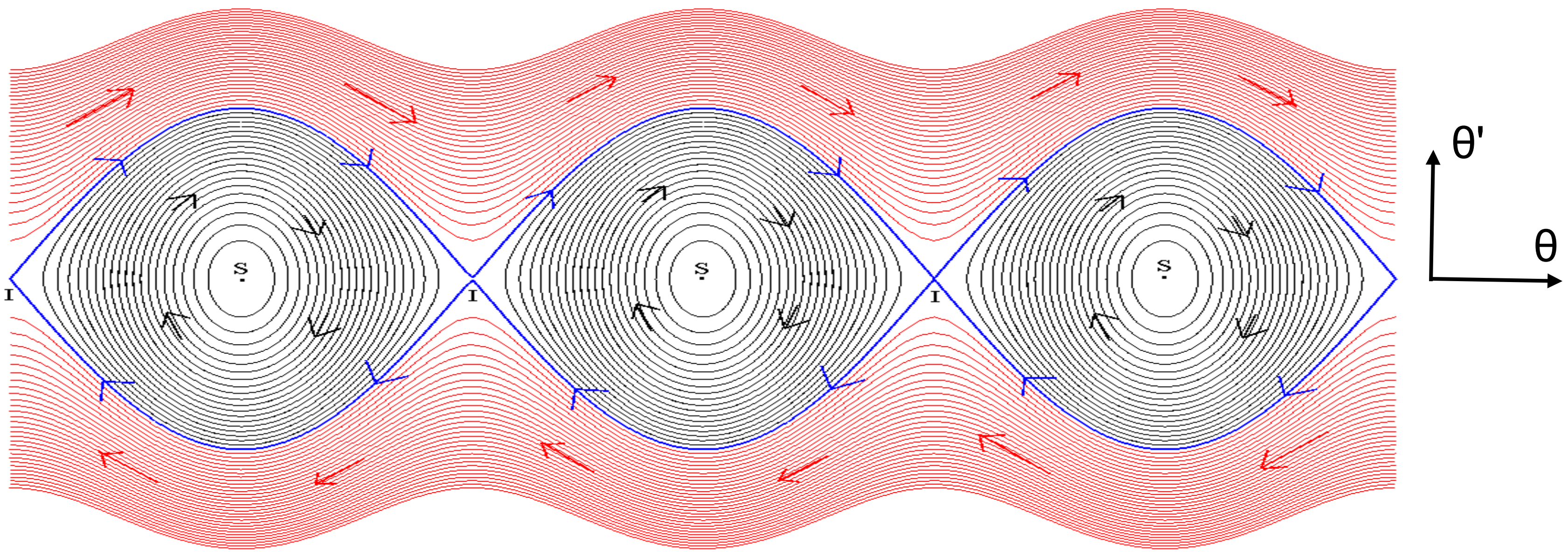
- $\partial^2\theta/\partial t^2 + g/l \sin\theta = 0$ ➡ $\theta(t) = \theta(t_0) \cos \omega(t-t_0)$ pour θ petit

  indépendant de la masse m

  $\omega^2 = g/l$

Espace de phase du pendule simple

- État du système défini par
  - l'angle θ
  - la vitesse angulaire θ' = ∂θ/∂t
- Ensemble de tous les états possibles {θ,θ'} = espace de phase
- Le système parcourt au fil du temps t une trajectoire déterminée par les conditions « initiales » $\theta(t_0)$ et $\theta'(t_0)$



Équations de Newton

$$\mathbf{F = M}\ \gamma$$

- $\gamma = \partial v/\partial t = \partial^2 x/\partial t^2$ ➡ $\partial^2 x/\partial t^2 - F(x,v)/M = 0$
- Équation différentielle du 2° ordre
- ➡ solutions dépendant de 2 conditions « initiales » : $x(t_0)$ et $v(t_0)$ par exemple, ou $x(t_0)$ et $x(t_1)$

- Exemple ultra-simple : particule soumise à une force F constante
- ➡ $\partial^2 x/\partial t^2 = F/M$ ➡ $v = \partial x/\partial t = [F/M]\ t + c_1$ ➡ $x(t) = ½\ [F/M]\ t^2 + c_1 t + c_2$
- ➡ $x(t) = ½\ [F/M]\ (t-t_0)^2 + v(t_0)\ (t-t_0) + x(t_0)$
- ou $x(t) = ½\ [F/M]\ (t-t_0)(t-t_1) + \{\ x(t_0)\ [t-t_1] + x(t_1)\ [t-t_0]\ \}/\{t_0 - t_1\}$

Cela peut devenir très compliqué

- ➡ (systèmes d') équations différentielles ou aux dérivées partielles…
- …qui ne sont pas nécessairement faciles à résoudre
  - mécanique des fluides ➛ équation de Navier-Stokes :

$$\rho\frac{Du}{Dt}=F_x-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(2\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{2}{3}div\,\vec{v}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial x}\right)\right]$$

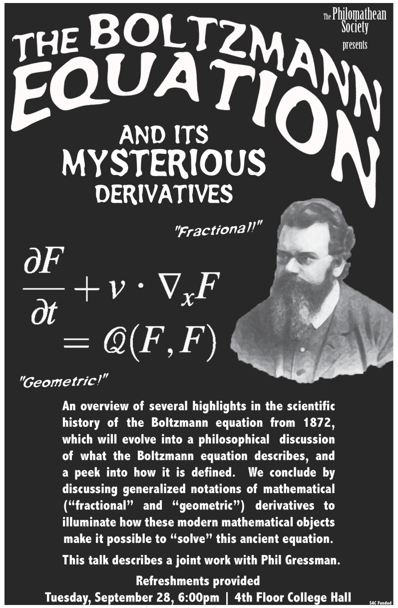
$$\rho\frac{Dv}{Dt}=F_y-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(2\frac{\partial v}{\partial y}-\frac{2}{3}div\,\vec{v}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\mu\left(\frac{\partial v}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial y}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]$$

$$\rho\frac{Dw}{Dt}=F_z-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\left[\mu\left(2\frac{\partial w}{\partial z}-\frac{2}{3}div\,\vec{v}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial x}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial v}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial y}\right)\right] \quad \text{Eq. 2-127}$$

$$with \quad \frac{Du}{Dt}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}+w\frac{\partial u}{\partial z}\right)$$

$$div\,\vec{v}=\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}$$

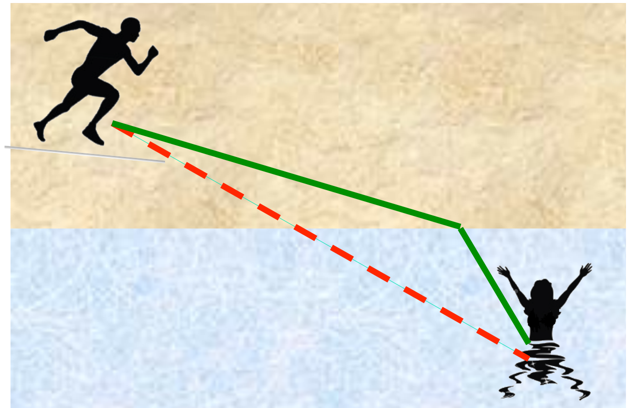
  - physique des gaz, même « parfaits » ➛ équation de Boltzmann ➛
  - électrodynamique ➛ équation de Maxwell



