UPMC-Paris Sorbonne Universités — ENS Cachan
L3, parcours Phytem — Module LP358A, Cohésion de la matière

Prérequis

1 Les outils mathématiques de la mécanique quantique

Voir: Mécanique quantique - Tome I, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë: **chapitre II**.

Notions (supposées acquises) : espace vectoriel, opérateur linéaire, bases orthonormées discrètes et continues (produit scalaire, relation de fermeture), notation de Dirac, kets, bras, projecteurs, opérateurs hermitiques, représentation (cas particuliers des représentations $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ et $\{|\mathbf{p}\rangle\}$), équations aux valeurs propres, observables, produit tensoriel d'espaces d'états.

Ensembles d'observables qui commutent

a. Théorèmes importants

α. *Théorème I*

Si deux opérateurs A et B commutent, et si $|\Psi\rangle$ est un vecteur propre de A, alors $B|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de A, avec la même valeur propre.

Deux cas peuvent se présenter :

- Si a est une valeur propre non-dégénérée, tous les vecteurs propres qui lui sont associés sont par définition colinéaires, et $B|\Psi\rangle$ est nécessairement proportionnel à $|\Psi\rangle$. Donc $|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de B.
- Si a est une valeur propre dégénérée, on peut seulement dire que $B|\Psi\rangle$ appartient au sous-espace propre ξ_a de A, correspondant à la valeur propre a. Donc, quel que soit $|\Psi\rangle \in \xi_a$, on a $|B\Psi\rangle \in \xi_a$.

Autrement dit, si deux opérateurs A et B commutent, tout sous-espace propre de A est globalement invariant sous l'action de B.

β. *Théorème II*

Si deux observables A et B commutent, et si $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont deux vecteurs propres de A de valeurs propres différentes, l'élément de matrice $\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle$ est nul.

Démonstration : $[A, B]$ étant nul, on a: $\langle\Psi_1|(AB - BA)|\Psi_2\rangle = 0$.
Si $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont vecteurs propres de A, on peut écrire:
$A|\Psi_1\rangle = a_1|\Psi_1\rangle$
$A|\Psi_2\rangle = a_2|\Psi_2\rangle$
A étant de plus hermitique, on obtient:
$\langle\Psi_1|AB|\Psi_2\rangle = a_1\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle$ et
$\langle\Psi_1|BA|\Psi_2\rangle = a_2\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle$
soit :

$$(a_1 - a_2)\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle = 0$$

Donc si $a_1 \neq a_2$,

$$\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle = 0$$

γ. *Théorème III*

Si deux observables A et B commutent, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états constituée par des vecteurs propres communs à A et B.

Puisque A est une observable, il existe (au moins) un système[1] orthonormé de vecteurs propres de A qui forme une base dans l'espace des états ξ :

$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ où $n = 1, 2, \ldots$ et $i = 1, 2, \ldots, g_n$

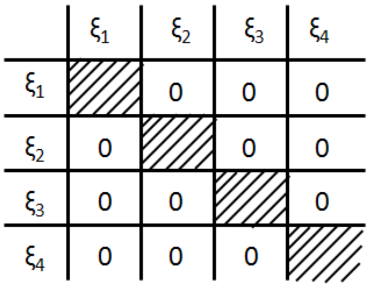
g_n est le degré de dégénéréscence de la valeur propre a_n, c'est-à-dire la dimension du sous-espace propre ξ_n correspondant.

Quelle est l'allure de la matrice représentant B dans cette base?

Nous savons (Th. II) que les éléments de matrice $\langle u_n^i|B|u_{n'}^{i'}\rangle$ sont nuls lorsque $n \neq n'$ (mais on ne peut rien dire à priori si $n = n'$ et $i \neq i'$).

En rangeant les vecteurs de base dans l'ordre : $|u_1^1\rangle, |u_1^2\rangle, \ldots, |u_1^{g_1}\rangle; |u_2^1\rangle, \ldots, |u_2^{g_2}\rangle; |u_3^1\rangle, \ldots$

on obtient alors pour B une matrice *diagonale par blocs*, c'est-à-dire de la forme :



(où seules les parties hachurées contiennent des éléments non-nuls).

Il reste ensuite à diagonaliser la matrice représentant B dans les différents sous-espaces ξ_n. La matrice B étant hermitique, elle est diagonalisable. Les nouveaux vecteurs de base $\{|v_n^i\rangle\}$ dans ξ_n sont vecteurs propres de B et automatiquement vecteurs propres de A.

