Premier postulat Définition de l'état quantique ou principe de superposition

> A tout système quantique on peut associer un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. L'état du système est alors décrit par un élément $|\psi\rangle$ de $\mathcal{H}$, qu'on appelle vecteur d'état ou vecteur ket en notation de Dirac.

Rappel *Un espace de Hilbert est un espace vectoriel complexe (ie un ensemble (H) dôté d'une loi de composition interne ($+ : H \times H \to H$) et d'une loi de composition externe ($. : \mathbb{C} \times H \to H$)) avec un produit scalaire $(,) : H \times H \to \mathbb{C}$. L'espace peut être de dimension finie ou infinie.*

Cette structure implique le théorème de superposition : si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont deux états du système (ie deux vecteurs de $\mathcal{H}$), alors $|\psi_{1+2}\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ est aussi un état possible du système.

Notation de Dirac

Soit $|\psi\rangle$ un élément de $\mathcal{H}$. On appelle $|\psi\rangle$ un *ket*.

On appelle *bra* l'ensemble des formes linéaires sur $\mathcal{H}$, ie des opérateurs $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$. En particulier, à chaque ket $|\psi\rangle$ est associé un bra $\langle\psi|$ tel que $\forall\, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\psi\, |\phi\rangle = (\psi, \phi)$, où (ψ, ϕ) est le produit scalaire entre $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$.

Exemples

1. Pour décrire le mouvement d'une particule, on prend $\mathcal{H} = L_2\left(\mathbb{R}^3\right)$ (ensemble des fonctions de $\mathbb{R}^3$ dans $\mathbb{C}$ de carré intégrable). C'est un espace de dimension infini et on note ses éléments $\psi : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{C} \\ \vec{r} & \to & \psi(\vec{r}) \end{array}$. Ces éléments sont appelés fonctions d'onde.
   La loi de composition interne est simplement la somme de fonctions :
   $$\psi_1 + \psi_2 : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{C} \\ \vec{r} & \to & \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r}) \end{array}.$$
   Le produit externe est simplement le produit de la fonction par un complexe :
   $$\lambda\psi : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{C} \\ \vec{r} & \to & \lambda\psi(\vec{r}) \end{array}.$$
   Le produit scalaire est défini par :
   $$(\psi_1, \psi_2) = \langle\psi_1\, |\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})d^3\vec{r}.$$
2. Pour décrire les degrés de libertés interne d'une particule dans l'expérience de Stern et Gerlach, on prend $\mathcal{H} = \mathbb{R}^2$. C'est un espace de dimension 2 et on prend une base $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. On note alors les éléments de X sous la forme $|\psi\rangle = \psi^+ |+\rangle + \psi^- |-\rangle = \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix}$, avec $\psi^+ \in \mathbb{R}$ et $\psi^- \in \mathbb{R}$.
   La composition interne est alors simplement la somme de vecteurs : $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = \left(\psi_1^+ + \psi_2^+\right)|+\rangle + \left(\psi_1^- + \psi_2^-\right)|-\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1^+ + \psi_2^+ \\ \psi_1^- + \psi_2^- \end{pmatrix}$.
   Le produit externe est simplement le produit du vecteur par un complexe : $\lambda\,|\psi\rangle = \lambda\psi^+ |+\rangle + \lambda\psi^- |-\rangle = \begin{pmatrix} \lambda\psi^+ \\ \lambda\psi^- \end{pmatrix}$.
   Le produit scalaire est simplement le produit hermitien entre deux vecteurs : $(\psi_1.\psi_2) = \langle\psi_1\, |\psi_2\rangle = \left(\psi_1^+\right)^* \psi_2^+ + \left(\psi_1^-\right)^* \psi_2^-$.
3. On peut assembler plusieurs espaces de Hilbert ensemble par un produit tensoriel :
   - Pour décrire une particule dôtée d'un degré de liberté interne de spin et d'un mouvement orbitalaire, on prend $\mathcal{H} = L_2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \mathbb{R}^2$ (avec $L_2\left(\mathbb{R}^3\right)$ pour le mouvement orbitalaire et $\mathbb{R}^2$ pour le spin).
   - Pour décrire le spin de deux particules, on prend $\mathcal{H} = \mathbb{R}^2 \otimes \mathbb{R}^2$.

Deuxième postulat Principe de correspondance

> Toute grandeur O du système pouvant faire l'objet d'une mesure est reliée à un opérateur hermitique
> $$\hat{O} : \begin{array}{ccc} \mathcal{H} & \to & \mathcal{H} \\ \psi & \to & \hat{O}(\psi) \end{array}.$$
> Ces opérateurs sont appelés les *observables* du système.