- Principe général : minimisation de l'action
  - ➛ principe de Fermat en optique
  - ➛ principe de Maupertuis en mécanique ➛ ➛ ➛ ➛ intégrales de chemin de Feynman

Principe de moindre action de Maupertuis

- Optique : principe de Fermat
  - *La lumière suit le chemin qui prend le moins de temps*
  - *Analogie*



- Mécanique : principe de moindre action
- « L'**Action** est proportionnelle au produit de la masse par la vitesse et par l'espace. Maintenant, voici ce principe, si sage, si digne de l'Être suprême : lorsqu'il arrive quelque changement dans la Nature, la quantité d'Action employée pour ce changement est toujours la plus petite qu'il soit possible. » (Maupertuis 1744)
- Action $S = \int (E_c - E_p)\,dt$ E_c = énergie cinétique (ex: $\frac{1}{2} MV^2$) E_p = énergie potentielle

La mécanique analytique de Lagrange et de Hamilton

- Newton + Maupertuis ➛ Lagrange :
  - coordonnées généralisées $q(t)$ et leurs dérivées $v = \partial q/\partial t$
  - ➛ fonction de Lagrange $L(q, v) = E_{\text{cinétique}} - E_{\text{potentielle}}$
  - ➛ équations du mouvement (Euler-Lagrange) en minimisant l'action $S = \int L \, dt$

$$\partial L/\partial q = d/dt \, [\partial L/\partial v]$$

dérivées *secondes*

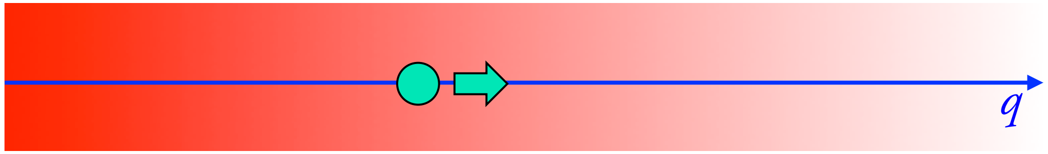
- ou Hamilton :
  - ➛ impulsions généralisées $p = \partial L/\partial v$
  - ➛ fonction de Hamilton $H(p,q) = pv - L = E_{\text{cinétique}} + E_{\text{potentielle}} = E_{\text{totale}}$
  - ➛ équations du mouvement (Hamilton-Jacobi)

$$dq/dt = \partial H/\partial p \qquad \text{et} \qquad dp/dt = -\, \partial H/\partial q$$

dérivées *premières*

La mécanique analytique : cas simplissime

- Point matériel de masse M soumis à une force **F** constante, à 1 dimension

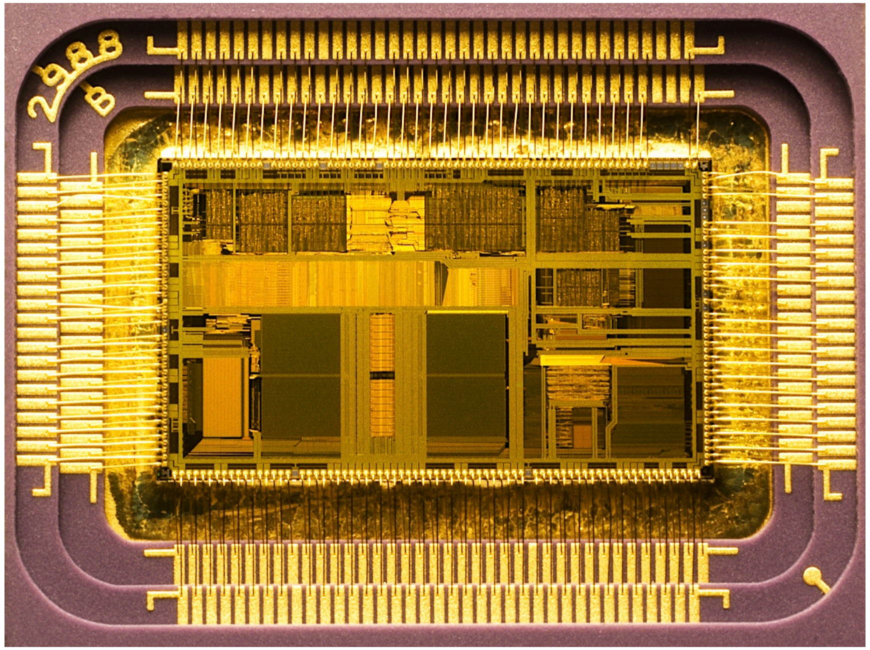


- Newton $\mathbf{F} = M\,\gamma \Leftrightarrow M\,\partial^2 q/\partial t^2 = M\,\partial v/\partial t = \mathbf{F}$ ☛ $v = F/M\ t$ ➡ $q = ½\ F/M\ t^2$
- Lagrange
  - $E_c = ½\,Mv^2$ $\quad E_p = -\,F\,q$ ☛ $L(q,v) = E_c - E_p = ½\,Mv^2 + F\,q$
  - Euler-Lagrange $\quad \partial L/\partial q = d/dt\,[\partial L/\partial v]$
  - ➡ $F = d/dt[\,Mv\,] = M\,dv/dt = M\,\gamma$
- Hamilton
  - $p = \partial L/\partial v = Mv \Leftrightarrow v = p/M$
  - $H(p,q) = E_c + E_p = ½\,M\,[p/M]^2 - Fq$ ☛ $H(p,q) = p^2/2M - Fq$
  - $\partial p/\partial t = -\,\partial H/\partial q = F$ ☛ $p = F\,t$
  - $\partial q/\partial t = \partial H/\partial p = p/M$ ☛ $q = ½\,F/M\,t^2$

Quantique !

