

## Première partie

# Représentations de la position et de l'impulsion en Mécanique Quantique

Dans ce chapitre, nous allons de nouveau considérer une particule ; en particulier, nous voulons pouvoir définir les notions de position et d'impulsion.

Nous allons travailler dans les espaces de Hilbert  $L_2(\mathbb{R})$  ou  $L_2(\mathbb{R}^3)$ . Nous aurons alors des fonctions de carré sommable. Dans ces espaces, *les opérateurs position  $X$  et impulsion  $P$  n'ont pas de vecteurs propres*. Nous pouvons néanmoins faire comme si ils en avaient : nous expliqueront ultérieurement comment nous pouvons justifier cette approche.

Dans cette section, nous utiliserons intensément les résultats obtenus en ??.

Introduisons les notations :

$$\begin{array}{l|l} |x_0\rangle & \text{Etat propre de l'opérateur } X \text{ de valeur propre } x_0. \text{ Cela correspond à la "fonction d'onde" } \delta(x - x_0). \\ |p_0\rangle & \text{Etat propre de l'opérateur } P \text{ de valeur propre } p_0. \text{ Cela correspond à la "fonction d'onde" } \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}} \end{array}$$

Nous pouvons effectuer plusieurs opérations sur ces objets.

## 1 Espace vectoriel des opérateurs $X$ et $P$

### 1.1 Normalisation

Nous voulons calculer  $\langle x_0|x'_0\rangle$  et  $\langle p_0|p'_0\rangle$ .

$$\begin{aligned} \langle x_0|x'_0\rangle &= \int dx \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) = \delta(x_0 - x'_0) \\ \langle p_0|p'_0\rangle &= \int dx \frac{e^{-i\frac{p_0 x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{i\frac{p'_0 x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int du \frac{e^{-i(p_0 - p'_0)u}}{2\pi} = \delta(p_0 - p'_0) \end{aligned} \quad u = \frac{x}{\hbar}$$

Ce faisant, nous montrons que les deux bases définies par ces opérations sont orthonormées.

### 1.2 Relation de complétude

A partir de là, nous obtenons les relations fondamentales suivantes :

$$\begin{array}{l|l} \langle x_0|x'_0\rangle = \delta(x_0 - x'_0) & \langle p_0|p'_0\rangle = \delta(p_0 - p'_0) \\ \int d^3x |x_0\rangle \langle x_0| = \mathbb{I} & \int dp_0 |p_0\rangle \langle p_0| = \mathbb{I} \end{array}$$

Nous avons alors deux relations de *complétude*, ou de *fermeture*.

### 1.3 Composante d'un ket

Considérons un état quantique  $|\psi\rangle$ , correspondant à la fonction d'onde  $\psi(x)$ . En exploitant les relations de fermetures définies ci-dessus, nous pouvons alors écrire l'état quantique sous les deux formes suivantes :

$$|\psi\rangle = \int d^3x_0 |x_0\rangle \langle x_0|\psi\rangle \quad (1.1)$$

$$|\psi\rangle = \int d^3p_0 |p_0\rangle \langle p_0|\psi\rangle \quad (1.2)$$

On pose  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ . Observons que

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx |X\rangle \langle x|\psi\rangle \quad (1.3)$$

$$= \int \psi(x) |x\rangle. \quad (1.4)$$

En particulier, en prenant  $|\psi\rangle = |p\rangle$ , nous avons que

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (1.5)$$

Dès lors,

$$\begin{aligned} \langle p|\psi\rangle &= \langle p|\mathbb{I}|\psi\rangle \\ &= \langle p|\int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle \\ &= \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle \\ \langle p|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{i\frac{px}{\hbar}} \psi(x) = \tilde{\psi}(p) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Où  $\tilde{\psi}(p)$  est par définition la transformée de Fourier de  $\psi(x)$ .

Pour résumer, nous avons que

$$\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

$$\langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \quad (1.8)$$

## 1.4 Produit scalaire de deux vecteurs

En vertu des relations de complétude 1.2, il est possible de retrouver le produit scalaire (??).

$$\begin{aligned} \langle \varphi|\psi\rangle &= \langle \varphi|\int dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle & \langle \varphi|\psi\rangle &= \langle \varphi|\int dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle \\ &= \int dx \langle \varphi|x\rangle \langle x|\psi\rangle & &= \int dp \langle \varphi|p\rangle \langle p|\psi\rangle \\ \langle \varphi|\psi\rangle &= \int dx \varphi^*(x) \psi(x) & \langle \varphi|\psi\rangle &= \int dp \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\psi}(p) \end{aligned} \quad (1.9)$$

