Journal de bord du module
Fondements mathématiques de la mécanique quantique
Les renvois de la table de matières sont cliquables.

État d'avancement des notes du cours

La version actuelle est consultable ici. Les chapitres 1 et 2 sont à jour, les chapitres 3–4 dans une version « finale $-\varepsilon$ », les chapitres ultérieurs dans un stade plus préliminaire.

Table des matières

1 Introduction et motivation

- Plan du cours.
- Contexte historique.
- La place de la mécanique quantique par rapport à la mécanique classique, la relativité restreinte et la théorie quantique des champs.
- Pertinence de la mécanique quantique dans le développement technologique actuel. ← Fin du cours du 16 janvier 2018.

2 Postulats de la mécanique classique (vue comme une théorie des probabilités munie d'une règle d'évolution dynamique)

- Modèle statistique de la mesure physique.
- Rappels de la théorie des probabilités.
  - Les variables aléatoires sur un espace mesurable $(\Omega, \mathscr{F})$ à valeurs dans $(\mathbb{X}, \mathscr{X})$ (vu comme partie de $(\mathbb{R}, \mathscr{B}(\mathbb{R}))$) sont en bijection avec les noyaux stochastiques déterministes $K : \Omega \times \mathscr{X} \to [0, 1]$.
  - Les noyaux stochastiques sont en bijection avec les mesures de probabilité sur $(\mathbb{R}, \mathscr{B}(\mathbb{R}))$ à valeurs dans les vecteurs de $[0, 1]^{\Omega}$.
  - Un noyau stochastique agit de manière covariante sur les mesures et de manière contravariante sur les fonctions mesurables. ← Fin du cours du 17 janvier 2018.
  - Les 5 postulats de la mécanique classique.
    - Espace de phases.
    - États.
    - Évolution temporelle d'un système isolé.
    - Effets et observables francs ou flous.
    - Mesure physique.
  - Illustration des postulats par un exemple.

3 La physique classique ne suffit pas pour décrire la Nature

Description de l'expérience de la double fente. Dualité onde-particule.

4 Les probabilités classiques ne suffisent pas pour décrire la Nature

— Inégalités de Bell.
— Réfutation expérimentale de l'hypothèse de variables cachées.
— Exercice proposé : l'expérience d'Orsay comme un jeu de stratégie impossible à gagner.

5 Postulats de le mécanique quantique vue comme une extension non-commutative de la théorie des probabilités

Les postulats sont présentés dans le même ordre que les postulats de la mécanique classique pour pouvoir faire le parallèle immédiat.

— Espace des phases comme espace de Hilbert ; systèmes composés.
— États purs.
— Évolution temporelle d'un système isolé.
— Observables auto-adjointes.
— Mesure physique. ← Fin du cours du 19 janvier 2018.
— Illustration des postulats par le traitement d'un système réaliste simple.

6 Quelques rappels sur les espaces de Hilbert

— Produit tensoriel.
— Notation de Dirac. ← Fin du cours du 24 janvier 2018.
— Opérateurs à positifs et leur caractérisation.
— Opérateurs de classe trace ; opérateurs densité.
— Reformulation du postulat sur les états : $\mathbf{S} = \mathscr{D}(\mathbb{H})$.
— Marginales quantiques.
— Illustration du phénomène que les marginales d'un état quantique pur (extrémal) peuvent être d'entropie maximale.

7 Premières conséquences des postulats

— Irréductibilité de l'aléa quantique et relations d'incertitude de Heisenberg.
— Phénomène d'intrication. Caractérisation des états intriqués. ← Fin du cours du 30 janvier 2018.
— Paradoxe EPR.

8 Quelques résultats (utiles en mécanique quantique) sur les algèbres d'opérateurs

— Algèbres, algèbres unifères, algèbres commutatives.

— B^*-algèbres, C^*-algèbres. Exemples.
— Groupe linéaire général $\mathsf{GL}(\mathfrak{A})$ d'éléments inversibles d'une algèbre de Banach unifère $\mathfrak{A}$.
— $\mathsf{GL}(\mathfrak{A})$ est ouvert.
— Le spectre de $a \in \mathfrak{A}$, où $\mathfrak{A}$ une B^*-algèbre unifère, est une partie compacte non-vide de $\mathbb{C}$. Le rayon spectal de a est majoré par $\|a\|$. (Faute de temps, la non-vacuité du spectre et la majoration du rayon spectral seront démontrées demain). ← Fin du cours du 06 février 2018.
— Preuve de la non vacuité du spectre.