La mécanique quantique…

- est à la base de
  - la physique
  - la chimie
  - l'électronique



Processeur Intel 40486 (1990)

- joue un rôle économique prépondérant
  - directement
    - électronique grand public
    - électronique industrielle
    - électronique militaire
  - indirectement
    - communications
    - commerce

New York Stock Exchange

Le cœur de la mécanique quantique

L'ensemble des états possibles d'un système quantique possède une structure d'espace vectoriel sur le corps des nombres complexes

Toute modification d'un système quantique résulte de l'application d'un opérateur faisant passer d'un état à un autre

Heisenberg & Schrödinger

- Matrice M_{mn} ⇌ composantes d'un opérateur **M** dans la base In>
- Diagonalisation de la matrice M ⇌ recherche des vecteurs propres de l'opérateur **M**
- Termes diagonaux ⇌ valeurs propres de l'opérateur **M**
- Valeurs réelles ⇌ opérateur **M** hermitien
- Équation d'évolution iħ d/dt M = [H,M] ⇌ évolution temporelle de <**M**>

- Fonction d'onde Ψ(x,t) ⇌ vecteur Iψ(t)> appartenant à un espace vectoriel
- Différentiation ∂/∂x ⇌ opérateur impulsion **P**
- Différentiation ∂/∂t ⇌ opérateur hamiltonien **H**
- Solutions de l'équation de Schrödinger ⇌ valeurs propres et vecteurs propres de **H**

ÉTATS QUANTIQUES

Nombres complexes

- $z = x + iy$ x, y réels

  partie imaginaire

  $\sqrt{-1}$

  partie réelle

- $\Leftrightarrow z = \rho\, e^{i\varphi}$

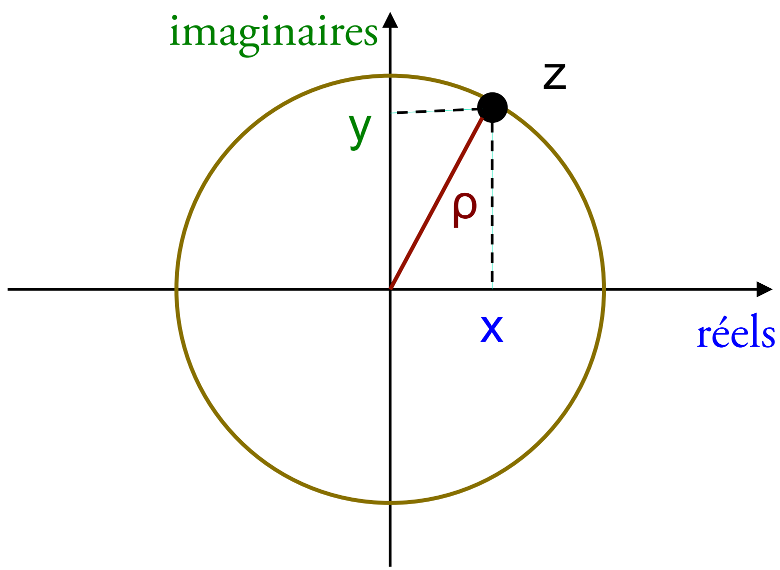
  phase

  module

- (représentation d'Argand)

- $\varphi \to \varphi + 2\pi \Rightarrow z \to z$

- Relation d'Euler : $e^{i\pi} + 1 = 0$



Espaces vectoriels

- Définis sur un corps (en général les nombres réels ou *complexes*) dont les éléments α sont appelés scalaires
- Les éléments de l'espace vectoriel sont des… vecteurs V_1, V_2 …
- Propriétés essentielles:
- La somme de deux vecteurs est un vecteur du même espace

$$V_3 = V_1 + V_2$$

➛ structure de *groupe* pour l'addition

- Le produit d'un vecteur par un scalaire est un vecteur du même espace

$$V_4 = \alpha\, V_1$$

- Exemples
  - Les nombres réels ou complexes eux-mêmes
  - Les fonctions (la somme de deux fonctions est une fonction, le produit d'une fonction par un nombre est une fonction)
  - Les matrices NxM à N lignes et M colonnes
  - Les points de l'espace (physique)
  - Le champ de gravitation, le champ électromagnétique…

Le chat de Schrödinger (1935)

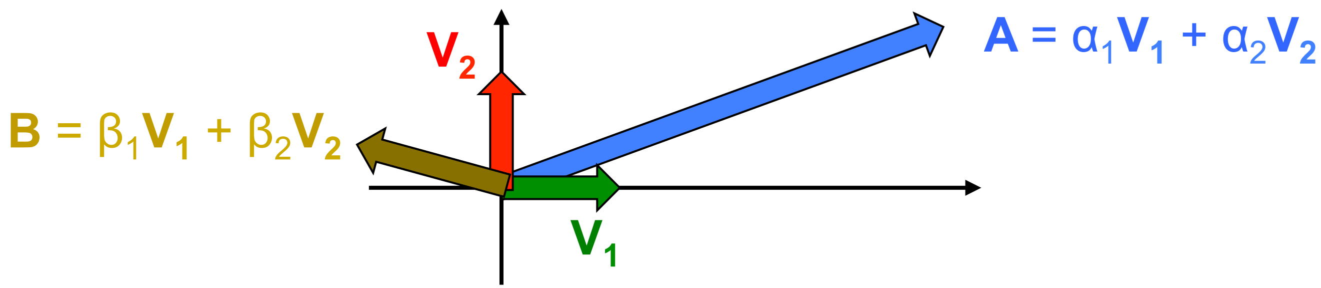
- Toute combinaison linéaire d'états admissibles est un état admissible

- Système dans l'état A ☺
- Système dans l'état B ☺
- ➡ système dans l'état A + B ☺

- ➡ Expérience de pensée de Schrödinger
  - État A : chat vivant
  - État B : chat mort
  - ➡ état A + B ?

