Première partie

Représentations de la position et de l'impulsion en $\mathcal{M}$écanique $\mathcal{Q}$uantique

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 néamoins 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 :

$\lvert x_0\rangle$	Etat propre de l'opérateur X de valeur propre x_0. Cela correspond à la "fonction d'onde" $\delta(x-x_0)$.
$\lvert p_0\rangle$	Etat propre de l'opérateur P de valeur propre p_0. Cela correspond à la "fonction d'onde" $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}$

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 $\langle p_0|p_0'\rangle$.

$$\langle x_0|x_0'\rangle = \int dx\delta(x-x_0)\delta(x-x_0') = \delta(x_0-x_0)$$

$$\langle p_0|p_0'\rangle = \int dx\frac{e^{-i\frac{p_0x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{e^{i\frac{p_0'x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int du\frac{e^{-i(p_0-p_0')u}}{2\pi} = \delta(p_0-p_0') \qquad u=\frac{x}{\hbar}$$

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 :

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

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 :

$$|\Psi\rangle = \int d^3x_0\ \ |x_0\rangle\langle x_0|\,|\Psi\rangle \tag{I.1}$$

$$|\Psi\rangle = \int d^3p_0\ \ |p_0\rangle\langle p_0|\,|\Psi\rangle \tag{I.2}$$

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

$$|\psi\rangle = \int dx\ \ |x\rangle\langle x|\ \ |\psi\rangle = \int dx\ \ |X\rangle\langle x|\psi\rangle \tag{I.3}$$

$$= \int \psi(x)\,|x\rangle\,. \tag{I.4}$$

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

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \tag{I.5}$$

Dès lors,

$$\begin{aligned}
\langle p|\psi\rangle &= \langle p|\mathbb{I}|\psi\rangle \\
&= \langle p| \int dx\, |x\rangle \langle x|\,|\psi\rangle\rangle \\
&= \int dx\, \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle \\
\langle p|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\; e^{i\frac{px}{\hbar}} \psi(x) = \tilde{\psi}(p)
\end{aligned} \tag{I.6}$$

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

Pour résumer, nous avons que

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{r}) \tag{I.7}$$

$$\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) \tag{I.8}$$

1.4 Produit scalaire de deux vecteurs

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

$$\begin{aligned}
\langle \varphi|\psi\rangle &= \langle \varphi| \int dx\;\; |x\rangle \langle x|\,|\,|\psi\rangle\rangle & \langle \varphi|\psi\rangle &= \langle \varphi| \int dp\;\; |p\rangle \langle p|\,|\psi\rangle \\
&= \int dx\;\; \langle \varphi|x\rangle \langle x|\psi\rangle & &= \int dp\;\; \langle \varphi|p\rangle \langle p|\psi\rangle \\
\langle \varphi|\psi\rangle &= \int dx\; \varphi^*(x)\psi(x) & \langle \varphi|\psi\rangle &= \int dp \tilde{\varphi}^*(p)\tilde{\psi}(p)
\end{aligned} \tag{I.9}$$

2 Opérateurs X et P

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

$$|\psi'\rangle = X\,|\psi\rangle \tag{I.10}$$

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

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = x\psi(x,y,z). \tag{I.11}$$

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

$$\langle \boldsymbol{r}|X|\psi\rangle = x\,\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \qquad \langle \boldsymbol{r}|Y|\psi\rangle = y\,\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \qquad \langle \boldsymbol{r}|Z|\psi\rangle = z\,\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \tag{I.12}$$

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

$$\langle \boldsymbol{p}|P_x|\psi\rangle = p_x\,\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = p_x\tilde{\psi}(p_x) \qquad \langle \boldsymbol{p}|P_y|\psi\rangle = p_y\,\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = p_y\tilde{\psi}(p_y) \qquad \langle \boldsymbol{p}|P_z|\psi\rangle = p_z\,\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = p_z\tilde{\psi}(p_z) \tag{I.13}$$

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

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\langle x|P|\psi\rangle &= \int dp\;\; \langle x|p\rangle \langle p|P|\psi\rangle \\
&= \int dp\; \frac{e^{i\frac{px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} p\tilde{\psi}(p) \\
&= -i\hbar\partial_x(\int dp\; \frac{e^{i\frac{px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) \\
\langle x|P|\psi\rangle &= -i\hbar\partial_x\psi(x)
\end{aligned} \tag{I.14}$$

∎

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

Démonstration. La preuve est assez simple :

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

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

Nous pouvons en déduire que

$$[X_i, X_j] = 0 \qquad [P_i, P_j] = 0 \qquad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{I.15}$$

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*

$$S(\lambda) = e^{-i\frac{\lambda P}{\hbar}} \tag{I.16}$$

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 $[X, S(\lambda)]$. Commecons par remarquer les propriétés suivantes de l'opérateur commutateur.

3.1 Quelques propriétés de l'opétateur commutateur

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

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \tag{I.17}$$

Proposition 3.3. *Pour tout opérateur X et P et tout naturel n,*

$$[X, P^n] = i\hbar nP^{n-1} \tag{I.18}$$

Démonstration. Il s'agit d'une preuve par réccurence. La base se prouve assez facilement ; passons directement à l'étape d'induction :

$$[X, P^{n+1}] = [X, P^n\ P] = [X, P^n]P + P^n[X, P] = i\hbar nP^n + i\hbar P^n = i\hbar(n + 1)P^n$$

∎

Généralisons 3.3 à une fonction pouvant être représentée comme une série, supposée convergente.

Proposition 3.4. *Soit $F(P) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P^n$ une fonction de P. Alors,*

$$[X, F(P)] = i\hbar F'(P) \tag{I.19}$$

Démonstration.

$$[X, F(P)] = \sum_n a_n[X, P^n] = \sum_n a_n i\hbar nP^{n-} = i\hbar F'(P)$$

∎

Cette dernière proposition permet de répondre à la question posée :

$$[X, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda). \tag{I.20}$$

Nous pouvons reformuler cette égalité sous la forme

$$QS(\lambda) = S(\lambda)[Q + \lambda]. \tag{I.21}$$

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,*

$$S(\lambda)\,|x_0\rangle = |x_0 + \lambda\rangle \tag{I.22}$$

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 Ψ, alors $S(\lambda)\,|\psi\rangle$ est un ket d ela 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*

$$\langle x_0|\,S^\dagger(\lambda) = \langle x_0+\lambda| \tag{I.23}$$

Soit alors,

$$\langle x_0|\,S(\lambda) = \langle x_0-\lambda| \tag{I.24}$$

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 $t, \lambda, |\psi\rangle$:

$$e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}S(\lambda)\,|\psi\rangle = S(\lambda)e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\,|\psi\rangle \tag{I.25}$$

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 (*non démontré dans le cadre de ce cours*) exploite le Théorème d'Emmy Nöther.

5 Relations d'incertitudes

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

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

Théorème 5.2. *Soit A,B deux obserables. Alors,*

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\| < [A,B] > \| \tag{I.26}$$

Démonstration. La preuve est laissée en exercice pour le lecteur. ■

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

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

ce qui est exactement la relation (**??**).