2-Les outils mathematiques

2.1notion d,operateur

Un opérateur Â est tel qu' il transforme une fonction f(x) en une autre g(x) selon $\hat{A}f(x)=g(x)$

Exemple : $\frac{d}{dx}\sin(ax)=a\cos(ax)$

2.2algebre des operateur

On definit :

- La somme de deux operateur selon $\hat{S}=\hat{A}+\hat{C}$ telle que :

$$\hat{S}f(x)=\hat{A}f(x)+\hat{C}f(x)$$

- Le produit $\hat{p}=\hat{A}*\hat{C}$ telle que :

$$\hat{p}f(x)=\hat{A}*\hat{C}f(x)=\hat{A}[\hat{C}f(x)]$$

  En general $\hat{A}*\hat{C}\neq\hat{C}*\hat{A}$
  Le produit n'est pas commutatif

2.3commutateur de deux operateurs

Le commutateur de deux operateurs A et C est loperateur note $[\hat{A},\hat{C}]$ telle que : $[\hat{A},\hat{C}]=\hat{A}*\hat{C}-\hat{C}*\hat{A}$

Si le commutateur est nul on, à $\hat{A}*\hat{C}=\hat{C}*\hat{A}$:on dit que les operateur commutent

Exemple :

Soient $\hat{A}=\frac{d}{dx}$ et $\hat{C}=x$

Pour cela prenons une fonction Ψ(x) quelconque :

- $\hat{A}\hat{C}f(x)=\frac{d}{dx}(xf(x))=f(x)+xf'(x)$
- $\hat{C}\hat{A}f(x)=x\frac{d}{dx}f(x)=xf'(x)$

  Les operateurs ne commutent pas

2.4operateur lineaire

On dira qu,un operateur Â est lineaire s ;il obeit a la condion :

$\hat{A}[\lambda_1 f(x)+\lambda_2\, g(x)]=\lambda_1\hat{A}f(x)+\lambda_2\hat{A}g(x)$

Ou λ1 et λ 2 etant deux nombre complexe quelconques

Les operateurs de la mecanique quantique sont lineaires

Exemple : $\frac{d}{dx}$

$\frac{d}{dx}[\lambda_1 f(x)+\lambda_2\, g(x)]=\lambda_1\frac{d}{dx}f(x)+\lambda_2\frac{d}{dx}g(x)$

2.5 operateur zero :λ=0 0Ψ fonction partout nulle

2.6 operateur unite ou identite :λ=1 1Ψ=Ψ

2.7 notion dirac :

A in de simplifier l'écriture ,nous adapton une notation proposee par Dirac :

(ket f)et pour la fonction imaginaire conjuguee,(bra f) de l ;anglais (parenthese)

Cette notation nous permet d,ecrire de facon plus concise differentes integrales,ainsi nous noterons :

- Le produit hermetique $\Rightarrow\int f(x)^*\, g(x)d(x)=\langle f /g\rangle$
- Lintegrale $\Rightarrow\int f(x)^*\hat{A}g(x)d(x)=\langle f/\hat{A}/g\rangle$

2.8 qalgebre des commutateurs

2.8.1 definition

Le commutateur $[\hat{A},\hat{C}]$de deux operateur est ,par definition :

$[\hat{A},\hat{C}]=\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}$

Si $[\hat{A},\hat{C}]=0$ les operateur A et C commutent

2.8.2 proprietes

1. $[\hat{A},\hat{C}]=-[\hat{C},\hat{A}]$
2. $[\hat{A},(\hat{C}+\hat{Y})]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{Y}]$
3. $[\hat{A}, \hat{C}\hat{Y})]=[\hat{A},\hat{C}]\hat{Y}+\hat{C}[\hat{A},\hat{Y}]$
4. $[\hat{A},[\hat{C},\hat{Y}]]=[\hat{C}[\hat{Y},\hat{A}]]+[\hat{Y},[\hat{A},\hat{C}]]=0$

2.9 valeurs propres et fonction propre

On diraque f(x) est fonction propre de Â si Âf(x)=af(x)

F(x) est une fonction propre de Â,associee a la valeur propre a

Exemple :

$f(x)=e^{ax}$ et $\hat{A}=\frac{d}{dx}$

donc : $\frac{d}{dx}e^{ax}=ae^{ax}$

l'exponentielle e^{ax} est une fonction propre de loperateur derive avec la valeur propre a

3 l'équation de shrodinger

2.1operateur impultion-operateur energie

Considerons l expression de la fonction representant la propagation d,une onde planeselon une seule direction $\overrightarrow{ox}$ pour simplifier :

$$\Psi(x)=A\exp[2i\pi(\frac{x}{\lambda}-vt)]$$

On peut conciderer cette fonction comme etant associee ala description d,une particule de masse m et de vitesse v=λ

La derivee par rapport a x conduit a :$\frac{d\Psi}{dx}=\frac{2i\pi}{\lambda}\Psi$

Si on tient compte le postulat du de broglie ($\lambda=\frac{h}{p}$,p=mv),on obtien :

$$\frac{d\Psi}{dx}=\frac{2i\pi}{h}p\Psi$$

Ou $p_x\Psi=-ih\frac{d\Psi}{dx}$

On réécrivant la dernière équation sous forme opérationnelle

$\hat{p}_x\Psi=-i\hbar\frac{d\Psi}{dx}$

Definissant la composante x de l ,operateur impultion :

$$\boldsymbol{\hat{p}_x=-i\hbar\frac{d}{dx}}$$

On obtient de meme par un developement selon y et z

$$\hat{\dot{p}}_y = -i\hbar\frac{d}{dy} \qquad \hat{\dot{p}}_z = -i\hbar\frac{d}{dz}$$

Ainsi, la prise en compte du postulat de debroglie a partir de l,expression d,une fonction associee a une particule conduit a l,expression des composantes de l,operateur impulsion lui-même associee au vecteur $\overrightarrow{p}$=m$\vec{v}$.

De meme la prise en compte du postulat de planck sur la derivee par rapport a t,

$\frac{d\Psi}{dx}$=-$2i\pi\nu\Psi$ avec E=hν soit $\nu=\frac{E}{h}$ conduit a $E\Psi$=iħ$\frac{d\Psi}{dt}$ que l,on peut ecrire sous forme operatorielle

$$\hat{E} = i\hbar\frac{d}{dt}$$