Bases dans un espace vectoriel E

- Si toute combinaison linéaire de vecteurs est un vecteur, inversement tout vecteur peut s'écrire comme une combinaison linéaire de vecteurs de base
- Base = ensemble de vecteurs linéairement indépendants à partir desquels tout vecteur peut être obtenu par combinaison linéaire
- Base = V_1, V_2, … ⇒ tout vecteur A peut s'écrire $A = \alpha_1 V_1 + \alpha_2 V_2 + \ldots$
- *Il y a un nombre infini de bases possibles car toute combinaison linéaire des vecteurs de base est aussi une base*
- Mais elles ont toutes le même nombre d'éléments (éventuellement infini, dénombrable ou pas) = la dimension de l'espace vectoriel
- Espace de dimension 2



Dual d'un espace vectoriel E sur un corps K

- Forme linéaire : *fonction* f associant un nombre α (scalaire ∈ K) à un vecteur V

$$f(V) = \alpha$$

- Les formes linéaires constituent aussi un espace vectoriel sur le corps K
  - on peut additionner deux de ces fonctions
  - on peut multiplier chacune de ces fonctions par un nombre (scalaire ∈ K)
- C'est l'espace dual de E, noté E*
- C'est un espace de *même* dimension que E
  - ➡ il existe une bijection entre les formes et les vecteurs
  - ➡ base duale $\{f_1, f_2, f_3 \ldots\}$ d'une base $\{V_1, V_2, V_3 \ldots\}$ de E, telle que $f_1(V_1) = 1$ mais $f_1(V_{i\neq 1}) = 0$
  - autrement dit $f_i(V_j) = \delta_{ij}$ (delta de Kronecker)

- ➡ produit scalaire de deux vecteurs A et B : $A \bullet B = f_A(B) = f_B(A)$
  - ➡ norme |A| d'un vecteur A $\quad |A|^2 = A \bullet A$
  - ➡ vecteurs orthogonaux $\quad A \perp B \Leftrightarrow A \bullet B = 0$

Notation de Dirac

- Vecteur Ψ ➛ ket $|\Psi>$
- Base $| i >$ de l'espace vectoriel

  ➛ $|\Psi> = \Sigma_i \alpha_i | i >$

- Forme linéaire f_Ψ ➛ bra $<\Psi|$
- Base $< j |$ de l'espace dual

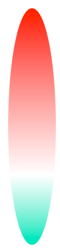
  ➛ $<\Psi| = \Sigma_j \alpha_j^* < j |$

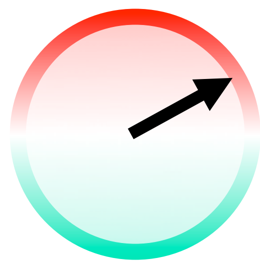
- Produit scalaire ➛ bra-ket $<\Psi_2|\Psi_1>$
- Bases orthonormées $\Leftrightarrow$ $< j | i > = \delta_{ij}$

  ➛ projecteur sur l'état/vecteur $| i >$
- ➡ coefficients $\alpha_i = < i | \Psi >$
- ➡ $|\Psi> = \Sigma_i \alpha_i | i > = \Sigma_i < i | \Psi > | i > = \Sigma_i | i >< i | \; | \Psi >$
- Et normalisation : $<\Psi|\Psi> = \Sigma_i\Sigma_j \alpha_j^*\alpha_i < j | i > = \Sigma_i\Sigma_j \alpha_j^*\alpha_i \delta_{ij} = \Sigma_i \alpha_i^*\alpha_i = \Sigma_i |\alpha_i|^2$

Système quantique à deux états: qubits

- Le plus simple système quantique non trivial
- Espace vectoriel de dimension 2
  - ➛ base formée de deux états :   I1> et I2> par exemple (ou I+> et I-> ou Iperlin> et Ipimpin>)
  - ➛ état quelconque IΨ> = α I1> + β I2>   (normalisation $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$)
- Différence avec un système classique à deux états possibles (1) et (2)





Classiquement, le système se trouve nécessairement *soit* dans l'état 1, *soit* dans l'état 2 : les deux possibilités sont exclusives l'une de l'autre

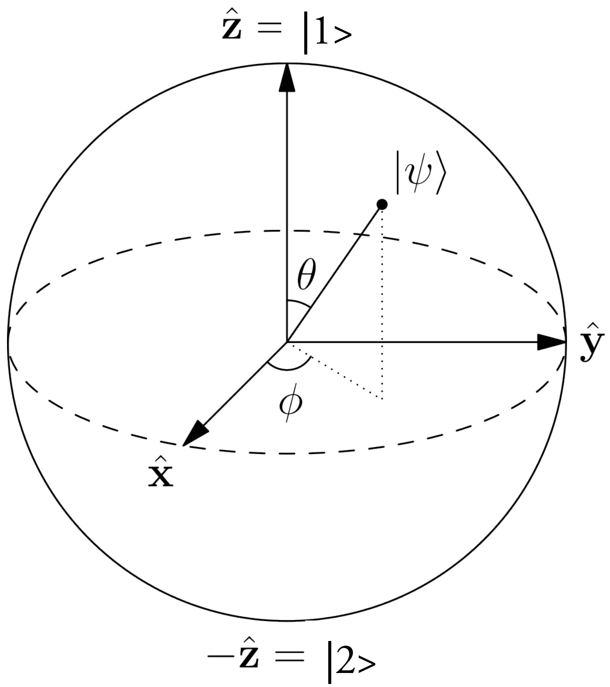
On peut mal *connaître* cet état
☛ probabilités
☛observation (mesure) ➛ état 1 avec la probabilité *p* ou état 2 avec la probabilité *1-p*

Quantiquement, une infinité d'états sont possibles, mais observation (mesure) ➛ état 1 avec la probabilité $|\alpha|^2$ ou état 2 avec la probabilité $1-|\alpha|^2$

Qubits

- Plus précisément
- $|\Psi\rangle = \alpha\, |1\rangle + \beta\, |2\rangle$
  - α et β sont des nombres complexes (*quatre* nombres réels)
  - $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$
  - ☛ on peut prendre α réel positif < 1
  - ☛ $\alpha = \cos \theta/2$
  - ☛ $\beta = e^{i\varphi} \sin \theta/2$
  - ☛ *deux* nombres réels : θ et φ
  - ☛ tous les états peuvent être représentés par un point à la surface d'une sphère de rayon 1
- ☛ sphère de Bloch
  - Deux points antipodaux correspondent à des états orthogonaux (même s'ils sont à 180°)

- Une mesure quantique donne l'un de deux états orthogonaux
  - par exemple $|1\rangle$ avec la probabilité $|\alpha|^2$ ou l'état $|2\rangle$ avec la probabilité $|\beta|^2$
  - ou l'état $|\Psi\rangle$ avec la probabilité 1
  - ou l'état orthogonal $|\Psi'\rangle = \beta|1\rangle - \alpha\, |2\rangle$ avec la probabilité 0



Plusieurs qubits !

