Chapitre 1

Une particule quantique sans spin, à 1 dimension (I)

Dans ce chapitre il y a beaucoup de rappels du cours de licence, mais avec une présentation aussi un peu plus formelle. Nous allons étudier une particule quantique se déplaçant à une dimension x. Il s'agit d'une particule sans degré de liberté interne (sans spin).

Pour fixer les idées, il peut s'agir d'un atome vibrant au coeur d'un matériau ou dans une molécule, soumis aux forces des atomes voisins. Il peut aussi s'agir d'un électron libre se déplaçant dans un fil conducteur (en oubliant le spin).

Dans les premières sections on suppose que la particule quantique est **isolée de son environnement**. Précisément cela signifie que son mouvement n'influence pas le reste de la nature (les particules environnantes). Par contre on accepte que **son environnement exerce sur elle une certaine force** F décrite par une fonction énergie potentielle $V(x)$, d'après la relation $F(x) = -dV/dx$. (La force pouvant même dépendre du temps, mais nous la supposerons indépendante du temps dans ce chapitre).

Avec ces hypothèses, la théorie quantique nous permet de décrire l'état dynamique de la particule par une fonction d'onde. Bien sûr pour être valables en pratique, ces hypothèses nécessitent des approximations. Il est important de noter que le terme "**particule**" sera employé mais que c'est un terme trompeur, puisqu'**il faut imaginer une onde qui est un objet étendu et non ponctuel**.

1.1 Espace des états : les fonctions d'ondes

1.1.1 Espace vectoriel des fonctions d'ondes

Une **fonction d'onde** permet de décrire l'état spatial d'une particule. C'est une fonction à valeurs complexes. Si l'espace est à une dimension (paramétré par la position $x \in \mathbb{R}$), une fonction d'onde est :

$$\psi : x \in \mathbb{R} \to \psi(x) \in \mathbb{C}$$

L'ensemble des fonctions d'ondes noté $\mathcal{H}$ forme un **espace vectoriel complexe** car si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$, alors la somme et le produit par une constante complexe appartiennent aussi à cet ensemble [1] :

$$\text{si } \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H} \text{ et } \lambda \in \mathbb{C} \text{ alors :}$$

$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H} \tag{1.1.1}$$

$$\phi = \lambda\psi_1 \in \mathcal{H} \tag{1.1.2}$$

Mais il s'agit d'un espace vectoriel **de dimension infinie** (voir plus loin) ; cela est lié au fait que une fonction ψ est déterminée par les valeurs de $\psi(x)$ prises en une infinité de valeurs de x différentes.

Dans la **notation de Dirac** on convient de représenter une fonction d'onde ψ par le symbole $|\psi\rangle$ et appelé **ket**. Ainsi on écrira pour eq.(1.1.1)

$$|\varphi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle,$$

$$|\phi\rangle = \lambda|\psi_1\rangle.$$

Il n'y a rien de nouveau dans cette notation, sauf peut être l'image que l'on se fait d'une fonction d'onde. L'image traditionnelle est une fonction $x \to \psi(x)$ représentée par son graphe. Dans la notation de Dirac, on imagine plutôt un point de l'espace vectoriel $\mathcal{H}$, (qui est l'extrémité d'une flèche). Cette image vectorielle suggérée par Dirac (et les mathématiciens) a des avantages certains, mais notre imagination ne permet pas de dépasser la dimension trois, alors que $\mathcal{H}$ est de dimension infinie ! Voir figure (1.1.1).

1.1.2 Exemples importants

Voici deux exemples importants de fonctions d'ondes à une dimension. On se contente de donner ici leur expression et représentation. Leur interprétation physique et mathématique sera donnée plus loin.

1. En mathématiques, **un groupe** est un ensemble G munit d'une loi interne notée $. : (G, G) \to G$ qui est associative, c'est à dire $\forall a, b, c,\ a.(b.c) = (a.b).c$ telle qu'il y ait un élément appelé identité, noté 1, vérifiant : $1.g = g.1 = g,\ \forall g \in G$, et tel que tout élément $g \in G$ ait un inverse noté g^{-1}, c'est à dire : $\forall g \in G,\ \exists g^{-1} \in G,\ g.g^{-1} = g^{-1}.g = 1$.

Un groupe est dit **commutatif** si $\forall\, g, h \in G,\ g.h = h.g$. Dans ce cas il est habituel de noter la loi interne par le signe $+$ $(g.h = g + h)$.

Un **espace vectoriel complexe** E est un ensemble munit d'une loi interne notée $+$, telle que $(E, +)$ est un groupe commutatif, et munit d'une loi externe notée $. :(\mathbb{C}, E) \to E$ qui est distributive par rapport à la loi $+$: $\lambda.(v + w) = \lambda.v + \lambda.w$.

On parle d' **espace vectoriel réel** si la loi externe est : $(\mathbb{R}, E) \to E$.

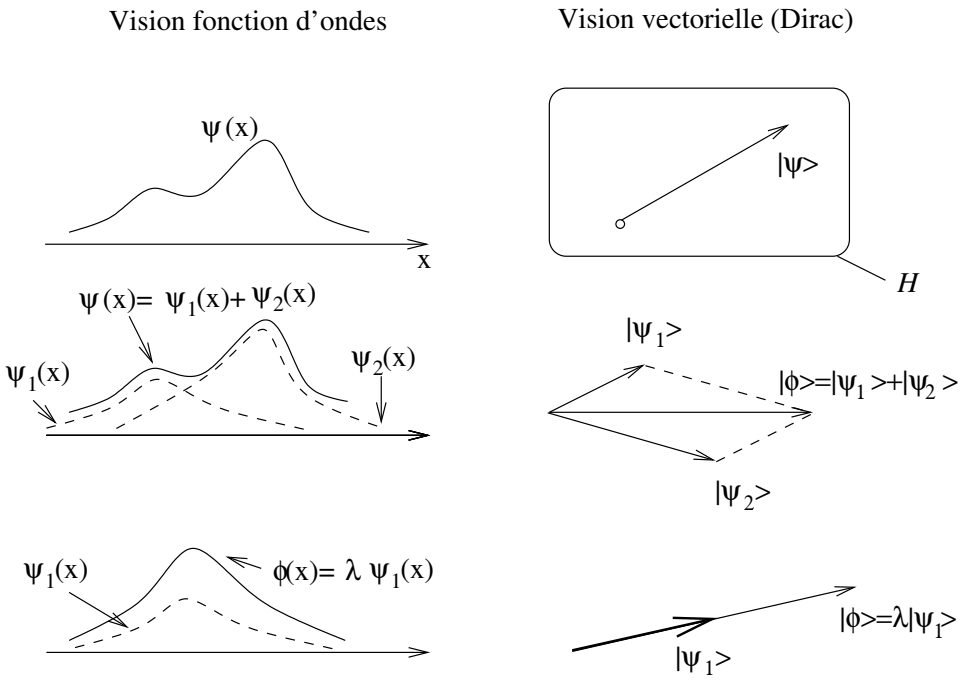


FIGURE 1.1.1 – Cette figure illustre l'aspect vectoriel de l'espace des fonctions d'ondes.

1.1.2.1 Les ondes planes

L'**onde plane** d'impulsion $p \in \mathbb{R}$ est :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \qquad (1.1.3)$$

$$|p\rangle \ : \ \text{notation de Dirac} \qquad (1.1.4)$$

Remarque : l'intérêt du préfacteur sera montré plus loin, avec la relation de fermeture, cf eq(1.5.9).