Remarque Il faut bien distinguer O, grandeur physique du système (qui est un nombre réel), de $\hat{O}$, opérateur hermitien, qui agit sur $\mathcal{H}$. Le lien entre $\hat{O}$ et O est donné par le troisième postulat.

Rappel *opérateur hermitique*

Un opérateur $\hat{O}$ est hermitique si et seulement si il est égal à son transconjugué, ce qu'on note $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$. L'adjoint d'un opérateur $\hat{A}$ est a priori un opérateur $\hat{B}$ tel que pour tout ψ_1, ψ_2, on ait $\left(\psi_1, \hat{A}\left(\psi_2\right)\right) = \left(\hat{B}\left(\psi_1\right), \psi_2\right)$ (ou en notation de Dirac, $\langle\psi_1|\left(\hat{A}\left|\psi_2\right\rangle\right) = \left(\langle\psi_1|\,\hat{B}\right)\left|\psi_2\right\rangle$). On montre facilement que $\hat{B} = {}^t\bar{\hat{A}}$.

Tout opérateur hermitique est diagonalisable dans une base orthonormale (ie il existe une base $\{|\psi_i\rangle\}$ de $\mathcal{H}$ sur laquelle $\hat{O}$ est diagonal et telle que $\langle\psi_i\,|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$) et ses valeurs propres sont réelles : c'est le théorème spectral.

Conséquence :

Tout vecteur d'état peut s'écrire dans la base propre de $\hat{O}$ comme : $|\psi\rangle = \sum \mu_i\,|\phi_i\rangle$, où $|\phi_i\rangle$ est le vecteur propre de $\hat{O}$ associé à la valeur propre a_i (ie $\hat{O}\,|\phi_i\rangle = a_i\,|\phi_i\rangle$) et $\mu_i = \langle\psi\,|\phi_i\rangle$.

Exemples

1. Dans $\mathcal{H} = L_2\left(\mathbb{R}^3\right)$, on définit $\hat{x}$ l'opérateur position suivant x par $\hat{x}$: $\begin{array}{ccc} \mathcal{H} & \to & \mathcal{H} \\ |\psi\rangle & \to & x\,|\psi\rangle \end{array}$ avec $x\,|\psi\rangle$: $\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{C} \\ \overrightarrow{\rho} & \to & \rho_x\psi(\overrightarrow{\rho}) \end{array}$ (idem avec y et z).

   Dans $\mathcal{H} = L_2\left(\mathbb{R}^3\right)$, on définit $\hat{p_x}$ l'opérateur impulsion suivant x par $\hat{p_x}$: $\begin{array}{ccc} \mathcal{H} & \to & \mathcal{H} \\ |\psi\rangle & \to & \hat{p_x}\,|\psi\rangle \end{array}$ avec $\hat{p_x}\,|\psi\rangle$: $\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{C} \\ \overrightarrow{\rho} & \to & -i\hbar\partial_x\psi(\overrightarrow{\rho}) \end{array}$ (idem avec y et z).
2. Dans $\mathcal{H} = \mathbb{R}^2$ décrivant un spin 1/2, on définit S_z l'opérateur de spin suivant z par $\hat{S}_z\,|+\rangle = +\frac{\hbar}{2}\,|+\rangle$ et $\hat{S}_z\,|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|-\rangle$.
3. Dans un produit tensoriel d'espace de Hilbert, on peut définir un opérateur comme produit tensoriel d'opérateurs agissant sur chacun des sous espaces
   - Pour décrire le spin de deux particules dans $\mathcal{H} = \mathbb{R}^2 \otimes \mathbb{R}^2$, on peut définir $S_{1,z} = S_z \otimes I_d$ agissant uniquement sur la particule 1 ou $S_{2,z} = I_d \otimes S_z$ agissant uniquement sur la particule 2. On peut aussi définir $S_{tot,z} = S_{1,z} + S_{2,z}$ agissant sur les deux particules à la fois.
   - Pour une particule dans $\mathcal{H} = L_2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \mathbb{R}^2$ ayant à la fois un spin et un mouvement orbitalaire, on peut définir les grandeurs sur mouvement comme $\hat{p_x} \otimes I_d$ par exemple. On peut aussi considérer des opérateurs agissant sur les deux sous espaces à la fois, comme dans le cas de l'interaction Spin - Orbite.

Troisième postulat Postulat de la mesure

> La mesure de la grandeur du système associée à l'observable $\hat{O}$ ne peut aboutir qu'à une valeur propre a_i de cet observable.
>
> La valeur moyenne de la mesure de $\hat{O}$ sur un état $|\psi\rangle$ est donnée par $\langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle$.