## 2 Opérateurs X et P

Soit  $|\psi\rangle$  un ket quelconque et  $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle \doteq \psi(x, y, z)$  la fonction d'onde correspondante. On définit l'opérateur X de sorte que

$$|\psi'\rangle = X |\psi\rangle \quad (1.10)$$

soit définit à travers la base  $\{\mathbf{r}\}$  par la fonction  $\langle \mathbf{r}|\psi'\rangle = \psi'(\mathbf{r})$ , où

$$\psi'(\mathbf{r}) = x\psi(x, y, z). \quad (1.11)$$

Dans cette base, l'opérateur X représente donc la multiplication par x. De manière analogue, nous introduisons les opérateurs Y et Z :

$$\langle \mathbf{r}|X|\psi\rangle = x \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \quad \langle \mathbf{r}|Y|\psi\rangle = y \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \quad \langle \mathbf{r}|Z|\psi\rangle = z \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \quad (1.12)$$

Similairement, on définit l'opérateur  $\mathbf{P}$ , dont l'action dans la base  $|\mathbf{p}\rangle$  est donnée par

$$\langle \mathbf{p}|P_x|\psi\rangle = p_x \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = p_x \tilde{\psi}(p_x) \quad \langle \mathbf{p}|P_y|\psi\rangle = p_y \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = p_y \tilde{\psi}(p_y) \quad \langle \mathbf{p}|P_z|\psi\rangle = p_z \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = p_z \tilde{\psi}(p_z) \quad (1.13)$$

**Proposition 2.1.**  $\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar\partial_x \langle x|\psi\rangle$ .

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} \langle x|P|\psi\rangle &= \int dp \langle x|p\rangle \langle p|P|\psi\rangle \\ &= \int dp \frac{e^{i\frac{px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} p \tilde{\psi}(p) \\ &= -i\hbar\partial_x \left( \int dp \frac{e^{i\frac{px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) \right) \\ \langle x|P|\psi\rangle &= -i\hbar\partial_x \psi(x) \end{aligned} \quad (1.14)$$

■

**Proposition 2.2.**  $[X, P] = i\hbar\mathbb{I}$

*Démonstration.* La preuve est assez simple :

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | [X, P] | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | XP - PX | \psi \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} | XP | \psi \rangle - \langle \mathbf{r} | PX | \psi \rangle \\ &= x \langle \mathbf{r} | P | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar x}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ &= i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle\end{aligned}$$

Cela étant vrai pour tout  $\mathbf{r}$  et tout  $\psi$ , il s'ensuit que  $[X, P] = i\hbar$ . ■

Nous pouvons en déduire que

$$[X_i, X_j] = 0 \qquad [P_i, P_j] = 0 \qquad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (1.15)$$

Pour tout  $i, j = 1, 2, 3$ .

### 3 Opérateur translation

**Définition 3.1.** Soit  $P, Q$ , deux observables reliées par la relation  $[P, Q] = i\hbar\mathbb{I}$ . On définit l'opérateur translation  $S(\lambda)$  par

$$S(\lambda) = e^{-i\frac{\lambda P}{\hbar}} \quad (1.16)$$

Pour tout  $\lambda \in \mathbb{R}$ .

Observons que cet opérateur est unitaire : effectivement,  $S^\dagger(\lambda) = S(-\lambda)$ . De plus,  $S(\lambda)S(\lambda') = S(\lambda + \lambda')$ .

Nous voulons déterminer la valeur de  $[X, S(\lambda)]$ . Commençons par remarquer les propriétés suivantes de l'opérateur commutateur.

#### 3.1 Propriétés générales du commutateur

**Proposition 3.2.** Pour tout opérateur  $A, B$  et  $C$ ,

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (1.17)$$

**Proposition 3.3** (Identité de Jacobi). Le commutateur est un opérateur bilinéaire, antisymétrique et vérifiant l'identité de Jacobi, c'est à dire que

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0 \quad (1.18)$$

**Théorème 3.4.** Pour tout opérateur  $\hat{A}, \hat{B}$  commutant avec  $[\hat{A}, \hat{B}]$ ,

$$\exp(\hat{A}) \times \exp(\hat{B}) = \exp(\hat{A} + \hat{B}) \exp\left(\frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{2}\right) \quad (1.19)$$

Il s'agit d'un cas particulier de l'identité de Baker-Hausdorff. Elle est parfois appelée formule de Glauber dans la littérature.

**Proposition 3.5.** Soit  $\hat{A}, \hat{B}$  deux opérateurs commutant avec  $[\hat{A}, \hat{B}]$ . Alors, pour tout naturel  $n$ ,

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] \quad (1.20)$$

*Démonstration.* Remarquons en particulier que puisque les opérateurs commutent avec  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , nous aurons que

$$\hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} \qquad \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} \quad (1.21)$$

Travaillons par récursion. La base s'obtient assez facilement. Passons de suite à l'étape d'induction :

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^n] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^n + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^n] = \hat{B}^n[\hat{A}, \hat{B}] + n\hat{B}\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] = (n+1)\hat{B}^n[\hat{A}, \hat{B}]$$

■

Généralisons cette dernière proposition à une fonction analytique ; c'est à dire une fonction pouvant être localement développée en série.