9 Calcul spectral dans $\mathscr{B}(\mathbb{H})$

— Spectres ponctuel, continu, résiduel.
— Toute partie compacte de $\mathbb{C}$ peut être le spectre d'un opérateur.
— Exemples de détermination du spectre.
— Calcul fonctionnel continu (énoncé du théorème et début de la démonstration). ← Fin du cours du 07 février 2018.
— Fin de la démonstration.
— Théorème de l'image spectrale de Gel'fand.
— Caractérisation de l'espace fonctionnel des fonctions mesurables bornées comme le plus petit espace fermé pour les limites ponctuelles des suites de fonctions mesurables uniformément bornées qui contient les fonctions continues.
— Rappels sur la décomposition de Jordan-Hahn des mesures signées ; mesures complexes ; variation totale.
— Rappel du théorème de Riesz.
— Énoncé du théorème de Lax-Milgram.
— Énoncé du théorème de calcul fonctionnel mesurable et indications sur sa démonstration.
— Définition d'une mesure spectrale. ← Fin du cours du 13 février 2018.
— Toute mesure spectrale à support compact définit un opérateur borné. Le calcul fonctionnel mesurable borné appliqué à cet opérateur définit une mesure spectrale qui est égale à la mesure spectrale qui a servi à définir l'opérateur.
— Vecteurs cycliques ; mesure borélienne sur $(\mathbb{R}, \mathscr{B}(\mathbb{R}))$ engendrée par la mesure spectrale et le vecteur cyclique.
— Application du lemme de Zorn pour établir la décomposition de l'espace en somme directe de sous-espaces de Hilbert dans lesquels l'opérateur possède un vecteur cyclique.
— Version multiplicative du théorème spectral.
— Une introduction succincte aux opérateurs non-bornés. Domaine, graphe, extension, clôture d'un opérateur non-borné. Adjoint. Spectre. ← Fin du cours du 14 février 2018.
— Autres décompositions de la mesure spectrale : mesure purement ponctuelle, mesure absolument continue, mesure singulière continue.
— Spectre essentiel, spectre discret. Caractérisation des spectres essentiel et discret.
— Théorème de Weyl.
— Une valeur λ est dans le spectre essentiel de X si l'opérateur $\lambda I - X$ n'est pas un opérateur de Fredholm.

10 L'oscillateur harmonique

10.1 L'oscillateur harmonique classique

— Flots sur les configurations et la tribu, sur les observables, sur les états.
— Théorème de Liouville.
— Flot sur les observables en termes de crochets de Poisson.
— L'hamiltonien est une constante de mouvement.
— L'hamiltonien est le générateur des translations temporelles.

10.2 L'oscillateur harmonique quantique

— Flots sur les rayons et les orthoprojecteurs sur les sous-espace de Hilbert, les observables, les états.
— Flot sur les observables en termes de commutateurs.
— L'hamiltonien est une constante de mouvement.
— L'hamiltonien est le générateur des translations temporelles. ← Fin du cours du 21 février 2018.
— Détermination de la forme du hamiltonien.
— Le moment cinétique est le générateur des translations spatiales.
— Opérateurs de création et d'annihilation.
— Spectre de l'hamiltonien.
— Quantification de l'énergie, i.e. l'hamiltonien a un spectre purement discret. La borne inférieure du spectre est strictement positive (l'énergie du vide).
— Comparaison des densités de présence renormalisées classique-quantique et comparaison des fonctions de répartition correspondantes.

11 Atome d'hydrogène

11.1 Le modèle classique et ses symétries

— Le modèle classique de type planétaire n'est pas satisfaisant : il n'explique ni les raies d'absorption, ni la stabilité de l'atome.
— Quelques généralités sur les rotations classiques.
— Si le potentiel est invariant aux rotations, le moment angulaire est une constante du mouvement.

11.2 Représentation des groupes de symétrie

— Groupes et algèbres de Lie.
— Groupes $\mathsf{SO}(3)$ et $\mathsf{SU}(2)$; algèbres $\mathfrak{so}(3)$ et $\mathfrak{su}(2)$. Revêtement universel. ← Fin du cours du 23 février 2018.
— Les représentations de dimension finie des groupes et des algèbres de Lie.
— Représentations vues comme des actions de groupe.

— Sous-espace invariant, irréductibilité de la représentation.

11.3 Le modèle quantique

— Moment angulaire quantique.
— Classification des représentations irréductibles à dimension finie de l'algèbre de Lie $\mathfrak{so}(3)$. Nombre orbital ; spin de la représentation.
— Seules les représentations de $\mathfrak{so}(3)$ à spin entier engendrent par exponentiation des représentations du groupe $\mathsf{SO}(3)$.
— Représentatations dans $L^2(\mathbb{S}^2)$; polynômes harmoniques homogènes de degré l ; harmoniques sphériques.
— Représentations dans $L^2(\mathbb{R}^3)$.
— Équation de Schrödinger dans un potentiel central effectif.
— Spectre discret de l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène. Quantification des niveaux d'énergie.
— Multiplicité spectrale orbitale.
— Spin de l'électron. Multiplicité spectrale due au spin.

11.4 Quelques problèmes connexes

— Éléments qualitatifs permettant la reconstitution du tableau périodique des éléments.
— Spin de l'électron et expérience de Stern-Gerlach. $\leftarrow$ Fin du cours du du 28 février 2018 et du programme.