1.1.2.2 Paquet d'onde Gaussien

Le **paquet d'onde Gaussien** de position moyenne $x_0 \in \mathbb{R}$, d'impulsion moyenne $p_0 \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma \in \mathbb{R}$ est :

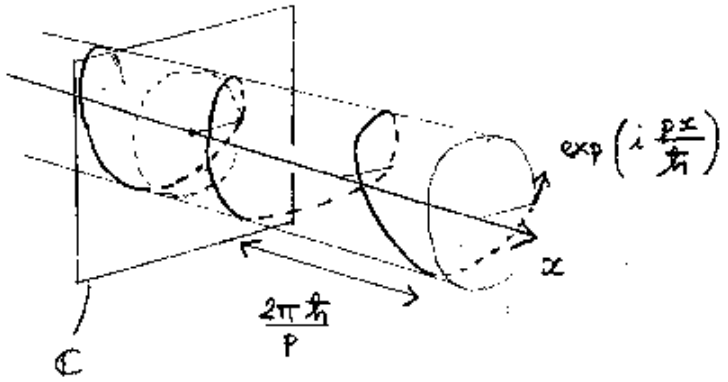


FIGURE 1.1.2 – Onde plane, avec $p > 0$, voir (1.1.3).

$$\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.1.5)$$

$$|x_0, p_0, \sigma\rangle \ : \ \text{notation de Dirac} \quad (1.1.6)$$

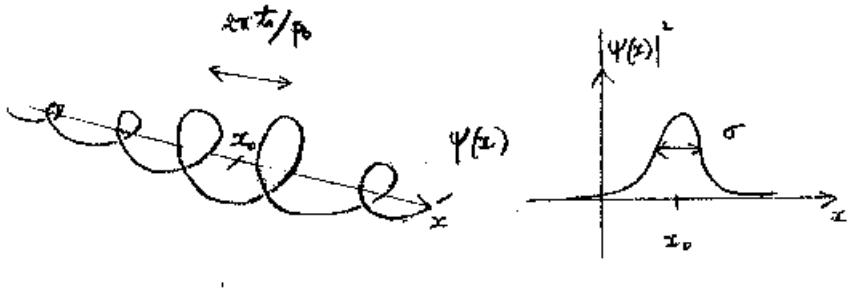


FIGURE 1.1.3 – Paquet d'onde Gaussien, voir (1.1.6).

Remarques :

- la valeur du préfacteur sera justifiée plus loin, pour des raisons de normalisation, voir exercice 1.1.2.
- Lorsque la largeur $\sigma \to \infty$, le paquet d'onde Gaussien tend vers une onde plane d'impulsion p_0 (à condition de modifier aussi le préfacteur).

1.1.3 Le produit scalaire

Afin de pouvoir distinguer de manière quantitative deux fonctions d'ondes différentes, on introduit le produit scalaire.

Le **produit scalaire Hermitien** de deux fonctions d'ondes $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est le nombre complexe noté $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ défini par [2] :

$$\boxed{\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}_1(x)\,\psi_2(x)\,dx} \tag{1.1.7}$$

où $\overline{\psi}_1(x)$ est le nombre complexe conjugué de $\psi_1(x)$. (Une difficulté mathématique apparait : on doit se restreindre aux fonctions pour lesquelles l'intégrale a un sens, i.e. n'est pas divergente. Cela définira l'espace de Hilbert, voir plus loin.)

La notation de Dirac $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ pour le produit scalaire fait clairement intervenir les deux vecteurs $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, mais aussi la notation $\langle\psi_1|$ qui corresponds au fait que l'on a prit le conjugué de la fonction $\psi_1(x)$.

Comme en géométrie Euclidienne, on peut interpréter le produit scalaire $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ comme la composante du vecteur $|\psi_2\rangle$ projetée orthogonalement sur le vecteur $|\psi_1\rangle$. Voir la figure 1.1.4. Intuitivement $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ renseigne donc si la fonction $\psi_2(x)$ est plus ou moins "composée" de la fonction $\psi_1(x)$.

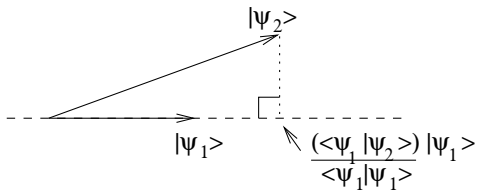


FIGURE 1.1.4 – Schéma du produit scalaire de deux fonctions d'ondes.

Les deux fonctions sont **orthogonales** si $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$.

Comme en géométrie Euclidienne, $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$ définit la **norme** au carré de la fonction ψ. En terme de fonction, cela donne [3]

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2\,dx \quad > 0$$

2. Par définition, un **produit scalaire Hermitien** $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ sur un espace vectoriel $\mathcal{H}$ doit vérifier les propriétés suivantes :

1. $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \overline{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}$ (complexe conjugué).
2. $\langle\psi_1|\lambda\psi + \mu\varphi\rangle = \lambda\langle\psi_1|\psi\rangle + \mu\langle\psi_1|\varphi\rangle$: linéarité à droite
3. $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ avec égalité si et seulement si $|\psi\rangle = 0$.

On déduit de (1) et (2) l'antilinéarité à gauche : $\langle\lambda\psi + \mu\varphi|\phi\rangle = \overline{\lambda}\langle\psi|\phi\rangle + \overline{\mu}\langle\varphi|\phi\rangle$. Dans le cas présent, ces trois propriétés sont vérifiées ci-dessous.

3. Comme $\|\psi\|^2 \in \mathbb{R}$, cette équation montre que $|\psi(x)|^2\,dx$ n'a pas d'unité, et donc que en dimension 1, $\psi(x)$ a l'unité de "$1/\sqrt{\text{longueur}}$".

et donc la norme carré $\|\psi\|^2$ est la surface sous la courbe positive $|\psi(x)|^2$.

On dit qu'un vecteur est **normalisé** si $\|\psi\| = 1$, c.a.d. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Cela signifie en terme vectoriel que le vecteur est de longueur 1. En terme de fonction cela signifie que la surface sous la courbe $|\psi(x)|^2$ est égale à 1.

(Cette notion sera essentielle page 63 pour interpréter $|\psi(x)|^2$ comme une densité de probabilité de présence lors de la détection de la particule, voir eq(1.6.3)). [4]

Il faut remarquer qu'il y a des fonctions dont la norme est infinie. Par exemple pour une onde plane, $\langle\psi_p|\psi_p\rangle = \int_{\mathbb{R}}(1/h)dx = \infty$ d'après (2.2.22). L'espace des fonctions pour lesquelles la norme est finie sera noté $\mathcal{H}$ dans la suite et appelé l'**espace de Hilbert** [5] des fonctions d'ondes (appelé aussi l'espace des fonctions de carré sommable). D'un point de vue physique cette restriction sera importante pour parler de la probabilité de présence de la particule lors de sa détection, et d'un point de vue mathématique, c'est aussi important car l'espace de Hilbert aussi noté :

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$$

possède des propriétés très intéressantes, notamment vis à vis de la transformée de Fourier, voir [RS72, CB73], et se prête bien à la théorie spectrale.

Exercice 1.1.1. Montrer que l'espace des fonctions de carré sommable est un espace vectoriel. (il faut vérifier les relations (1.1.1)).