Autrement dit, *il est toujours possible de choisir, dans chaque sous-espace propre de A, une base de vecteurs propres communs à A et B.*

Remarques :

- Désignons par $\{|u_{n,p}^i\rangle\}$ les vecteurs propres communs à A et B :

$$A|u_{n,p}^i\rangle = a_n|u_{n,p}^i\rangle$$

$$B|u_{n,p}^i\rangle = b_p|u_{n,p}^i\rangle$$

  Les indices n et p permettent de repérer les valeurs propres a_n et b_p de A et B; l'indice supplémentaire i sert éventuellement à distinguer les différents vecteurs de base qui correspondent aux mêmes valeurs propres a_n et b_p.

- Réciproque du théorème III : s'il existe une base de vecteurs propres communs à A et B, ces deux observables commutent.

- Il nous arrivera d'avoir à résoudre l'équation aux valeurs propres d'une observable C telle que: $C = A + B$ avec $[A, B] = 0$

  Lorsqu'on connaît une base $\{|u_{n,p}^i\rangle\}$ de vecteurs propres communs à A et B, le problème est résolu. En effet, $|u_{n,p}^i\rangle$ est aussi vecteur propre de C avec pour valeur propre $a_n + b_p$.

[1]Pour simplifier, on a supposé discret le spectre des valeurs propres.

b. Ensembles complets d'observables qui commutent (E.C.O.C.)

Considérons une observable A et une base de ξ constituée de vecteurs propres $|u_n^i\rangle$ de A. Si aucune des valeurs propres de A n'est dégénérée, les divers vecteurs de base de ξ peuvent être repérés par la valeur propre a_n (l'indice i est dans ce cas inutile). Tous les sous-espaces propres étant alors de dimension 1, la donnée de la valeur propre détermine de manière unique le vecteur propre correspondant[2]. On dit alors que l'observable A constitue à elle seule un E.C.O.C.

Si au contraire certaines valeurs propres de A sont dégénérées (il suffit que l'une d'elles le soit), la donnée de a_n ne suffit plus à caractériser un vecteur de base (puisqu'aux valeurs propres dégénérées correspondent plusieurs vecteurs indépendants). Prenons alors une autre observable B qui commute avec A et construisons une base orthonormée de vecteurs propres communs à A et B. Par définition, A et B forment un E.C.O.C. si cette base est unique[3], c'est-à-dire si, à chacun des couples possibles de valeurs propres $\{a_n, b_p\}$ il correspond un seul vecteur de base.

Si, pour au moins un des couples possibles $\{a_n, b_p\}$, il existe plusieurs vecteurs indépendants qui soient vecteurs propres de A et B avec ces valeurs propres, l'ensemble $\{A, B\}$ n'est pas complet. Il faudra ajouter une troisième observable C (et reprendre le raisonnement du paragraphe ci-dessus).

Par définition, un ensemble d'observables A, B, C . . . est appelé ensemble complet d'observables qui commutent si :

(i) toutes les observables A, B, C . . . commutent deux à deux,

(ii) la donnée des valeurs propres de tous les opérateurs A, B, C . . . suffit à déterminer un vecteur propre commun unique[2].

Remarques :

- Soit $\{A, B, C, \dots\}$ un E.C.O.C. Puisque la donnée des valeurs propres $a_n, b_p, c_r, \dots$ suffit à caractériser un ket de la base correspondante (à un facteur près), on note parfois ce ket $|a_n, b_p, c_r, \dots\rangle$.

- Pour un système physique donné, il existe plusieurs E.C.O.C.

[2] à un facteur multiplicatif près.

[3] à un facteur de phase près pour chacun des vecteurs qui la constituent.

2 Propriétés générales des moments cinétiques en mécanique quantique

Voir: Mécanique quantique - Tome I, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë: **chapitre VI**.
et/ou: Mécanique quantique, J.-L. Basdevant, J. Dalibard, M. Joffre: **chapitre 10**.

3 Composition des moments cinétiques

Voir: Mécanique quantique - Tome II, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë: **chapitre X**.
et/ou: Mécanique quantique, J.-L. Basdevant, J. Dalibard, M. Joffre: **chapitre 13**.

4 Particules identiques

Mécanique quantique - Tome II, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë: **chapitre XIV**.
et/ou: Mécanique quantique, J.-L. Basdevant, J. Dalibard, M. Joffre: **chapitre 16**.

Notions: indiscernabilité, opérateur d'échange, boson, fermion, Principe de Pauli.