- $e^{\hat{X}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{X}^n}{\sqrt{n!}}$
- $cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{(2n)}}{(2n)!}$
- $sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{(2n+1)}}{(2n+1)!}$
- $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x + O(x^2)$
- $\log(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n}$ for $|x| < 1$
- $\log(1-x) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n}$ for $|x| < 1$
- $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$ for $|x| < 1$

Évolution temporelle

Opérateur d'évolution

- $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle$
- $\hat{U}(t,t')$ satisfait l'éq. de Schrödinger. Il est inversbile et unitaire $(\hat{U}^{-1}(t,t') = \hat{U}^{\dagger}(t,t'))$

Point de vue d'Heisenberg

- Sol. de l'équation différentielle suivante :
  $\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right] + \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)_H$
  est $\hat{A}_H(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{A}(t)\hat{U}(t,t_0)$, avec $\hat{H}_H(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$

Mesures et évolution temporelle

- Les valeurs propre de $\hat{A}_H(t)$ sont les valeurs propre de $\hat{A}(t)$.
- La probabilité de mesurer a_m au temps t est :
  $a_m(t) = |\langle \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\phi_m|\psi(t_0)\rangle|^2 = |\langle \phi_m|\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle|^2$

$\hat{H}$ indépendant du temps

- $\hat{U}(t,t') = exp(-i\hat{H}(t-t')/\hbar)$
  $= \sum_n exp(-iE_n(t-t')/\hbar)|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$
- En utilisant Schrödinger et en posant $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle$, on obtient :
  $|\psi(t)\rangle = \sum_n exp(-iE_n(t-t_0)/\hbar)c_n(t_0)|\phi_n\rangle$

Théorème d'Ehrenfest

- $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{A}_H(t)|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right]|\psi\rangle$
- donc $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}(t)\rangle$ et $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}(t)\rangle = \langle F(\boldsymbol{x})\rangle$

Problème simple à 1D

Particule libre - Paquet d'onde

- Hamiltonien : $\hat{H} = \hat{p}^2/2m \Rightarrow \hat{H}|p\rangle = p^2/2m|p\rangle$
- Paquet d'onde :
  - Eq. stationnaire Schrö : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) = \hat{H}\phi(x,t)$
  - $\phi_p(x,t) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip^2t/2m\hbar}$
  - $\phi(x,t) = \int \mathrm{d}p f(p)\phi_p(x,t)$ avec
    $f(p) = \int \mathrm{d}x' \frac{\phi(x',t=0)}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p e^{-ip^2t/2m - i(x'-x)p/\hbar}$
    - Plus simple dans représentation $\{|p\rangle\}$:
      $f(p) = \overline{\phi}(p,t=0)$ et $\overline{\phi}(p,t) = f(p)e^{-ip^2t/2m\hbar}$
  - $\phi(x,t) = \int \mathrm{d}x' \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}e^{-i\pi/4}e^{i(x'-x)^2m/2\hbar t}\phi(x',t=0)$. Parfois, $\phi(x',t=0) = \delta(x-x_0)$
- opérateur d'évolution : $\langle x|\hat{U}(t,t_0)|x'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}e^{-i\pi/4}e^{i(x-x')^2m/2\hbar t}$
- Paquet d'one Gaussien :
  - $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}}\frac{1}{(2\pi)^{1/4}}e^{ip_0x/\hbar}e^{-x^2/4\sigma^2}$
  - $\overline{\psi}(p) = \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}(p_0-p)^2} \equiv f(p)$
  - $\Delta\hat{x}_{|\psi(x,t)\rangle} = \sigma\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4\sigma^4m^2}} \Rightarrow$ s'élargit.

Potentiel constant par morceaux

- Éq. Schrö 1D, stat., $V \neq V(x)$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E-V)\psi(x)$
  - $E > V$ $\psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}$, $p = \sqrt{2m(E-V}$
  - $E < V$ $\psi(x) = Ae^{x/l} + Be^{-x/l}$, $l = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E}}$
  - $E = V$ $\psi(x) = Ax + B$
- Si on demande explicitement de travailler avec des **fonctions paires/impaires**, poser :
  - $E > V$ $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$
  - $E < V$ $\psi(x) = A\cosh(kx) + B\sinh(kx)$
- sin/sinh : impaires ; cos/cosh : paires
- Propriété fonctions paires/impaires :
  - Paires : $f(-x) = f(x)$ et $f'(-x) = -f'(x)$
  - Impaires : $f(-x) = -f(x)$ et $f'(-x) = f'(x)$
- Si la région n'est pas centrée en 0, on doit poser (pour $E > V$, par exemple) :
  $\psi(x) = Ae^{-ik(x-\delta)} + Be^{ik(x-\delta)}$
  Si $V = \infty$ en $x = a$, on choisira $\delta = a$