Exercice 1.1.2. Montrer que le paquet d'onde gaussien (1.1.6) est normalisé.

Exercice 1.1.3. Calculer le produit scalaire entre deux paquet d'ondes Gaussien $|x_0, p_0, \sigma\rangle$ et $|x_0', p_0', \sigma\rangle$, et interpréter le résultat.

Remarques et propriétés utiles :

- On a pour $\lambda \in \mathbb{C}$,

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}$$
$$\langle\lambda\,\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\lambda}\langle\psi_1|\psi_2\rangle$$
$$\langle\psi_1 + \psi_2|\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_3\rangle + \langle\psi_2|\psi_3\rangle$$

4. En général pour un produit scalaire hermitien, on peut montrer les deux propriétés suivantes :
   1. $|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle$: inégalité de Schwartz
   2. $\|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\|$: inégalité triangulaire

Ces deux égalité sont vérifiées si et seulement si les deux vecteurs sont colinéaires (i.e. $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$)

5. Une définition précise de cet espace est

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) := \overline{\{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})\}}$$

où $C_0^\infty(\mathbb{R}) := \{\varphi \in C^\infty, \exists R > 0, \forall |x| > R, \varphi(x) = 0\}$ est l'ensemble des fonctions infiniment dérivables à support compact (i.e. nulle en dehords d'un intervalle) et qui sont donc de carré sommable et $\overline{\{.\}}$ signifie la fermeture ou complétion pour la norme $\|\varphi\| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}$ (i.e. on considère toutes les limites possibles des suites de Cauchy, Voir [RS72] page 39).

Démonstration. $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \overline{\psi_1(x)}\psi_2(x)\,dx = \overline{\int \psi_1(x)\overline{\psi_2(x)}\,dx} = \overline{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}$. etc... □

- D'autres espace de Hilbert que l'on rencontre souvent pour décrire une particule à une dimension sont

  — Pour décrire une particule confinée dans le segment $x \in [0, L]$, c'est l'espace des fonctions de carré sommable $\psi(x)$, s'annulant en dehors du segment, et noté :
  $$\mathcal{H} = L^2([0, L])$$
  — Pour décrire une particule confinée sur un cercle S^1 (par exemple un électron dans un petit fil conducteur circulaire, appelé **fil quantique**), c'est l'espace des fonctions de carré sommable périodiques $\psi(\theta)$, où θ est la position angulaire sur la fil circulaire, et noté :
  $$\mathcal{H} = L^2\left(S^1\right)$$
  — Il est parfois utile de considérer d'autres produits scalaires que (1.1.7) (et d'autres normes associées). C'est ainsi que l'on défini les **espaces de Sobolev** par exemple [Tay96a].

1.1.4 Vecteur dual, espace dual

Mathématiquement, on peut interpréter le produit scalaire autrement : pour $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vecteur fixé, l'opération noté $\langle\phi|$ (en notation de Dirac) :

$$\langle\phi| \quad : \begin{cases} \mathcal{H} & \longrightarrow \mathbb{C} \\ |\psi\rangle & \longrightarrow \langle\phi|\psi\rangle \end{cases}$$

est une application qui à un vecteur quelconque $|\psi\rangle$ lui associe un nombre complexe (le résultat du produit scalaire avec $|\phi\rangle$). Cette opération est linéaire car $\langle\phi|\lambda\psi_1 + \mu\psi_2\rangle = \lambda\langle\phi|\psi_1\rangle + \mu\langle\phi|\psi_2\rangle$. On dit alors que $\langle\phi|$ est une **forme linéaire** sur $\mathcal{H}$, ou aussi appelé un **vecteur dual**. L'espace des vecteurs duaux (formes linéaires sur $\mathcal{H}$) est noté $\mathcal{H}^*$, et appelé **espace dual**. Le vecteur dual $\langle\phi|$ est aussi appelé **bra** (dans la littérature physique).

On vient de voir que à partir d'un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, on peut construire un vecteur dual noté $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$, grâce au produit scalaire. Inversement, un théorème important (le Lemme de Riesz, voir [RS72] page 43) montre que tout vecteur dual s'obtient de cette façon. On a donc **l'isomorphisme de Riesz** :

$$|\phi\rangle \in \mathcal{H} \to \langle\phi| \in \mathcal{H}^*$$

définit à partir du produit scalaire.

Il est important de noter que

$$\text{si } |\phi\rangle = \lambda|\psi_1\rangle + \mu|\psi_2\rangle,$$
$$\text{alors } \langle\phi| = \overline{\lambda}\langle\psi_1| + \overline{\mu}\langle\psi_2|$$

Si la notion de vecteur dual vous parait trop abstraite, il suffit de retenir qu'un vecteur dual $\langle\phi|$ sert à effectuer le produit scalaire $\langle\phi|\psi\rangle$ avec un autre vecteur.

1.2 Opérateurs différentiels $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$

1.2.1 Définitions

Un **opérateur** transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur). C'est donc une opération dans l'espace des fonctions d'ondes $\mathcal{H}$. Voici la définition des trois opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ d'après leur action sur des fonctions. On donnera plus loin leur interprétation physique et mathématique, ce qui justifiera leur définition.

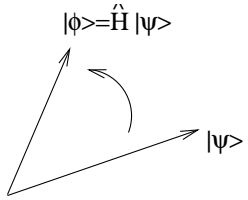


FIGURE 1.2.1 – Schéma d'un opérateur qui transforme les vecteurs.

Opérateur de position $\hat{x}$:

$$|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = x\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \tag{1.2.1}$$

Opérateur d'impulsion $\hat{p}$:

$$|\phi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = -i\hbar\frac{d\psi}{dx}(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \tag{1.2.2}$$

Opérateur Hamiltonien (ou énergie) $\hat{H}$:

$$\begin{aligned} |\phi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \text{ défini par } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \\ \text{donc } \phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{1.2.3}$$

On dit que ce sont des **opérateurs différentiels** car ils sont définit à partir de l'opération de dérivation et de multiplication par la fonction x.

Exemples (*) : Supposons (sans se soucier des unités) que $\psi(x) = \exp(-x^2)$.
Si $|\phi >= \hat{x}|\psi >$ alors $\phi(x) = x\exp(-x^2)$.
Si $|\phi >= \hat{p}|\psi >$ alors $\phi(x) = -i\hbar 2x\exp(-x^2)$.
Si $|\phi >= \hat{H}|\psi >$et $V(x) = gx^4$, alors $\phi(x) = (gx^2 - 4\hbar^2/(2m))\, x^2 \exp(-x^2)$.

1.2.2 Opérateurs linéaires

On dit que $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont des opérateurs linéaires d'après la définition suivante.