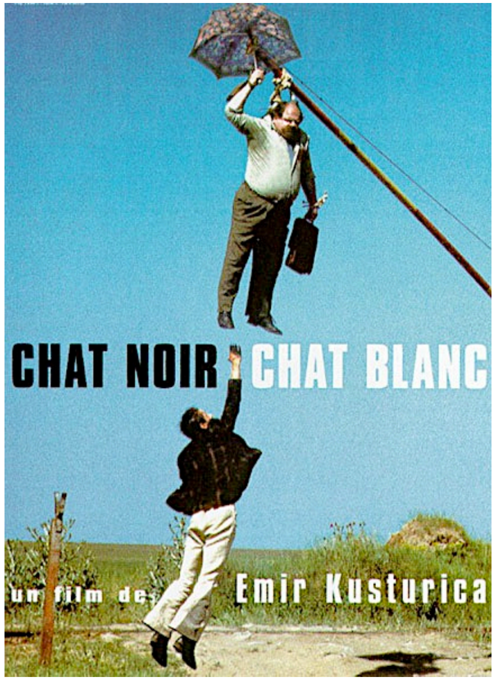
- Espaces vectoriels E_1 et E_2
  - Qubit A : états Ichat> et Ichien>
  - ➡ IA> = α Ichat> + β Ichien>
  - Qubit B : états Inoir> et Iblanc>
  - ➡ IB> = γ Inoir> + δ Iblanc>
- États combinés ➛ espace de Fock

$$E = E_1 \otimes E_2$$

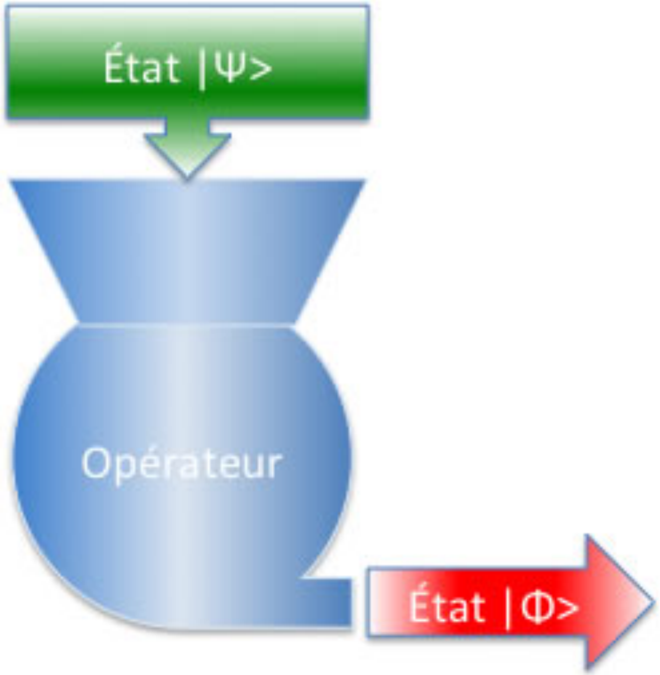
  - éléments (vecteurs, états…) formés par toutes les paires d'éléments pris dans chacun des espaces vectoriels
  - ➡ base formée des 2x2 = 4 états :
  - Ichat noir>
  - Ichat blanc>
  - Ichien noir>
  - Ichien blanc>

IAB> = {α Ichat> + β Ichien>}•{γ Inoir> + δ Iblanc>}

- Certains états de E ne sont PAS de la forme IAB> = {état de E_1}•{état de E_2}
- Ex: Ichat noir> + Ichien blanc>
- ➡ Intrication et non-séparabilité

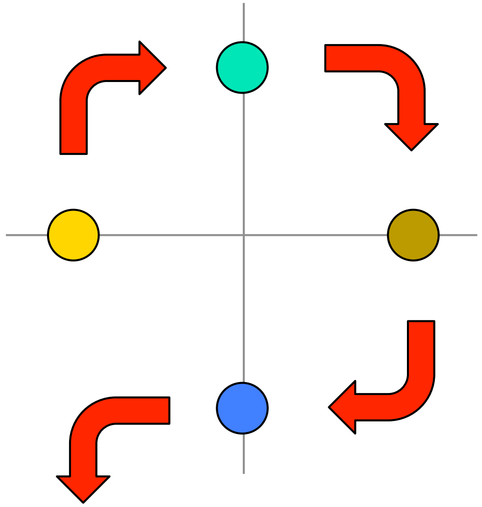


OPÉRATEURS



Opérateurs

- Espace vectoriel E ☛ vecteurs $|\psi_1>$, $|\psi_2>$, $|\psi_3>$ …
- Opérateur **O**
  - agit sur un vecteur quelconque de l'espace E
  - le résultat de son action est un vecteur de l'espace E
  - on peut le définit en indiquant son action sur chacun des vecteur de base ☛ donne son action sur tout vecteur

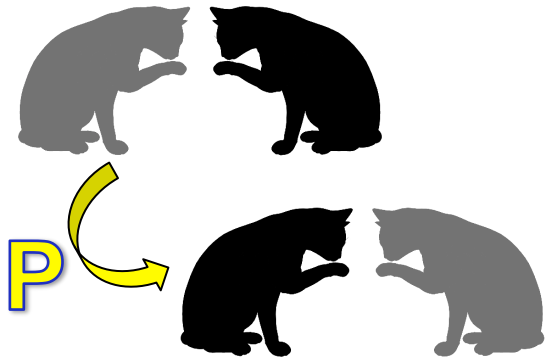


- Opérateur linéaire
  - $\mathbf{O}\{ \alpha|\psi_1> + \beta|\psi_2>\} = \alpha\mathbf{O}|\psi_1> + \beta\mathbf{O}|\psi_2>$
- Action successive de plusieurs opérateurs
  - $\mathbf{O}|\psi_1> = |\psi_2>$ $\mathbf{P}|\psi_1> = |\psi_3>$ $\mathbf{O}|\psi_3> = |\psi_4>$ $\mathbf{P}|\psi_2> = |\psi_5>$
  - $\mathbf{OP}|\psi_1> = \mathbf{O}|\psi_3> = |\psi_4>$
  - $\mathbf{PO}|\psi_1> = \mathbf{P}|\psi_2> = |\psi_5>$

$\Rightarrow$ **OP ≠ PO** en général

L'opérateur : une notion très large

- Opérateur Identité **I**
  - quel que soit le vecteur $|\psi\rangle$, **I** $|\psi\rangle = |\psi\rangle$
- Opérateur Permutation **P**
  - opérateur dont le carré est l'opérateur *Identité* $\mathbf{P}^2 = \mathbf{I}$
  - ☛ *quel que soit* $|\psi_1\rangle$, $\mathbf{P}^2|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle$
  - ☛ si $\mathbf{P}|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$ on a $\mathbf{P}|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$
  - ☛ P permute donc bien $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ (pour toutes les paires $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ bien sûr)