Conditions de raccordements

- Raccordement si V fait un saut en $x = L$:
  $\psi_I(L) = \psi_{II}(L)$ et $\psi_I'(L) = \psi_{II}'(L)$
- Si $V(K) = \infty$, il faut poser $\psi(K) = 0$
- Si $V(x)$ a un pic en x_o, i.e. $\rangle mV_0\delta(x-x_0)$:
  $\psi(x_0^+) = \psi(x_0^-)$ et $\psi'(x_0^+) - \psi'(x_0^-) = \pm\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi(x_o)$
  Tiré de l'intégration de l'éq de Schrö entre $-\varepsilon$ et ε, $\varepsilon \to 0$.

Puit de potentiel carré

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ V_2 & \text{si } x < x_1 \text{ ou } x > x_2 \end{cases}$
  - Si $V_2 = \infty$, on a : $E_n = V_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(x_2-x_1)^2}n^2$
    $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2-x_1}}\sin\left(n\pi\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)$

Marche de potentiel

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x < 0 \\ V_2 > V_1 & \text{si } x > 0 \end{cases}$
  - $V_1 < E < V_2$: $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & \text{si } x < 0 \\ Ce^{-x/l} & \text{si } x > 0 \end{cases}$
    On a pas de coeff. $De^{x/l}$ car l'onde vient de la gauche. L'énergie n'est pas quantifiée.
  - $E > V_2$: $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ip_1x/\hbar} + Be^{-ip_1x/\hbar} & \text{si } x < 0 \\ Ce^{ip_2x/\hbar} + De^{ip_2x/\hbar} & \text{si } x > 0 \end{cases}$
    Si on choisit onde qui vient de la gauche, $D = 0$ et on obtient :
    coeff. de réflexion : $R = \frac{B}{A}$
    coeff. de transmission : $T = \frac{C}{A}$
    Ils vérifient : $p_1(1-R^2) = p_2T^2$ ou $|R|^2 + |T|^2 = 1$

Effet Tunnel

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x < x_1 \\ V_2 > V_1 & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ V_1 & \text{si } x > x_2 \end{cases}$
  - $V_1 < E < V_2$ et si on choisit onde qui vient de la gauche :
    $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & \text{si } x < x_1 \\ Ce^{x/l} + De^{-x/l} & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ Ee^{ipx/\hbar} & \text{si } x > x_2 \end{cases}$

Mouvement dans potentiel central

Opérateur moment cinétique et hamiltonien

- $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \wedge \hat{\boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix}$
- $\hat{L}_j = \hat{L}_j^{\dagger}$, $j = x, y, z$
- $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{x}_k$
- $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{p}_k$
- $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ et $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ commutent avec $\hat{H}$
- $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2 + V(r)$
- $\hat{H}\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi(r)) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$
- Si on définit $H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r)$, alors
  $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$
- $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{L}_k \Rightarrow \boldsymbol{L} \wedge \boldsymbol{L} = i\hbar\boldsymbol{L}$
- valeurs propres de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$: $\hbar^2L(L+1)$, $L = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$
- valeurs propres de $\hat{L}_z$: $\hbar M$, $M = -L, -L+1, \ldots, L$

Rappel 1er semestre

Formules trigonométriques

- $\cos(\alpha \pm \beta) = \cos\alpha\cos\beta \mp \sin\alpha\sin\beta$
- $\sin(\alpha \pm \beta) = \sin\alpha\cos\beta \pm \sin\beta\cos\alpha$
- $\tan(\alpha \pm \beta) = \frac{\tan\alpha \pm \tan\beta}{1 \mp \tan\alpha\tan\beta}$
- $\sin(2\alpha) = 2\sin\alpha\cos\alpha$
- $\cos(2\alpha) = \cos^2\alpha - \sin^2\alpha = 1 - 2\sin^2\alpha = 2\cos^2\alpha - 1$
- $\frac{1+\cos\alpha}{2} = \cos^2(\alpha/2)$; $\frac{1-\cos\alpha}{2} = \sin^2(\alpha/2)$
- $\cos\alpha\cos\beta = 1/2(\cos(\alpha+\beta) + \cos(\alpha-\beta))$
- $\cos\alpha\sin\beta = 1/2(\sin(\alpha+\beta) - \sin(\alpha-\beta))$
- $\sin\alpha\sin\beta = 1/2(\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta))$