Définition 1.2.1. Un opérateur $\hat{T}$ est un **opérateur linéaire** si

$$\forall |\psi_1 >, |\psi_2 > \in \mathcal{H}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{C},$$
$$\text{alors } \hat{T}\left(\lambda|\psi_1 >\right) = \lambda\left(\hat{T}|\psi_1 >\right)$$
$$\text{et } \hat{T}\left(|\psi_1 > + |\psi_2 >\right) = \hat{T}|\psi_1 > + \hat{T}|\psi_2 >$$

Propriétés et remarques (*)

- On convient souvent de mettre un "chapeau" sur le symbole d'un opérateur. Parfois, on omettra cette convention lorsque ce sera clair.
- L'ensemble des opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel, noté $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. (à vérifier. On peut aussi associer le **produit scalaire de Hilbert-Schmidt** comme $\left\langle \hat{T}_1 | \hat{T}_2 \right\rangle := \mathbf{Tr}\left(\hat{T}_1^{+}\hat{T}_2\right)$ lorsqu'il est défini).
- Si $\hat{T}_1, \hat{T}_1$ sont deux opérateurs linéaires, alors $\hat{T}_1\hat{T}_2$ (la composition) est aussi linéaire.
- $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont des opérateurs linéaires.
- L'opération qui transforme un vecteur en lui même (c.a.d. opération qui ne fait rien) est une opération linéaire, appelée l'**opérateur identité :**

$$\hat{I} : |\phi > \in \mathcal{H} \to |\phi > \in \mathcal{H}.$$

- Cette propriété de linéarité est très "contraignante" pour la transformation $\hat{T}$, car pour connaître son action sur n'importe quel vecteur, il suffit de connaître son action sur une base. (voir page 41).
- Remarquons que $\psi(x) = \frac{1}{1+x} \in L^2(\mathbb{R})$, car $\langle\psi|\psi\rangle < \infty$. Mais si $|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$, on a $\phi(x) = \frac{x}{1+x} \notin L^2(\mathbb{R})$ car $\langle\phi|\phi\rangle = \infty$. On dit que ϕ n'appartient pas au **domaine de définition** de l'opérateur $\hat{x}$. La notion de domaine de définition est essentielle pour faire la théorie mathématique correcte des opérateurs linéaires non bornés. (Voir [RS72] chapitre VIII).

1.2.3 Opérateurs adjoints et autoadjoints

Dans la suite, on utilise la notation :

$$|\hat{T}\psi >= \hat{T}|\psi >\in \mathcal{H}.$$

Définition 1.2.2. Si $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ est un opérateur linéaire, l'**opérateur adjoint** de $\hat{T}$ est l'opérateur linéaire, noté $\hat{T}^+$, vérifiant :

$$< \phi|\hat{T}^+\psi >=< \hat{T}\phi|\psi >, \quad \forall|\phi >, |\psi >\in \mathcal{H}.$$

Propriétés et remarques

- la relation ci-dessus définit bien l'opérateur adjoint et de façon unique (on ignore ici les questions de domaine, voir [RS72] page 252).
- On a
$$\left(\hat{T}^+\right)^+ = \hat{T}$$
preuve : $< \phi|\hat{T}^{++}\psi >=< \hat{T}^+\phi|\psi >= \overline{< \psi|\hat{T}^+\phi >} = \overline{< \hat{T}\psi|\phi >} =< \phi|\hat{T}\psi >$
- On a
$$\left(\hat{T}_1\hat{T}_2\right)^+ = \hat{T}_2^+\hat{T}_1^+$$
$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_2\right)^+ = \hat{T}_1^+ + \hat{T}_2^+$$
$$\left(\hat{T}^n\right)^+ = \left(\hat{T}^+\right)^n \quad : \text{pour } n \in \mathbb{N}$$
preuve : $< \phi| \left(\hat{T}_1\hat{T}_2\right)^+ |\psi >=< \hat{T}_1\hat{T}_2\phi|\psi >=< \hat{T}_2\phi|\hat{T}_1^+\psi >=< \phi|\hat{T}_2^+\hat{T}_1^+\psi >$.

Notation de Dirac : Pour un opérateur linéaire, on note $< \phi|\hat{T}|\psi >$ pour signifier :

$$\boxed{< \phi|\hat{T}|\psi >=< \phi|\hat{T}\psi >=< \hat{T}^+\phi|\psi >}$$

Définition 1.2.3. L'opérateur linéaire $\hat{T}$ est **autoadjoint** ou **hermitique** si $\hat{T} = \hat{T}^+$ c'est à dire si

$$< \phi|\hat{T}\psi >=< \hat{T}\phi|\psi >, \quad \forall|\phi >, |\psi > .$$

Proposition 1.2.4. *$\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont des opérateurs autoadjoints.*

Une conséquence de cette propriété est donné plus loin. Voir (1.3.2) page 30.
preuve (TD) : pour tout vecteur $\phi, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$,

$$< \phi|x^+\psi >=< \hat{x}\phi|\psi >= \int_{\mathbb{R}} \overline{x\phi}\psi\, dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi}x\psi\, dx =< \phi|\hat{x}\psi >$$

Idem pour $V(\hat{x})$.
Et

$$\begin{aligned} < \phi|\hat{p}^+\psi > =< \hat{p}\phi|\psi >= & \int \overline{-i\hbar\left(\frac{d\phi}{dx}\right)}\psi\, dx \\ = i\hbar \int \frac{d\overline{\phi}}{dx}\psi\, dx = & -i\hbar \int \overline{\phi}\frac{d\psi}{dx}\, dx =< \phi|\hat{p}\psi > \end{aligned}$$

où on a utilisé la formule d'**intégration par partie**

$$[\overline{\phi}\psi]_{-\infty}^{+\infty} = \int \frac{d\overline{\phi}}{dx}\psi\, dx + \int \overline{\phi}\frac{d\psi}{dx}\, dx$$

et le fait que $[\overline{\phi}\psi]_{-\infty}^{+\infty} = 0$. Finalement,

$$\hat{H}^+ = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)^+ = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \hat{H}.$$

Exercise 1.2.5. On considère les opérateurs A_i $(i = 1, \ldots, 6)$ sont définis comme suit sur l'espace des fonctions à une variable $\psi(x)$:

$$\begin{array}{lcl} (A_1\psi)(x) = (\psi(x))^2 & ; & (A_4\psi)(x) = x^2\psi(x) \\ (A_2\psi)(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} & ; & (A_5\psi)(x) = \sin\big(\psi(x)\big) \\ (A_3\psi)(x) = \int_a^x \psi(x')\, dx' & ; & (A_6\psi)(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \end{array}$$

1. Lesquels sont des opérateurs linéaires ?
2. Parmi les opérateurs linéaires, lesquels sont autoadjoints ?

1.3 Évolution d'un état quantique

1.3.1 L'équation d'évolution

L'**équation de Schrödinger** spécifie comment l'onde quantique $\psi(x,t)$ de la particule évolue au cours du temps. En notation de Dirac, cette équation donne la loi d'évolution du vecteur $|\psi(t)>$ dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$\boxed{\frac{d|\psi(t)>}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)|\psi(t)> \qquad (1.3.1)}$$

c'est à dire que en notation de fonctions d'ondes d'après 1.2.3 page 26 :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x}(x,t) + V(x)\psi(x,t) \quad : \forall\, x,t$$

