

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 ψ , il s'ensuit que $[X, P] = i\hbar$. ■

Nous pouvons en déduire que

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

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 Quelques propriétés de l'opérateur 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. Pour tout opérateur X et P et tout naturel n ,

$$[X, P^n] = i\hbar n P^{n-1} \quad (1.18)$$

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

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

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,

$$[X, F(P)] = i\hbar F'(P) \quad (1.19)$$

Démonstration.

$$[X, F(P)] = \sum_n a_n [X, P^n] = \sum_n a_n i\hbar n P^{n-1} = i\hbar F'(P)$$
■

Cette dernière proposition permet de répondre à la question posée :

$$[X, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda). \quad (1.20)$$

Nous pouvons reformuler cette égalité sous la forme

$$QS(\lambda) = S(\lambda)[Q + \lambda]. \quad (1.21)$$

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,

$$S(\lambda)|x_0\rangle = |x_0 + \lambda\rangle \quad (1.22)$$

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 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

$$\langle x_0|S^\dagger(\lambda) = \langle x_0 + \lambda| \quad (1.23)$$

Soit alors,

$$\langle x_0|S(\lambda) = \langle x_0 - \lambda| \quad (1.24)$$

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

$$e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}S(\lambda)|\psi\rangle = S(\lambda)e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}|\psi\rangle \quad (1.25)$$

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 $\langle A^n \rangle = \langle \psi|A^n|\psi\rangle$, $\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$. 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,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \|\langle [A, B] \rangle\| \quad (1.26)$$

Démonstration. **A compléter.**

■

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 (??).