Formules d'Euler + Nombres complexes

- $\cos(x) = \frac{e^{ix}+e^{-ix}}{2}$ $\sin(x) = \frac{e^{ix}-e^{-ix}}{2i}$
- $\cosh(x) = \frac{e^{x}+e^{-x}}{2}$ $\sinh(x) = \frac{e^{x}-e^{-x}}{2}$
- $e^{i(\pi+2k\pi)} = -1$ $e^{i\cdot 2k\pi} = 1$ $k \in \mathbb{Z}$
- $e^{i(\frac{\pi}{2}+2k\pi)} = i$ $e^{i(-\frac{\pi}{2}+2k\pi)} = -i$ $k \in \mathbb{Z}$
- $\sqrt{i} = \frac{1+i}{\sqrt{2}}$ $\frac{1}{i} = -i$

Intégrales/Dérivées de fonctions trigonométriques

- $\int\sin^2(ax)\mathrm{d}x = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$
- $\int\cos^2(ax)\mathrm{d}x = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2ax)}{4a}$
- $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tanh(x) = \frac{1}{\cosh^2(x)} = \mathrm{sech}^2(x)$ (valable pour tan)

Opérateurs de création et d'annihilation

- annihilation : $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}$
- création : $\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}$
- $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a})$
- $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a})$
- $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1/2) = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - 1/2) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$
- $\left(\hat{a}^{\dagger} \pm \hat{a}\right)^2 = \hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} \pm \left(2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1\right)$
- Application sur les états propres :
  - $\hat{a}^{\dagger}|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$
  - $\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$
  - $\hat{a}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{a}^{\dagger}$
  - $\hat{a}|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\hat{a}^{\dagger} = 0$
  - $|\phi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|\phi_0\rangle$
- Commutations :
  - $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$
  - $[\hat{a}^{\dagger 2}, \hat{a}^{\dagger}] = [\hat{a}^2, \hat{a}] = 0$
  - $[\hat{a}^{\dagger 2}, \hat{a}] = -2\hat{a}^{\dagger}$
  - $[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger}] = 2\hat{a}$
- Opérateur $\hat{N}$
  - $\hat{N}$ est défini par $\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \hat{N}$ tq $\hat{N}|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$
  - $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$
  - $[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger}] = \hat{a}^{\dagger}$

Propriétés Opérateurs

- Opérateur unitaire $U : UU^{\dagger} = 1$
- Opérateur unitaire et linéaire $U : \langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
- Opérateur unitaire et anti-linéaire (anti-unitaire) $U : \langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$
- Adjoint opérateur anti-unitaire : $\langle U^{\dagger}\psi|\phi\rangle = \langle U\phi|\psi\rangle$
- Opérateur Hermitien : $U^{\dagger} = U$