Remarques

- Remarquer que l'on utilise la dérivée "droite" d/dt si il y a une seule variable, ici t pour le vecteur $|\psi(t)\rangle$, et que l'on utilise la dérivée partielle $\partial/\partial t$ si il y a plusieurs variables, ici (x,t) pour la fonction $\psi(x,t)$.
- L'équation de Schrödinger donne précisément la modification instantanée de l'onde à un instant précis. Cette modification dépend de la masse de la particule et aussi des forces qu'elle subit à travers la fonction potentiel $V(x)$. Pour cette raison on dit que l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ est le **générateur de l'évolution temporelle**. L'équivalent de cette équation d'évolution en mécanique classique est l'équation de Newton, ou plus précisément les équations de Hamilton du mouvement.
- C'est **une équation linéaire**, et donc si l'on connaît l'évolution de $|\psi_1(t)>$ et de $|\psi_2(t)>$, alors la somme $|\phi(0)>=|\psi_1(0)>+|\psi_2(0)>$ évolue comme la somme des évolutions : $|\phi(t)>=|\psi_1(t)>+|\psi_2(t)>$. C'est une propriété très forte, importante pour la suite qui s'appelle aussi **le principe de superposition.** De même le produit $|\phi_2(0)>=\lambda|\psi(0)>$ évolue comme $|\phi_2(t)>=\lambda|\psi(t)>$. Pour cela on peut dire que $\lambda|\psi(t)>$ et $|\psi(t)>$ ont le "même comportement". (En termes mathématiques, l'évolution est définie sur l'espace projectif $\mathbb{P}(\mathcal{H})$. Voir cours de Master 2 [Fau10a] à ce sujet).
- D'après l'équation de Schrödinger, **la fonction d'onde conserve sa norme au cours du temps** :
$$\|\psi\|^2(t) =< \psi(t)|\psi(t)>= const \qquad (1.3.2)$$
preuve :
$$d(<\psi|\psi>)/dt =< d\psi/dt|\psi> + <\psi|d\psi/dt>=< -i\hat{H}\psi/\hbar|\psi> + <\psi| - i\hat{H}\psi/\hbar>$$
$$= (i/\hbar)\left(<\psi|\hat{H}^+\psi> - <\psi|\hat{H}\psi>\right) = 0$$

car $\hat{H}$ est autoadjoint. Cela montre l'importance du fait que $\hat{H}^+ = \hat{H}$. $\square$

Exercice 1. montrer de même que le produit scalaire est conservé $< \psi(t)|\phi(t) >= cste$.

1.3.2 Exemples d'évolutions d'ondes (images et films)

Cette section se trouve sur la page Web : `http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement/meca_q/animations/`, où l'on peut voir des animations, en plus du texte reproduit ci-après.

1.3.2.1 Présentation générale

Hormis quelques cas particuliers, il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger. Pour des problèmes simples avec peu de degrés de liberté, il est possible de la résoudre numériquement (i.e. avec un ordinateur). Dans cette section, nous présentons des solutions obtenues en résolvant numériquement cette équation.

- pour différentes conditions initiales (des paquets d'ondes gaussiens, ou des ondes stationnaires),
- pour différentes forces externes (choix du potentiel de la forme $V(x) = 0$,$V(x) = x^2$, $V(x) = x^2 + \lambda x^4$, $V(x) = -x^2 + \lambda x^4$),
- et comparaison avec l'évolution d'une particule (ou nuage de particules) classique soumise aux mêmes forces, évoluant avec l'équation de Newton.
- Il y aura des commentaires sur l'étalement de la fonction d'onde du à la **dispersion**, et sur **l'effet tunnel.**
- Et des commentaires sur la nécessité de voir **la mécanique quantique dans l'espace des phases**.

Modèle étudié : La dynamique est spécifiée par son Hamiltonien (l'énergie de la particule), qui est de la forme :

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

où m est la masse de la particule, et $V(x)$ est le potentiel qu'elle subit. (La force est $F(x) = -dV/dx$).

L'état quantique initial est un paquet d'onde Gaussien de largeur L. L'évolution de la particule classique est obtenue en résolvant numériquement les équations de mouvement de Newton (ou Hamilton). L'évolution de la fonction d'onde quantique est obtenue en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger. Dans la suite les paramètres suivants sont choisis :

$$\begin{aligned} m = 1 &\quad : \quad \text{masse} \\ \hbar = 1 &\quad : \quad \text{constante de Planck} \\ \sigma = 1 &\quad : \quad \text{Largeur du paquet d onde Gaussien} \end{aligned}$$

1.3.2.2 Définition de la représentation de Husimi dans l'espace de phase

Nous utilisons une représentation d'un état quantique dans l'espace de phase : **la représentation de Husimi**. Cette représentation sera étudiée page 141. Pour le moment nous donnons sa définition qui est intuitive et naturelle :

C'est la fonction :

$$Hus_{\psi}(x,p) = |\langle x,p|\psi\rangle|^2$$

qui est obtenue en faisant le produit scalaire entre l'état $|\psi\rangle$ et un paquet d'onde Gaussien $|x,p\rangle$, et faisant varier (x,p). Le paquet d'onde $|x,p\rangle$ est relativement "localisé" en position et en impulsion et donc, intuitivement, ce produit scalaire sonde la présence de l'état quantique à la position (x,p) de l'espace de phase. Autrement dit, si la fonction $Hus_{\psi}(x,p)$ est importante au point (x,p), c'est que le produit scalaire $\langle x,p|\psi\rangle$ est important et donc que l'état quantique $|\psi\rangle$ est "fortement" composé du paquet d'onde $|x,p\rangle$.

1.3.2.3 L'oscillateur harmonique

Potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2$$

L'état classique initial est choisi en $x_0 = 8,\ p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration x(t) Voir figure (1.3.1).

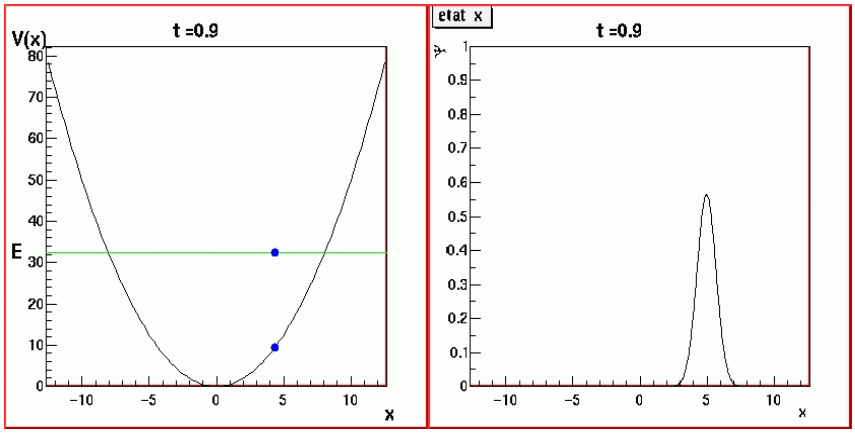


FIGURE 1.3.1 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle $V(x)$.
- Sur la figure de droite, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x,t)|^2$, qui s'interprète comme la densité de probabilité de présence de la particule.

Observations

1. Il y a une correspondance parfaite entre la position de la particule classique et celle du paquet d'onde quantique à tout instant.
2. Le paquet d'onde garde sa forme Gaussienne concentrée au cours du temps. Il n'y a pas de dispersion.

Dynamique classique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.2).