- Et plus généralement: rotations, symétries internes, échange de particules…
- Opérateur d'**évolution** d'un état quantique au cours du temps

$$|\psi(t_1)\rangle \rightarrow \mathbf{U}(t_1,t_2)\, |\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_2)\rangle$$

- Opérateur d'**interaction** : exemple d'un électron dans un atome ➝ états $|E_n\rangle$

$$|E_n\rangle \rightarrow \mathbf{A}_{\text{électromagnétique}}(n,m)\, |E_n\rangle = |E_m\rangle$$

Composantes d'un opérateur [éléments de matrice]

- Supposons choisie une base { I i > } dans l'espace vectoriel E ➛ $I\Psi> = \Sigma_i\ \alpha_i\ I\ i >$
- Opérateur **O** ☛ $\mathbf{O}I\Psi> = I\Phi>$ ➛ $I\Phi> = \Sigma_i\ \beta_i\ I\ i >$
- Quelle relation entre les α_i et les β_i ?
  - $\beta_i = < i \mid \Phi > = < i \mid \mathbf{O} \mid \Psi > = < i \mid \mathbf{O}\ \{ \Sigma_j\ \alpha_j \mid j >\}$
  - $\beta_i = \Sigma_j\ \alpha_j < i \mid \mathbf{O} \mid j >$ puisque **O** est un opérateur linéaire
  - $\beta_i = \Sigma_j\ \alpha_j\ O_{ij}$ en notant O_{ij} le scalaire $< i\ I\ \mathbf{O}\ I\ j>$
- Cette relation entre nombres (scalaires) justifie que l'on *définisse* l'action d'un opérateur **O** sur une forme linéaire (bra) <ΦI de la façon suivante:

$$\{ <\Phi I\ \mathbf{O} \}\ I\Psi> \equiv <\Phi I\ \{ \mathbf{O}\ I\Psi>\} \equiv <\Phi I\ \mathbf{O}\ I\Psi>$$

montrant l'élégance de la notation de Dirac

- $\Rightarrow\ <\Phi|\ \mathbf{O}\ |\Psi> = <\Phi|\ \Sigma_i\ |i><i|\ \mathbf{O}\ \Sigma_j\ |j><j|\ |\Psi> = \Sigma_i\ \Sigma_j <\Phi|i><i|\ \mathbf{O}\ |j><j|\Psi> = \Sigma_i\ \Sigma_j\ \beta_i^*\ O_{ij}\ \alpha_j$

vecteur ligne
matrice carrée
vecteur colonne

Opérateur conjugué

- On a un opérateur **O** tel que **O**|Ψ> = |Φ>
- ☛ existe-t-il un opérateur **O**† tel que <Ψ|**O**† = <Φ| ?
- Oui, mais en général **O**† ≠ **O** et on l'appelle le conjugué (hermitien) de **O**
- Composantes:
  - **O** I i > = I Λ > (NB: I Λ > n'est pas nécessairement un vecteur de base)
  - ⇒ O_{ji} = < j | **O** | i > = < j | Λ > *qui est un scalaire (un nombre complexe)*
  - < i | **O**† = < Λ | *par définition de l'opérateur conjugué*
  - ⇒ $O^{\dagger}_{ij}$ = < i | **O**† | j > = < Λ | j >
  - < Λ | j > = < j | Λ >* *conjugaison complexe*

$$\Rightarrow O^{\dagger}_{ij} = O_{ji}^{*}$$

- Les composantes de l'opérateur conjugué **O**† sont les transposées (i⇌j) conjuguées (*) de celle de l'opérateur **O**

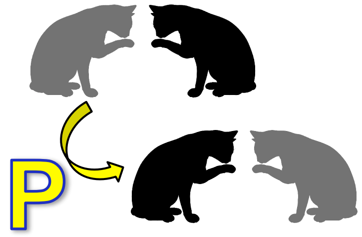
VECTEURS PROPRES VALEURS PROPRES

Vecteurs propres et valeurs propres

- En général $\mathbf{O}|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$ avec $|\psi_1\rangle \neq |\psi_2\rangle$
- Mais il se peut que $\mathbf{O}|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle$ ou plus généralement que $\mathbf{O}|\psi_1\rangle = \lambda|\psi_1\rangle$

  pour un vecteur $|\psi_1\rangle$ bien particulier
- Ce vecteur est un vecteur propre *de l'opérateur **O*** (la notion est relative à un opérateur donné)
- Le scalaire λ est la valeur propre correspondant à *ce* vecteur propre
- On note souvent $|\lambda\rangle$ le vecteur propre correspondant à la valeur propre λ (quand il n'y a pas de risque de confusion)
- L'ensemble des valeurs propres d'un opérateur est appelé le spectre des valeurs propres et il peut être discret (⇌ quantifié) ou continu
  - Un opérateur peut ne pas avoir de vecteur propre (et donc pas de valeurs propres)
  - Un opérateur peut avoir plusieurs vecteurs propres, dont les valeurs propres peuvent être différentes, *ou pas* (dégénérescence)
  - Si $|\psi\rangle$ est un vecteur propre d'un opérateur **O** (avec la valeur propre α) $\beta|\psi\rangle$ est aussi un vecteur propre de **O** (avec la valeur propre $\alpha\beta$)

L'opérateur *Permutation* et les symétries quantiques



- Opérateur permutation **P** pour un état à deux quanta (*Jules* et *Jim*)
  - I*Jules* dans l'état A, *Jim* dans l'état B> = IA,B>
  - I*Jules* dans l'état B, *Jim* dans l'état A> = IB,A>
  - Permutation **P**IA,B> = IB,A> et **P**IB,A> = IA,B>
- *(très général: permutation de positions spatiales, de nombres quantiques, etc. selon ce qui est défini comme état A et comme état B)*
- Quelles sont les valeurs propres λ de **P** ? Et les états propres Iλ> ?
  - **P**Iλ> = λ Iλ> ➡ $\mathbf{P}^2$Iλ> = λ^2 Iλ> = Iλ> (puisque $\mathbf{P}^2$ = **I** = Identité) ➡ $\lambda^2 = 1$ ➡ λ = ±1
  - Iλ> = α IA,B> + β IB,A> ➡ **P**Iλ> = α IB,A> + β IA,B> = ±1 {α IA,B> + β IB,A> }
  - ➡ I+1> = IA,B> + IB,A> (car α = β = 1/√2) ➡ état symétrique
  - ➡ I–1> = IA,B> – IB,A> (car α = – β = 1/√2) ➡ état antisymétrique
- Sous l'échange de deux quanta, les « bons » états quantiques sont soit symétriques (➛ bosons) soit antisymétriques (➛ fermions ➛ principe d'exclusion de Pauli)