Spins

Matrices de Pauli

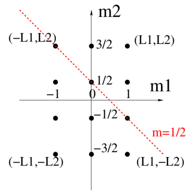
- On définit :
  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- Les vecteurs propres des matrices sont :
  $v_x^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$; $v_x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
  $v_y^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$; $v_y^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
  $v_z^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; $v_z^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
- Propriétés des matrices de Pauli :
  1. $\sigma_i^2 = Id$
  2. $Tr(\sigma_i) = 0$
  3. $det(\sigma_i) = -1$
  4. $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma_k$
  5. $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$
  6. $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} \cdot Id + i\epsilon^{ijk}\sigma_k$
  7. Valeurs propres de toutes les matrices : ± 1
- On utilise parfois les matrices $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ avec $i = x, y, z$
- $[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon^{ijk}S_k$
- On définit aussi :
  $\begin{cases} S^+ = S^x + iS^y \\ S^- = S^x - iS^y \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} S^x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-) \\ S^y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-) \end{cases}$
- On peut donc écrire :
  $S^x = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S^x|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S^x|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S^x|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S^x|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$
  Pour calculer les valeurs de la matrice, on utilise les spins S^+ et S^-. Pour S^z, on utilise que $\langle\uparrow|S^z|\uparrow\rangle = \hbar/2$ et $\langle\downarrow|S^z|\downarrow\rangle = -\hbar/2$ si spin $1/2$.
- Utilisation des S^+ et S^- :
  $S^{\pm}|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle$
- $S_z|m\rangle = \hbar m|m\rangle$
- Liaison des états propres de $\hat{S}_x$ et $\hat{S}_y$ avec les états propres de $\hat{S}_z$:
  - $|+_z\rangle = \frac{|+_x\rangle + |-_x\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|+_y\rangle + |-_y\rangle}{\sqrt{2}}$
  - $|-_z\rangle = \frac{|+_x\rangle - |-_x\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|+_y\rangle - |-_y\rangle}{i\sqrt{2}}$
  - $|\pm_x\rangle = \frac{|+_z\rangle \pm |-_z\rangle}{\sqrt{2}}$; $|\pm_y\rangle = \frac{|+_z\rangle \pm i|-_z\rangle}{\sqrt{2}}$

Additions de Moments cinétiques

- Valeurs propres des moments cinétiques :
  $\boldsymbol{J}_i^2|j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1)|j_i, m_i\rangle$
  $J_{z,i}|j_i, m_i\rangle = \hbar m_i|j_i, m_i\rangle$
- Base de l'espace de Hilbert de $\boldsymbol{J}_1$ et $\boldsymbol{J}_2$:
  $|j_1j_2m_1m_2\rangle = |j_1m_1\rangle \otimes |j_2m_2\rangle$.
- les valeurs du moment cinétique total J, que l'on peut obtenir en faisant l'addition de J_1 et J_2 sont données par :
  $|J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2$
- m est compris entre $-J$ et J.

Addition de Moments cinétiques et coeff de Clebsch-Gordan

- On a la base $\mathcal{B}_1 = \{|J_1, m_1\rangle \otimes |J_2, m_2\rangle\} \equiv \{|m_1\rangle|m_2\rangle\}$ et la base $\mathcal{B}_2 = \{|J_1, J_2, j, m\rangle\} \equiv \{|j, m\rangle\}$
- Le but est de mettre en relation $\mathcal{B}_1$ et $\mathcal{B}_2$.
- Méthodologie :
  - On classe les m_1 et les m_2 de cette manière :



- Ici, $J_1 = 1$ et $J_2 = 3/2$.
- On commence par le m maximum. Ici, $m = 5/2$.
- Il n'y a qu'une seule possibilité d'obtenir $|j,m\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle$.
- On prend le second m maximum, noté m^*. On aura alors 2 combinaisons de $|m_1^{a,b}\rangle|m_2^{a,b}\rangle$ tel que $|j,m^*\rangle = |m_1^{a,b}\rangle|m_2^{a,b}\rangle$. On a donc : $|j,m^*\rangle = \alpha|m_1^a, m_2^a\rangle + \beta|m_1^b, m_2^b\rangle$. Les coefficients α et β sont les **coefficients de Clebsch-Gordan**. On les trouve en utilisant l'opérateur J^-.
- On reprend ce qu'on a trouvé à la première étape : $|j,m\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle$ pour le m maximum. Et on applique J^- :
  $J^-|j,m\rangle = (J_1^- + J_2^-)|m_1\rangle|m_2\rangle$ avec
  $J^-|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j,m-1\rangle$
  et
  $J_1^-|m_1\rangle|m_2\rangle = (J_1^-|m_1\rangle)|m_2\rangle =$
  $\hbar\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}|m_1-1\rangle|m_2\rangle$
- On reproduit cette étape pour les m suivants jusqu'à celui qui est **minimal et positif**.
- Pour trouver les valeurs des coefficients de Clebsch-Gordan des valeurs de m négatives, on reprends les mêmes valeurs que pour m positifs, mais on met le signe de $(-1)^{j_1+j_2-j}$ devant. (i.e. si $j_1 + j_2 - j$ est pair, on ne change pas le signe des coeff. de C-G, sinon on change le signe)
- Si maintenant, on refait la même chose qu'avant sauf qu'on prend $j-1$ au lieu j, on doit faire ceci :
  - Prendre $m = j-1$, exprimer $|j-1,m\rangle = \gamma|m_1^a, m_2^a\rangle + \delta|m_1^b, m_2^b\rangle$ avec les m_1, m_2 trouvés précédemment, α et β sont connus maintenant.
  - Ecrire que $\alpha\gamma + \beta\delta = 0$ (Produit scalaire nul)
  - Utiliser le fait que $|\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$
  - On trouve donc les coefficients γ et δ.