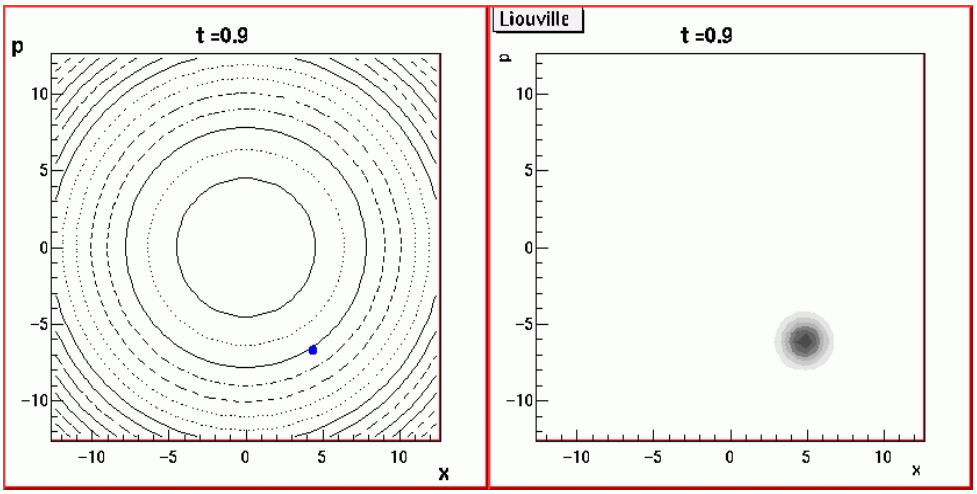


FIGURE 1.3.2 –

Commentaires

- La figure de gauche montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x, p).
- La deuxième image montre l'évolution classique (de Liouville), non plus d'un point, mais d'une distribution $f(x, p, t)$ sur l'espace de phase, qui est choisi comme étant une fonction Gaussienne à $t = 0$. Le niveau de gris est relié à l'intensité de la fonction $f(x, p)$. Cette distribution est répartie sur plusieurs trajectoires.

Observations

1. La période de chaque trajectoire est $T = 2\pi = 6.28$.
2. La distribution de Liouville reste Gaussienne au cours du temps, car les trajectoires ont toutes la même période $T = 2\pi$. Cela explique pourquoi il n'y a pas de dispersion avec l'Oscillateur Harmonique.

Dynamique quantique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.3).

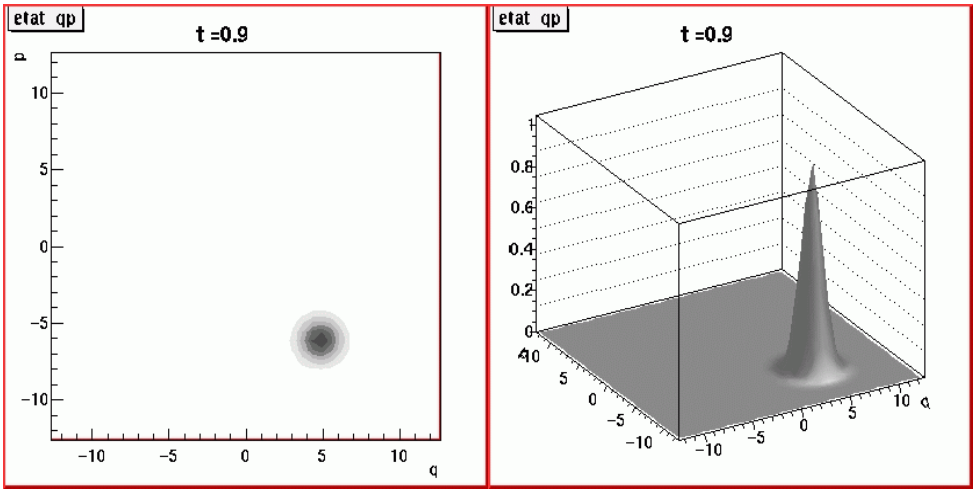


FIGURE 1.3.3 –

Commentaires Il s'agit de la représentation de Husimi de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$. La deuxième image montre cette distribution $Hus_{\psi(t)}(x,p,t)$ en trois dimensions ; la première image montre cette même distribution en niveaux de gris.

Observations Il est remarquable d'observer que à chaque instant la distribution quantique $Hus_{\psi(t)}(x,p,t)$ coincide avec l'évolution classique de Liouville de la même distribution initiale. Cela est propre à l'oscillateur Harmonique, et est encore relié au fait qu'il n'y a pas de dispersion.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulières, appelée ondes stationnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 33, d'énergie $E = 32,5$. Voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.4.

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E.
2. Dans l'espace de phase, l'onde stationnaire est concentrée sur la trajectoire classique d'énergie E. C'est clairement une distribution invariante lors de l'évolution.
3. A x donné, les oscillations de la fonction d'onde $|\psi(x)|^2$ se comprennent à partir de la distribution dans l'espace de phase, comme résultant d'une interférence (superposition) entre la partie d'impulsion positive $p > 0$ de la forme $\exp(ipx)$, et la partie $p < 0$ de la forme $\exp(-ipx)$, donnant au total des oscillations de la forme $\cos(px)$.

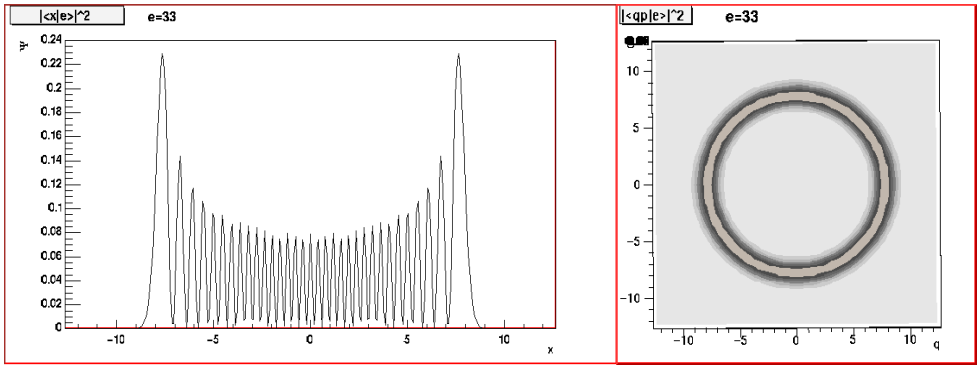


FIGURE 1.3.4 –

1.3.2.4 L'oscillateur Anharmonique

Potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0.02x^4$$

L'état classique initial est en $x_0 = 6$,$p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration x(t) Voir figure (1.3.5).

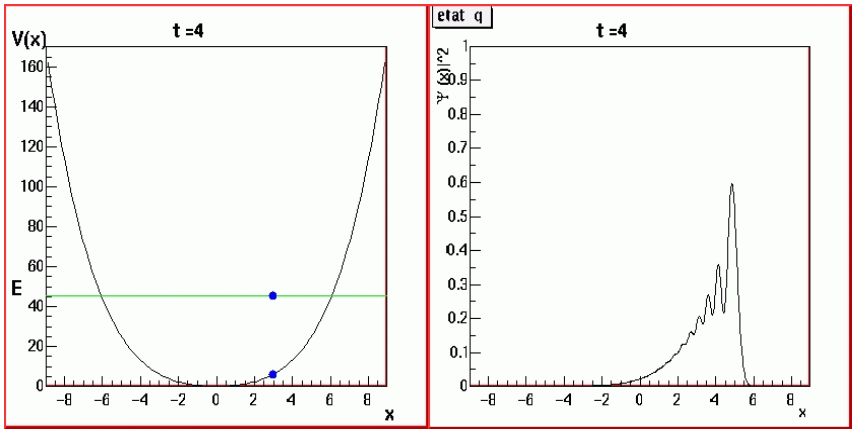


FIGURE 1.3.5 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle $V(x)$.
- Sur la figure de droite, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x,t)|^2$, qui s'interprète comme la densité de probabilité de présence de la particule.