Opérateur hermitien

- Un opérateur **O** est hermitien s'il est identique à son conjugué $\mathbf{O}^\dagger$
- Un opérateur hermitien dans un espace vectoriel de dimension n
  - possède **n** vecteurs propres
  - les valeurs propres correspondantes sont réelles
  - les vecteurs propres sont orthogonaux
  - ⇒ ils forment une base de l'espace vectoriel

⇒importance essentielle en mécanique quantique

- Si $\mathbf{O} = -\mathbf{O}^\dagger$, on dit que **O** est anti-hermitien
- Si $\mathbf{O}\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{I}$, on dit que **O** est unitaire (de même que $\mathbf{O}^\dagger$ bien sûr)

Tournent, tournent les qubits !

- Qubit: système à deux états ➛ IΨ> = α I1> + β I2> , ou IΦ> = γ I1> + δ I2>

- Passer du qubit IΨ> au qubit IΦ> ➡ application d'un opérateur **R** tel que

  RIΨ> = IΦ>

  que l'on peut voir comme une rotation dans l'espace des qubits

- On peut noter IΨ> = (α,β) et IΦ> = (γ,δ) et dans ce cas **R** est une matrice 2x2 à coefficients complexes

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

- Mais pas n'importe quelle matrice!
  - elle doit conserver la norme $|\alpha|^2+|\beta|^2 = 1 = |\gamma|^2+|\delta|^2$
  - elle doit posséder un inverse $\mathbf{R}^{-1}$ de sorte que $\mathbf{R}^{-1}$IΦ> = IΨ>
  - ➡ **R** est un opérateur unitaire [$\mathbf{R}\mathbf{R}^{\dagger} = \mathbf{I}$] ⇔ $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^{\dagger}$

Matrices de Pauli

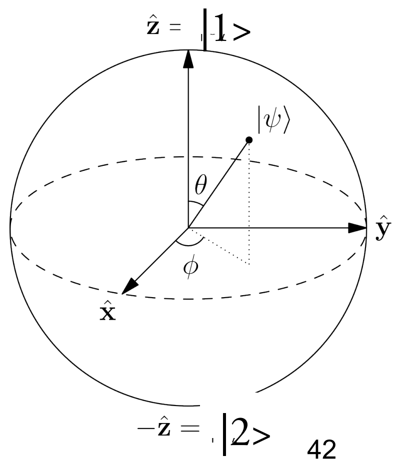
- ➡ la matrice de rotation est de la forme $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$
- Ces matrices 2x2 unitaires de déterminant 1 forment un groupe, appelé SU(2)
- Elles sont engendrées par trois matrices, les matrices de Pauli

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

- Subtilité: les matrices $i\sigma$ engendrent l'algèbre $\mathfrak{su}_2$,non le groupe
- Ces trois matrices ne sont pas indépendantes :
  - $\sigma_1\sigma_2 = i\,\sigma_3$ $\sigma_2\sigma_3 = i\,\sigma_1$ $\sigma_3\sigma_1 = i\,\sigma_2$
  - $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \mathbf{I}$
- *Similarité entre direction dans l'espace des qubits [2 dimensions complexes] et l'espace physique [3 dimensions réelles]*

Vecteurs propres et valeurs propres des σ_i

- Vecteur $|\Psi\rangle = \alpha\,|1\rangle + \beta\,|2\rangle$ tel que $\sigma_3\,|\Psi\rangle = \lambda\,|\Psi\rangle$
- ➡ $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \alpha = \lambda\alpha \\ \beta = -\lambda\beta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda = 1 \to \beta = 0 \to \alpha = 1 \\ \lambda = -1 \to \alpha = 0 \to \beta = 1 \end{cases}$
  - ☛ vecteur propre $|1\rangle$ de valeur propre +1 et vecteur propre $|2\rangle$ de valeur propre –1
  - ☛ $|1\rangle$ = « spin +z » et $|2\rangle$ = « spin –z » et $\sigma_3 \equiv \sigma_z$
- Et σ_1 ? ➡ $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \beta = \lambda\alpha \\ \alpha = \lambda\beta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda = 1 \to \alpha = \beta = 1/\sqrt{2} \\ \lambda = -1 \to \alpha = -\beta = 1/\sqrt{2} \end{cases}$
  - ☛ vecteurs propres $\{|1\rangle \pm |2\rangle\}/\sqrt{2}$ de valeurs propres ±1 (aussi)
- Rappel (sphère de Bloch)
  - ☛ $\alpha = \cos\theta/2$ et $\beta = e^{i\varphi}\sin\theta/2$ ☛ $\theta = 90°$ et $\varphi = 0°$ ou $180°$
  - ☛ « spin +x » et « spin –x » et $\sigma_1 \equiv \sigma_x$



Il est pratique, mais risqué, de visualiser $|1\rangle$ comme une petite flèche pointant vers le haut: c'est *aussi* une petite flèche pointant *à la fois* vers l'avant et vers l'arrière.

OBSERVABLES

Observables

- En mécanique quantique
  - les états d'un système sont représentés par les vecteurs d'un espace vectoriel complexe
  - les quantités observables sont représentées par les opérateurs hermitiens de cet espace
  - les résultats d'une observation (mesure) correspondent aux valeurs propres de l'opérateur
- Deux possibilités
  - l'état du système *est* un vecteur propre $| \lambda_i >$ de l'opérateur ➛ le résultat de l'observation est la valeur propre λ_i correspondante
  - l'état du système *n'est pas* un vecteur propre ➛ il est une combinaison linéaire de vecteurs propres (puisqu'ils forment une base)

$$|\psi> = \Sigma_i \, \alpha_i \, | \lambda_i >$$

  - et le résultat de l'observation est l'une des valeurs propres λ_i avec la probabilité $|\alpha_i|^2$
- Dans les deux cas, l'état du système *après* la mesure est $| \lambda_i >$