Symétries

Introduction

- Une opération de symétrie est une transformation d'une quantité qui ne change pas certaines propriétés.
- En mécanique quantique, l'opérateur de symétrie U est unitaire ($U^\dagger = U^{-1}$)
  - il y a deux façon de le décrire :
    $\left\{\begin{array}{l} A \to U^\dagger A U \ : \text{ point de vue passif} \\ |\Psi\rangle \text{ inchangé} \end{array}\right.$
    $\left\{\begin{array}{l} |\Psi\rangle \to U|\Psi\rangle \ : \text{ point de vue actif} \\ A \text{ inchangé} \end{array}\right.$
- Thm Wigner : Plus généralement, L'opérateur de symétrie K est unitaire ou anti-unitaire. Il doit satisfaire :
  - K est anti-linéaire :
    $K(|\Psi\rangle + |\Phi\rangle) = K|\Psi\rangle + K|\Phi\rangle$
    $K(c|\Psi\rangle) = c^* K(|\Psi\rangle)$
  - $\langle K\Psi|K\Phi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^* = \langle\Phi|\Psi\rangle$
- Il n'y a que l'opérateur renversement du temps qui est anti-unitaire.

Symétries fondamentales

- Transformations d'espace :
  - Translations : $T^\dagger(a)\hat{x}T(a) = \hat{x} + a$
    L'opérateur $\hat{\boldsymbol{p}}$ est le générateur de translation. On écrit donc : $T(\boldsymbol{a}) = \exp\left(-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar\right)$
  - Rotations : $R^\dagger(\boldsymbol{\alpha})\hat{\boldsymbol{r}}R(\boldsymbol{\alpha}) = R_{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{\boldsymbol{r}})$
    L'opérateur $\hat{L}$ est le générateur de rotation. On écrit donc : $R(\boldsymbol{\alpha}) = \exp\left(-i\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}/\hbar\right)$
  - Parité : $\Pi|\boldsymbol{r}\rangle = |-\boldsymbol{r}\rangle$
    Les vecteurs qui changent de signe ($\boldsymbol{r}$,$\boldsymbol{p}$,...) sont appelés vecteurs polaires. Les vecteurs qui ne changent pas de signe ($\boldsymbol{L}$,...) sont appelés vecteurs axiaux.
- Renversement du temps :
  $\left\{\begin{array}{l} \theta^{-1}\hat{\boldsymbol{r}}\theta = \hat{\boldsymbol{r}} \\ \theta^{-1}\hat{\boldsymbol{p}}\theta = -\hat{\boldsymbol{p}} \end{array}\right. \Rightarrow \theta|\Psi\rangle = |\Psi^*\rangle$

Méthode d'approximation : Problèmes indépendant du temps

Approche variationnelle

- Principe variationnel :

$$(\forall|\Psi\rangle)\ \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0 \text{ où } E_0 \text{ est l'énergie du fondamental}$$

Théorie des perturbations non dégénérées

- On suppose l'hamiltonien de la forme : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$
  H_0 est l'hamiltonien habituel et $\hat{V}$ est une perturbation.
  Généralement, on considère une petite perturbation : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ avec λ petit.
- On doit donc écrire :
  $|\Psi\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda|\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\Psi_n^{(2)}\rangle + \ldots$
  $E_n = \varepsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots$
- Ordre 0 :
  - $H_0|\phi_n\rangle = \varepsilon_n|\phi_n\rangle$
- Ordre 1 :
  - $H_0|\Psi_n^(1)\rangle + \hat{V}|\phi_n\rangle = \varepsilon_n|\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n\rangle$
- Ordre ≥ 2 - Théorie Rayleigh-Schrödinger/Brioullin-Wigner :
  - L'énergie est donnée par :
    $$E_n = \varepsilon_n + \lambda\langle\phi_n|\hat{V}|\phi_n\rangle + \lambda^2\sum_{m\neq n}\frac{|\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$$
  - Les vecteurs propres sont donnés par (ordre 1) :
    $$|\Psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda\sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}|\phi_m\rangle$$