Observations

1. Pour les temps courts, $t < 6$, le paquet d'onde reste concentré, et sa position correspond bien à la position de la particule classique. Cependant, il y a des phénomènes d'interférences lorsque le paquet d'onde rebondit sur les bords du potentiel (oscillations de petites longueurs d'onde).
2. Pour les temps plus longs ($t > 6$), le paquet d'onde se disperse, et s'étale sur toute la largeur permise classiquement.

Dynamique classique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.6).

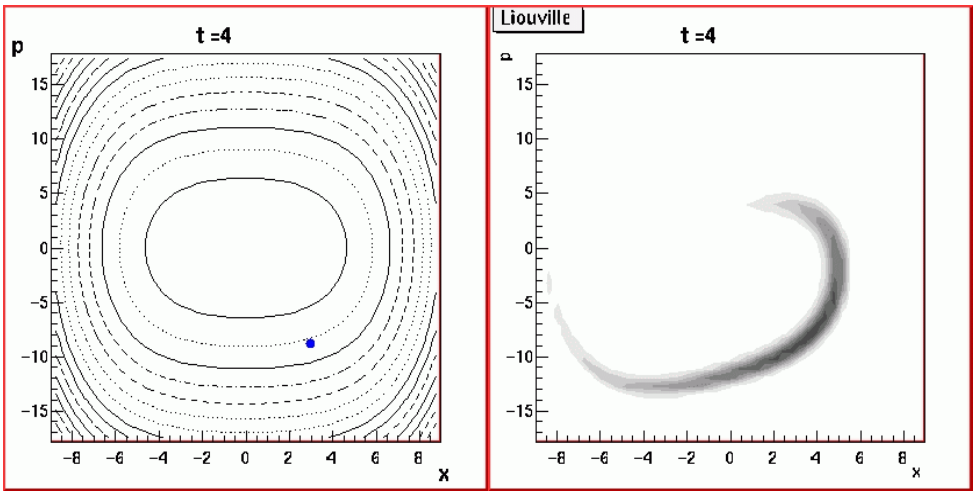


FIGURE 1.3.6 –

Commentaires

- La figure de gauche montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x, p).
- La deuxième image montre l'évolution classique (de Liouville), non plus d'un point, mais d'une distribution $f(x, p, t)$ sur l'espace de phase, qui est choisi comme étant une fonction Gaussienne à t=0. Le niveau de gris est relié à l'intensité de la fonction $f(x, p)$. Cette distribution est répartie sur plusieurs trajectoires.

Observations

1. Contrairement au cas de l'oscillateur harmonique, ici les trajectoires d'énergie différentes ont des périodes différentes. La période diminue avec l'énergie.
2. Cela explique le comportement de la distribution de Liouville dans l'espace de phase : la partie extérieure de la distribution qui a une énergie plus élevée, tourne plus vite que la partie intérieure, et il résulte que la distribution s'étale, et s'enroule. On dit qu'il y a de la dispersion classique.

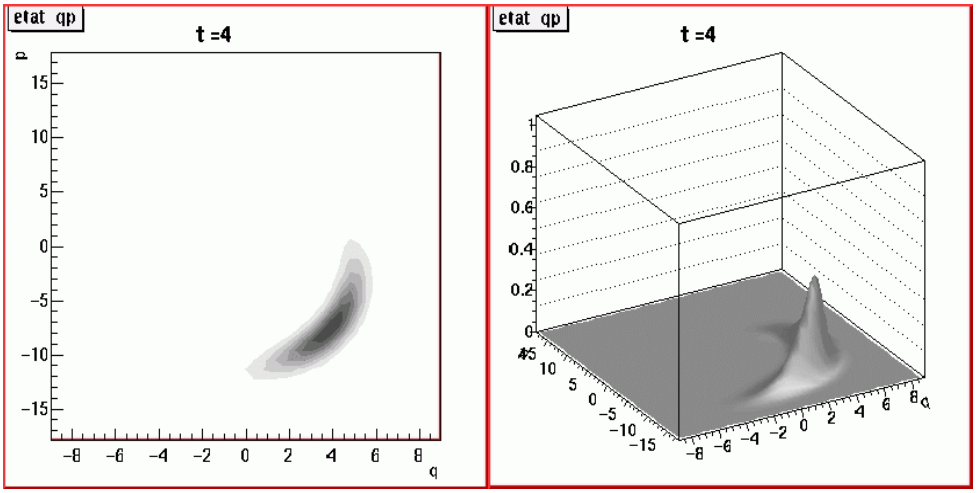


FIGURE 1.3.7 –

Dynamique quantique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.7).

Commentaires Il s'agit de la représentation de Husimi (voir définition ci-dessus) de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de phase. La deuxième image montre cette distribution $Hus\,(x, p, t)$ en trois dimensions ; la première image montre cette même distribution en niveaux de gris.

Observations

1. Pour les temps courts, $t < 6$, la distribution reste localisée.
2. Pour les temps intermédiaires, $6 < t < 18$, la distribution s'étale peu à peu, et s'enroule jusqu'à atteindre une circonférence. Ensuite la partie rapide (la tête) rejoint la queue et interfèrent.
3. Pour les temps longs, $t > 20$, la distribution est répartie sur toute la trajectoire, et parfois des petits paquets apparaissent, à cause de phénomènes d'interférences.
4. Il est intéressant de comparer l'évolution de la distribution de Husimi avec celle de Liouville. Les deux évolutions sont similaires jusqu'à ce que les phénomènes d'interférences quantiques apparaissent pour $t > 20$.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulieres, appelée ondes staionnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 31, d'énergie E : Et voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.8.

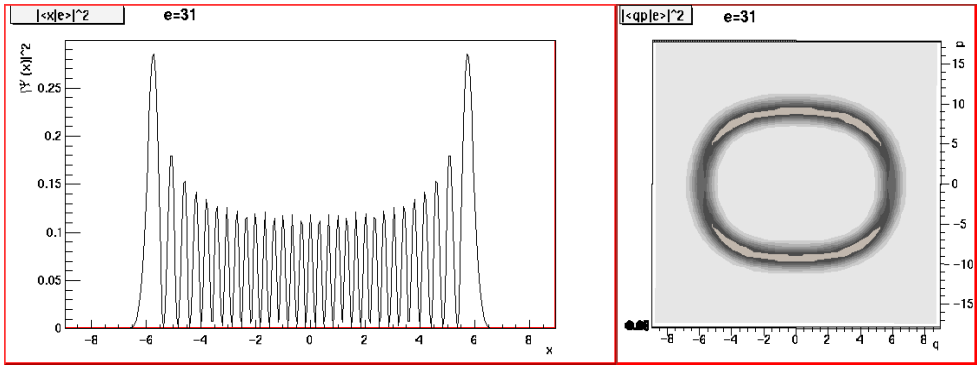


FIGURE 1.3.8 –

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E.
2. Dans l'espace de phase, l'onde stationnaire est concentrée sur la trajectoire classique d'énergie E. C'est clairement une distribution invariante lors de l'évolution.
3. Sur les oscillations de $|\psi(x)|^2$, même remarque que ci-dessus. Voir 1.3.2.3.

1.3.2.5 Le double puits de potentiel

Potentiel :

$$V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + 0.005\,x^4$$

L'état classique initial est en $x_0 = 3,\ p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration x(t) Voir figure (1.3.9).