Ensemble (complet) d'observables qui commutent

- Deux opérateurs **L** et **M** *peuvent* avoir les mêmes vecteurs propres
  - **L** I i > = λ_i I i > pour tous les I i >
  - **M** I i > = μ_i I i >
- Dans ce cas, **L** et **M** commutent:
  - **ML** I i > = **M** (λ_i I i >) = $\mu_i\lambda_i$ I i > = **LM** I i > ⇒ [**L**,**M**] = 0
  - Pour pinailler, on vient de démontrer que [**L**,**M**] I i > = 0 pour tout I i >, donc pour toute combinaison linéaire Iψ> de vecteurs I i >, donc que [**L**,**M**] Iψ> = 0 pour tout vecteur Iψ>, ce qui est la définition d'un opérateur nul
- ☛ Quand des observables commutent, les opérations de mesure peuvent être faites dans n'importe quel ordre
- ☛ N observables qui commutent deux à deux possèdent une base commune de vecteurs propres, avec des valeurs propres différentes
- ☛ il est judicieux d'étiqueter les états du système par les valeurs propres de chacune des observables: Iλ_i , μ_j , ν_k , ω_l , …>
- L'ensemble de ces observable est complet si un jeu de valeurs propres spécifie *complètement* un état quantique du système, par ex In,m,l,s> pour l'atome d'hydrogène

Observables et valeurs moyennes

- On s'intéresse à une observable **L**
- Ses vecteurs propres sont $| \lambda_i >$ avec les valeurs propres λ_i : $\mathbf{L}| \lambda_i > = \lambda_i | \lambda_i >$
- Système dans l'état $|\psi> = \Sigma_i \alpha_i | \lambda_i >$
- ➡ une mesure donne la valeur propre λ_i avec la probabilité $P(\lambda_i) = |\alpha_i|^2 = \alpha_i^* \alpha_i$
- Sur un *grand nombre* de mesures, on observe *en moyenne*
- $<\lambda> = \Sigma_i \lambda_i P(\lambda_i) = \Sigma_i \lambda_i \alpha_i^* \alpha_i$
- Rappel: $\alpha_i = < \lambda_i | \psi >$ et $\alpha_i^* = < \psi | \lambda_i >$
- ➡ $<\lambda> = \Sigma_i \lambda_i < \psi | \lambda_i > < \lambda_i | \psi >$
- ➡ $<\lambda> = \Sigma_i < \psi | \mathbf{L} | \lambda_i > < \lambda_i | \psi >$
- ➡ $<\lambda> = < \psi | \mathbf{L} \Sigma_i | \lambda_i > < \lambda_i | \psi >$

➡ $<\lambda> = < \psi | \mathbf{L} | \psi >$

ÉVOLUTION

Évolution au cours du temps d'un système quantique

- Système quantique ➛ espace vectoriel E
- État au temps t_1 ➛ vecteur $|\psi(t_1)>$
- État au temps t_2 ➛ vecteur $|\psi(t_2)>$
- ➡ il doit existe un opérateur **U** tel que **U** $|\psi(t_1)> = |\psi(t_2)>$

- Il s'avère que cet opérateur **U** (qui dépend des temps t_1 et t_2) doit être
  1. linéaire
  2. **unitaire** [$\mathbf{U^\dagger U = I}$]
  3. identique pour tous les vecteurs

- sinon on se heurte à des difficultés avec la causalité, avec l'interprétation probabiliste, ou avec les observations
- **U** unitaire ➛ $<\varphi(t_2)|\psi(t_2)> = <\varphi(t_1)|\psi(t_1)>$
- En particulier des états orthogonaux (physiquement distincts) demeurent orthogonaux

Opérateur hamiltonien

- Soit un système dans l'état $|\psi(0)\rangle$ au temps $t_1 = 0$, et dans l'état $|\psi(t)\rangle$ au temps t

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$$

- Pour un temps $t = \varepsilon$ infinitésimalement près de $t = 0$, $\mathbf{U}(t)$ peut se développer en série :

$$\mathbf{U}(\varepsilon) = \mathbf{U}(0) + \varepsilon \bullet \mathbf{o}\text{pérateur} + \varepsilon^2 \bullet \mathbf{o}\text{pérateur} + \ldots$$

- $\mathbf{U}(0) = \mathbf{I}$, et pour des raisons historiques ☺ on écrit la série comme:

$$\mathbf{U}(\varepsilon) = \mathbf{I} - i/\hbar\, \varepsilon \bullet \mathbf{H} + \ldots$$

  - ➡ $\mathbf{U}^\dagger(\varepsilon) = \mathbf{I} + i/\hbar\, \varepsilon \bullet \mathbf{H}^\dagger + \ldots$
  - ➡ $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}(\varepsilon) = [\, \mathbf{I} + i/\hbar\, \varepsilon \bullet \mathbf{H}^\dagger + \ldots] \,[\mathbf{I} - i/\hbar\, \varepsilon \bullet \mathbf{H} + \ldots] = \mathbf{I} + i/\hbar\, \varepsilon \bullet [\, \mathbf{H}^\dagger - \mathbf{H}\,] + \ldots = \mathbf{I}$
  - ➡ $\mathbf{H}^\dagger - \mathbf{H} = 0$

- ➡ **H** est un opérateur hermitien
- Par comparaison avec la physique classique, cet opérateur est l'analogue de l'hamiltonien et ses valeurs propres sont les énergies possibles du système

Équation de Schrödinger

- Partons de $|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$
- ➡ $|\psi(\varepsilon)\rangle = \mathbf{U}(\varepsilon)\,|\psi(0)\rangle = [\,\mathbf{I} - i/\hbar\ \varepsilon \bullet \mathbf{H}\,]\,|\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle - i/\hbar\ \varepsilon \bullet \mathbf{H}\,|\psi(0)\rangle$
- ➡ $[|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle\,]/\varepsilon \equiv d/dt\,|\psi(0)\rangle = -\,i/\hbar\ \mathbf{H}\,|\psi(0)\rangle$
- Mais t=0 ne jouait pas de rôle particulier

$$➡ \ d/dt\,|\psi(t)\rangle = -\,i/\hbar\ \mathbf{H}\,|\psi(t)\rangle$$

ce qui est l'équation de Schrödinger

- L'opérateur hamiltonien **H** est le même pour tous les états
- Procédure
  - se donner un opérateur **H**
  - résoudre l'équation aux valeurs propres $\mathbf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$
  - ➛ valeurs propres (énergies) E_i et états propres correspondants $|E_i\rangle$
  - ➛ état quelconque $|\psi(t)\rangle = \Sigma_i\ \alpha_i(t)\,|E_i\rangle = \Sigma_i\ \alpha_i(0)\ \exp\{-\,i/\hbar\ E_i\ t\}\ |E_i\rangle$

Merci de votre attention !