Théorie des perturbations dégénérées

- On suppose qu'un niveau ε_n de H_0 est dégénéré. ϕ_i, $i = 1,\ldots,k$ sont les fonctions propres de H_0 d'énergie ε_n. On doit donc chercher des états propres du type :
  $|\Psi_n\rangle = \sum_j\langle\phi_{n_j}|\Psi_n\rangle|\psi_{n_j}\rangle + \sum_{m\neq j}\langle\phi_m|\Psi_n\rangle|\phi_m\rangle$
- Calcul au premier ordre :
  - On doit créer la matrice de perturbations sur la restriction du sous-espace dégénéré, i.e. :
    $M_{ij}^{(1)} = \lambda\langle\phi_{n_i}|\hat{V}|\phi_{n_j}\rangle$
  - Les valeurs propres de la matrice $M^{(1)}$ donne la correction à l'ordre 1 de l'énergie. Les vecteurs propres de la matrice $M^{(1)}$ sont les vecteurs propres cherchés.
- Calcul au deuxième ordre :
  - On calcule une nouvelle matrice pour le deuxième ordre :
    $M_{ij}^{(2)} = M_{ij}^{(1)} + \lambda^2\sum_{m\neq n_i}\frac{\langle\phi_{n_i}|\hat{V}|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_{n_j}\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$
  - Les valeurs propres de la matrice $M^{(2)}$ donne la correction à l'ordre 1 de l'énergie. Les vecteurs propres de la matrice $M^{(2)}$ sont les corrections des vecteurs propres.
  - Suite au fait d'avoir trouver les vecteurs propres, on a la correction à l'ordre 0 poru les vecteurs propres. Il faut donc calculer la correction à l'ordre 1. Pour cela, on utilise :
    $\langle\phi_m|\Psi_{n,i}\rangle = \lambda\sum_j\frac{\langle\phi_{n_j}|\Psi_{n,i}\rangle\langle\phi_m|\hat{V}|\phi_{n_j}\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$

Méthode d'approximation : Problèmes dépendant du temps

Opérateur d'évolution

- Utilisation de l'opérateur d'évolution temporelle :
  - Hamiltonien de la forme : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$
  - Au premier ordre, on a :
  - $\hat{U}_I(t,t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1\,\hat{V}_I(t_1)$
  - $\langle n|\hat{U}_I(t,t_0)|i\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1\,\langle n|\hat{V}_I(t_1)|i\rangle$
  - Mais on a : $\hat{V}_I(t_1) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_0)}\hat{V}(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_0)}$
  - Ainsi : $\langle n|\hat{U}_I(t,t_0)|i\rangle =$
    $-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 e^{i(E_n-E_i)(t_1-t_0)/\hbar}\langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle$
- Probabilité de transition de $|i\rangle \to |n\rangle$:
  $P_{i\to n} = \left|-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 e^{i(E_n-E_i)(t_1-t_0)/\hbar}\langle n|\hat{V}(t_1)|i\rangle\right|^2$
  - On utilise souvent la petite astuce suivante :
    $$\begin{aligned}|1-e^{ix}|^2 &= (1-e^{ix})(1-e^{ix}) \\ &= (e^{-ix/2} - e^{ix/2})(e^{ix/2} - e^{-ix/2}) \\ &= -2i\sin(x/2)2i\sin(x/2) = 4\sin^2(x/2)\end{aligned}$$
- Règle d'or de Fermi :
  $w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle n|\hat{V}|i\rangle\right|^2\delta(E_n - E_i)$

Matrices densite

Introduction du formalisme

- Etat pur :
  - $|\Psi\rangle$ est un etat pur si $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
  - $\hat{O}$ un observable : $\langle\hat{O}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{O}\hat{\rho})$
- 2 sous-systemes A et B de bases $\{|j\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$:
  - $|\Psi\rangle$ est un etat pur si $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
  - $\hat{O}$ une observable de A, sa valeur moyenne est : $\langle\hat{O}\otimes\hat{I}_B\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}) = \sum_{i,j}\rho_{ij}M_{ij}$ avec $\rho_{ij} = \sum_\mu\langle i\mu|\psi\rangle\langle\psi|j\mu\rangle$
  - Trace partielle : $\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B(\hat{\rho}) = \sum_j\langle j|\hat{\rho}|j\rangle$ avec $\{|j\rangle\}$ base de B ou encore $\hat{\rho}_A = \sum_\mu\sum_{i,j}\alpha_{i\mu}\alpha_{j\mu}^*|i\rangle\langle j|$

