Chapitre 1

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 :

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

Nous pouvons effectuer plusieurs opérations sur ces objets.

1.1 Espace vectoriel des opérateurs X et P

1.1.1 Normalisation

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

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

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

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

1.1.2 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*.

1.1.3 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 :

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

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

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

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int dx \;\; |x\rangle\langle x| \;\; |\psi\rangle = \int dx \;\; |X\rangle\langle x|\psi\rangle & (.3)\\ &= \int \psi(x)\,|x\rangle\,. & (.4) \end{aligned}$$

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

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

Dès lors,

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

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

Pour résumer, nous avons que

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

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

1.1.4 Produit scalaire de deux vecteurs

En vertue des relations de complétude 1.1.2, il est possible de retrouver le produit scalaire (**??**).

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

1.2 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

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

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

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

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

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

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

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

Proposition 1.2.1. $\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar\partial_x \langle x|\psi\rangle$.

Démonstration.

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

■

Proposition 1.2.2. $[X, P] = i\hbar\mathbb{I}$

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

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

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

1.3 Opérateur translation

Définition 1.3.1. *Soit P, Q, deux observables reliées par la relation $[P, Q] = i\hbar\mathbb{I}$. On définit l'*opérateur translation *$S(\lambda)$ par*

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

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

1.3.1 Propriétés générales du commutateur

Proposition 1.3.2. *Pour tout opérateurs $\hat{A}$,$\hat{B}$ et $\hat{C}$,*

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

Proposition 1.3.3 (Identité de Jacobi)**.** *Le commutateur est un opérateur bilinéaire, antisymétrique et vérifiant l'identité de Jacobi, c'est à dire que*

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0 \tag{.18}$$

Théorème 1.3.4. *Pour tout opérateurs $\hat{A}, \hat{B}$ commutant avec $[\hat{A}, \hat{B}]$,*

$$\exp\left(\hat{A}\right) \times \exp\left(\hat{B}\right) = \exp\left(\hat{A} + \hat{B}\right) \exp\left(\frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{2}\right) \tag{.19}$$

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

Proposition 1.3.5. *Soit $\hat{A}$,$\hat{B}$ deux opérateurs commutant avec $[\hat{A}, \hat{B}]$. Alors, pour tout naturel n,*

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] \tag{.20}$$

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

$$\hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} \qquad \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} \tag{.21}$$

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 1.3.6. *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,*

$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}]F'(\hat{B}) \tag{.22}$$

Démonstration. Remarquons que les hypothèses de 1.3.5 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 :

$$[X, S(\lambda)] = \lambda S(\lambda). \tag{.23}$$

Nous pouvons reformuler cette égalité sous la forme

$$QS(\lambda) = S(\lambda)[Q + \lambda]. \tag{.24}$$

1.4 Valeurs propres et vecteurs propres de Q

1.4.1 Spectre de Q

Proposition 1.4.1. *Soit $|x_0\rangle$ le vecteur propre de X, de valeur propre x_0. Alors,*

$$S(\lambda)\,|x_0\rangle = |x_0 + \lambda\rangle \tag{.25}$$

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 1.4.2. *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 1.4.3. *Nous avons vu que $S(\lambda)|x_0\rangle = |x_0+\lambda\rangle$. Remarquons que l'expression adjointe s'écrit*

$$\langle x_0| S^\dagger(\lambda) = \langle x_0+\lambda| \tag{.26}$$

Soit alors,

$$\langle x_0| S(\lambda) = \langle x_0-\lambda| \tag{.27}$$

Proposition 1.4.4. *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.

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$
$$\langle x|S(\lambda)|\psi\rangle = \langle x-\lambda|\psi\rangle = \psi(x-\lambda)$$

■

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

1.4.2 Invariance par translation

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

$$e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} S(\lambda)|\psi\rangle = S(\lambda)e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}|\psi\rangle \tag{.28}$$

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*).

1.5 Relations d'incertitudes

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

Remarque 1.5.1. *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 1.5.2. *Soit A,B deux observables. Alors,*

$$\Delta A \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\|\langle[A,B]\rangle\| \tag{.29}$$

Démonstration. A compléter. ■

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

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

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