**Théorème 3.6.** Soient  $\hat{A}, \hat{B}$  deux opérateurs commutant avec  $[\hat{A}, \hat{B}]$  et soit une fonction analytique  $F(\hat{B}) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{B}^n$ . Alors, pour tout naturel  $n$ ,

$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}] F'(\hat{B}) \quad (1.22)$$

*Démonstration.* Remarquons que les hypothèses de 3.5 sont respectées. Dès lors, l'assertion se démontre sans peine :

$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n \hat{B}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}] \doteq F'(\hat{B}) [\hat{A}, \hat{B}]$$

■

Cette dernière proposition permet de répondre à la question posée :

$$[X, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda). \quad (1.23)$$

Nous pouvons reformuler cette égalité sous la forme

$$QS(\lambda) = S(\lambda)[Q + \lambda]. \quad (1.24)$$

## 4 Valeurs propres et vecteurs propres de Q

### 4.1 Spectre de Q

**Proposition 4.1.** Soit  $|x_0\rangle$  le vecteur propre de  $X$ , de valeur propre  $x_0$ . Alors,

$$S(\lambda) |x_0\rangle = |x_0 + \lambda\rangle \quad (1.25)$$

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} XS(\lambda) |x_0\rangle &= (S(\lambda)X + \lambda S(\lambda)) |x_0\rangle \\ &= S(\lambda)x_0 |x_0\rangle + \lambda S(\lambda) |x_0\rangle = (x_0 + \lambda)S(\lambda) |x_0\rangle \end{aligned}$$

■

Cette propriété exprime que  $S(\lambda) |x_0\rangle$  est un autre vecteur propre non nul de  $X$ , de valeur propre  $(x_0 + \lambda)$ . A partir d'un vecteur propre de  $X$ , nous pouvons alors en construire un autre : le spectre de  $X$  est continu, composé de toutes les valeurs de l'axe réelle.

**Proposition 4.2.** Si  $|\psi\rangle$  est un vecteur de la fonction d'onde  $\psi$ , alors  $S(\lambda) |\psi\rangle$  est un ket de la fonction d'onde  $\psi(x - \lambda)$ .

**Remarque 4.3.** Nous avons vu que  $S(\lambda) |x_0\rangle = |x_0 + \lambda\rangle$ . Remarquons que l'expression adjointe s'écrit

$$\langle x_0 | S^\dagger(\lambda) = \langle x_0 + \lambda | \quad (1.26)$$

Soit alors,

$$\langle x_0 | S(\lambda) = \langle x_0 - \lambda | \quad (1.27)$$

**Proposition 4.4.** On remarque alors que si  $|\psi\rangle$  est un ket de la fonction d'onde  $\psi(x)$ , alors  $S(\lambda) |\psi\rangle$  est le ket associé à la fonction d'onde  $\psi(x - \lambda)$ .

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} \langle x | \psi \rangle &= \psi(x) \\ \langle x | S(\lambda) | \psi \rangle &= \langle x - \lambda | \psi \rangle = \psi(x - \lambda) \end{aligned}$$

■

Ces propriétés de  $S(\lambda)$  lui valent le nom de *opérateur de translation*.

## 4.2 Invariance par translation

Supposons que le système est invariant par translation, c'est à dire que, pour tout  $t, \lambda, |\psi\rangle$  :

$$e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} S(\lambda) |\psi\rangle = S(\lambda) e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\psi\rangle \quad (1.28)$$

Nous pouvons alors montrer que  $HP|\psi\rangle = PH|\psi\rangle$ , c'est à dire que  $[H, P] = 0$ .

L'invariance de translation implique la conservation du générateur des translations ; c'est à dire la conservation de l'impulsion. Ce résultat exploite le Théorème d'Emmy Nöther (*pour une démonstration, le lecteur est invité à suivre le cours de Mécanique Analytique - MATH-F204*).

## 5 Relations d'incertitudes

Soient  $A, B$  des observables et  $|\psi\rangle$  un état.

**Remarque 5.1.** Nous notons  $\langle A^n \rangle = \langle \psi | A^n | \psi \rangle$ ,  $\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ . De plus, on introduit  $A' = A - \langle A \rangle$  afin de pouvoir noter  $\Delta A^2 = \langle A'^2 \rangle$ . On note que  $[A, B] = [A', B']$ .

**Théorème 5.2.** Soit  $A, B$  deux observables. Alors,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \| [A, B] \| \quad (1.29)$$

*Démonstration.* **A compléter.** ■

Pour les opérateurs  $X$  et  $P$ , nous avons alors que  $[X, P]$  vaut  $i\hbar$  ; il s'ensuit que

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2},$$

ce qui est exactement la relation (??).