Proprietes

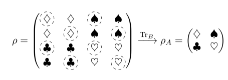
- Trace :
  - $\hat{\rho}_A^\dagger = \hat{\rho}_A$ (on peut diagonaliser)
  - $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_A) = 1$
  - $\hat{\rho}_A$ definie positive : $\langle\phi|\hat{\rho}_A|\phi\rangle > 0$
- Etat pur : $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ donc $\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\right) = 1$
- Etat "de melange statistique" : $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ donc $\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right) < \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\right)$

Evolution temporelle

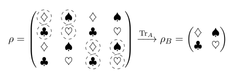
- $i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = -[\hat{\rho},\hat{H}]$

Trace partielle

- Supposons qu'il y a 2 sous-systèmes A et B tq $|\psi\rangle = |\phi_A\rangle\otimes|\phi_B\rangle$.
- Matrice densité : $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \ldots = (|\phi_A\rangle\langle\phi_A|)\otimes|\phi_B\rangle\langle\phi_B|) \Rightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}_A\otimes\hat{\rho}_B$
- On définit : $\hat{\rho}_A = Tr_B(\hat{\rho})$ et $\hat{\rho}_B = Tr_A(\hat{\rho})$
- Afin de calculer plus simplement, on utilise la base suivante : $\{|0_A0_B\rangle, |0_A1_B\rangle, |1_A0_B\rangle, |1_A1_B\rangle\}$
- On peut réécrire la trace partielle pour trouver $\hat{\rho}_A$:
  $\hat{\rho}_A = Tr_B(\rho) = \sum_{j=0,1}\langle j_B|\hat{\rho}|j_B\rangle = \langle 0_B|\hat{\rho}|0_B\rangle + \langle 1_B|\hat{\rho}|1_B\rangle$
- En image, cela donne :
  - $\hat{\rho}_A$:



  - $\hat{\rho}_B$:



  - Il faut sommer les éléments entourés en pointillés et les placé à l'endroit correspondant de la petite matrice.

Etats intriqués

- Deux objets quantiques sont intriqués s'il doit être décrit globalement. On ne peut donc pas les séparer. Si on a deux systèmes S_1 et S_2. On peut les séparer de manière spatiale, *i.e.* ils peuvent être à une grande distance. Mais on doit considérer le système $\{S_1 + S_2\}$ comme un système unique.
- Exemples simples :
  - $|\Psi_{1+2}\rangle = |\psi_1\rangle\otimes|\psi_2\rangle$: Etat séparable (non-intriqué)
  - $|\Psi_{1+2}\rangle = a|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle + b|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + \ldots$: Etat intriqué
- En utilisant les bases $\{|+\rangle_i, |-\rangle_i\}$, $i = 1,2$:
  - $|\Psi_{sep}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|-\rangle_2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle_1 - |-\rangle_1\right)\otimes|-\rangle_2$
  - $|\Psi_{int}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2\right)$

Th perturb

non degenere

$H = H_0 + V \to H = H_0 + \lambda V$
$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle$
$E_n = \epsilon_n + \lambda_n E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}$
Ordre 0 : $H_0|\varphi_n\rangle = \epsilon_n|\varphi_n\rangle$
Ordre 1 : $H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + V|\varphi_n\rangle = \epsilon_n|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\varphi_n\rangle$
Ordre k : $H_0|\psi_n^{(k)}\rangle + V|\psi_n^{(k-1)}\rangle =$
$\epsilon_n|\psi_n^{(k)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(k-1)}\rangle + \ldots + E_n^{(k-1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(k)}|\varphi_n\rangle$
$E_n^{(1)} = \langle\varphi_n|V|\varphi_n\rangle$
$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|\langle\varphi_m|V|\varphi_n\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}$
$E_n^{(k)} = \langle\varphi_n|V|\psi_n^{(k-1)}\rangle$