Conséquences

- Si l'état du système avant mesure est un état propre $|\phi_i\rangle$ de $\hat{O}$, alors la mesure de O donne de manière certaine a_i.
- Si l'état du système n'est pas un état propre de $\hat{O}$, alors la mesure de O ne peut donner que $a_j \in Sp(\hat{O})$ mais ce résultat peut changer si on refait l'expérience (cependant, ce sera toujours une valeur propre de $\hat{O}$). La valeur moyenne des résultats sur un grand nombre d'expérience sera donc une combinaison linéaire des a_i et vaut $\langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle$.

Exemples

1. Pour décrire la position suivant x d'une particule, on utilise l'observable $\hat{x}$, dont les vecteurs propres sont les $\{|x_0\rangle\}$ avec $x_0(x) = \delta(x - x_0)$. Les seules valeurs de la position mesurables sur une mesure sont donc les $\{x_0\}$. La valeur moyenne de la position est donnée par $\langle x \rangle = \int x \, |\psi(x)|^2 \, dx$.
   Les vecteurs propres de $\hat{p_x}$ sont les $|p_{x,i}\rangle$ avec $p_{x,i}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ip_{x,i}x/\hbar}$. Les seules valeurs de la position mesurables sur une mesure sont donc les $\{x_0\}$. La valeur moyenne de l'impulsion suivant x est donc donnée par $\langle p_x \rangle = -i\hbar \int \psi^*(x) \, (\partial_x \psi(x)) \, dx$
2. Si on prépare un système de spin dans l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$, la valeur moyenne de spin suivant z est donnée par $\frac{1}{2} \left(\langle + | + \langle - |\right) S_z \left(|+\rangle + |-\rangle\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 0 + 0 + \left(-\frac{1}{2}\right)\right) = 0$.

Quatrième postulat Postulat de Born

Cas discret :

Lors d'une mesure sur $|\psi\rangle$ d'une grandeur discrête, la probabilité de trouver la valeur a_i est égale à $|\langle \psi \, |\phi_i\rangle|^2$.

Cas continu :

Lors d'une mesure sur $|\psi\rangle$d'une grandeur continue, la probabilité de trouver la valeur α à $d\alpha$ près est égale à $|\langle \psi \, |\phi(\alpha)\rangle|^2 \, d\alpha$.

Exemples

1. La probabilité de mesurer la particule entre x_0 et $x_0 + dx_0$ est donnée par $|\langle \psi \, |x_0\rangle|^2 \, dx_0 = \left|\int \psi^*(x) \delta(x - x_0)\right|^2 dx = |\psi(x_0)|^2 \, dx_0$.
   La probabilité de trouver la valeur $p_{x,i}$ à $dp_{x,i}$ près sur une mesure de $|\psi\rangle$ vaut donc $|\langle \psi \, |p_{x,i}\rangle|^2 \, dp_{x,i} = \frac{1}{L} \left|\int e^{ip_{x,i}x/\hbar} \psi^*(x) dx\right|^2 dp_{x,i}$.
2. On prépare un spin $\frac{1}{2}$ dans l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |+\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}} |-\rangle$. La probabilité de mesurer $+\frac{\hbar}{2}$ vaut $|\langle \psi \, |+\rangle|^2 = \frac{1}{5}$. La probabilité de mesurer $-\frac{\hbar}{2}$ vaut $|\langle \psi \, |-\rangle|^2 = \frac{4}{5}$.

Cinquième postulat Réduction du paquet d'onde

Si la mesure donne pour résultat a_i, alors le vecteur d'état du système est projeté sur le sous espace propre E_{a_i} associé à la valeur mesurée a_i.

Conséquence

Si on refait une mesure juste après avoir trouvé a_i, on trouvera obligatoirement a_i. Par contre, si on laisse l'état évoluer un certain temps, rien n'oblige à retrouver la même valeur.

Exemple

1. Si on trouve la particule entre x_0 et $x_0 + dx_0$, alors on trouvera la particule entre x_0 et $x_0 + dx_0$ juste après la mesure.
2. Si on trouve $+\frac{\hbar}{2}$ juste après une mesure de spin, alors la particule se trouve dans l'état $|+\rangle$ juste après la mesure.

Sixième postulat Évolution du paquet d'onde

L'évolution de l'état d'un système au cours du temps est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} \, |\psi\rangle,$$

où $\hat{H}$ désigne le hamiltonien du système, c'est à dire l'observable associée à l'énergie.