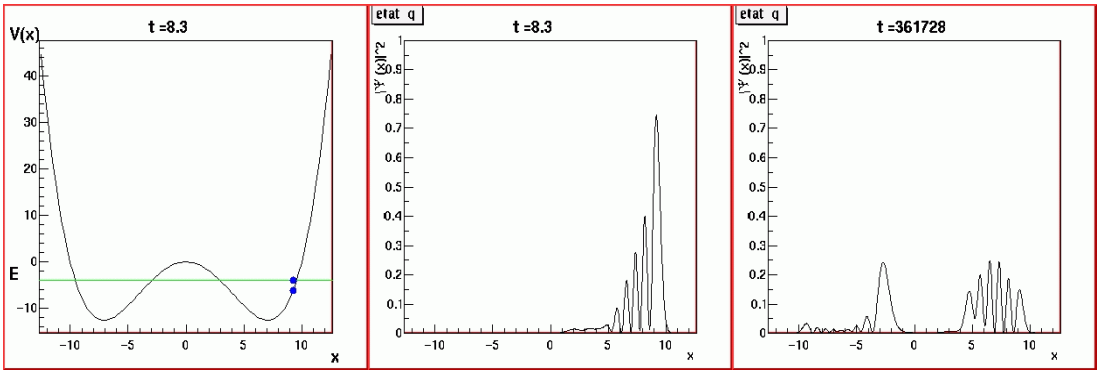


FIGURE 1.3.9 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle V(x).
- Sur les deux autres figures, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x,t)|^2$, qui s'interprète comme la probabilité de présence de la particule. La deuxième figure montre une evolution régulière en temps, $t = 0$ à 10. La troisième figure montre une evolution en temps, $t = 0$ à 10^7 sur une échelle logaritmique.

Observations

1. Pour les temps courts, le paquet d'onde évolue dans le puits de droite, comme dans le modèle de l'oscillateur anharmonique.
2. Pour les temps plus longs (t>500), le paquet apparait dans le puits de gauche. Ce puits de gauche serait permi classiquement, mais la barrière de potentiel empèche la particule classique d'y aller. Pour des temps très longs ($t > 10^6$), l'onde quantique est répartie équitablement dans les deux puits, et fluctue. Ce passage dans le puits de gauche interdit classiquement, s'appelle l'effet tunnel.

Dynamique classique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.10).

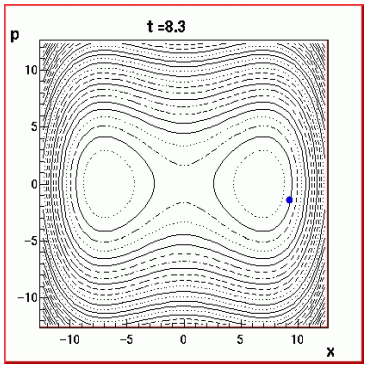


FIGURE 1.3.10 –

Commentaires Cette figure montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x,p).

Dynamique quantique dans l'espace de phase x(t), p(t) Voir figure (1.3.11).

Commentaires

- Il s'agit de la représentation de Husimi de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$. L'intensité de cette distribution Hus(x,p,t) est représentée en niveaux de gris. La première figure

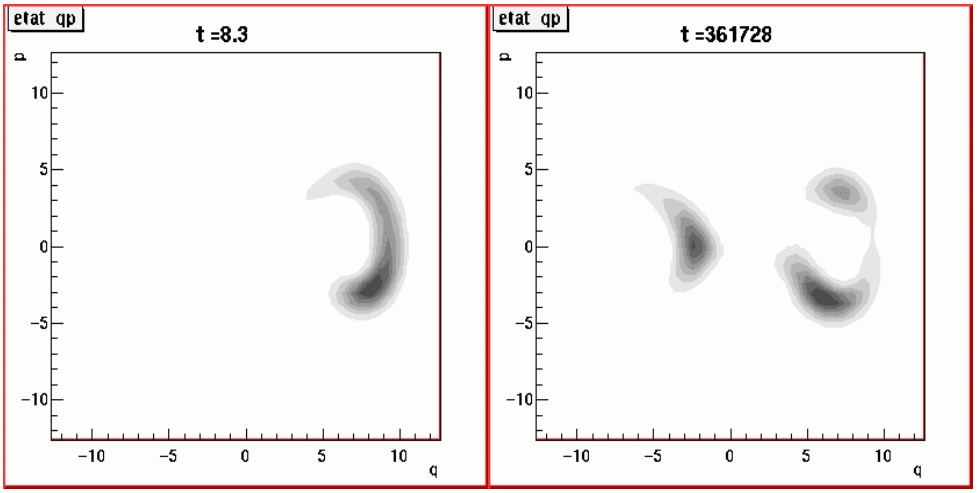


FIGURE 1.3.11 –

montre une evolution régulière en temps, t=0 à 10. La deuxième figure montre une evolution en temps, t=0 à 10^7 sur une échelle logaritmique.

Observations Mêmes observations de l'effet tunnel que ci-dessus.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulieres, appelée ondes staionnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 7, d'énergie E : Et voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.12.

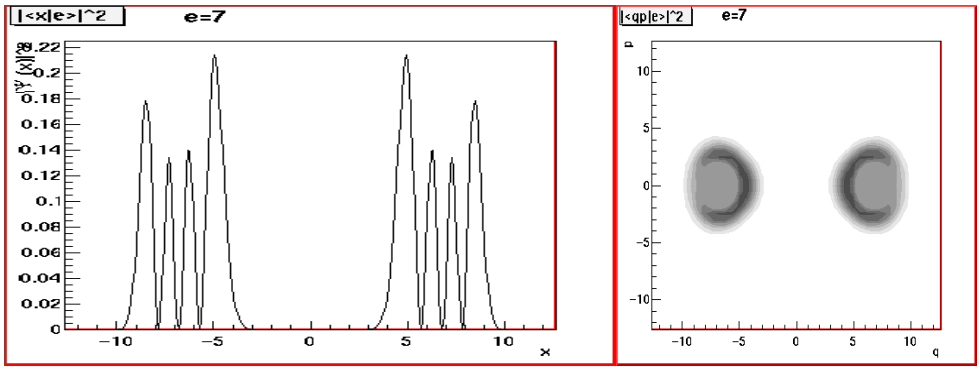


FIGURE 1.3.12 –

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E, dans les deux puits.
2. La barriere de potentiel n'est pas un obstacle. Cela correspond à l'effet tunnel ci-dessus.
3. La forme de l'onde stationnaire est symétrique, et possède donc la même symétrie que le potentiel V(x).

1.4 Bases, et changement de bases

Pour continuer cet exposé de la mécanique quantique, il nous faut maintenant développer quelques aspects mathématiques reliés à cet espace $\mathcal{H}$ des fonctions d'ondes.

1.4.1 Base orthonormée

Définition 1.4.1. Une suite de vecteurs $|V_i >\in \mathcal{H},\ i = 1, 2 \ldots$forme une **base orthonormée** (b.o.n.) de l'espace $\mathcal{H}$, si

$$< V_i|V_j >= \delta_{i,j} \qquad (\delta_{i,j} = 1 \text{ si } i = j, \quad \delta_{i,j} = 0 \text{ sinon})$$

et si tout $|\phi >\in \mathcal{H}$ se décompose sous la forme :

$$|\phi >= \sum_{i=1,2\ldots} \phi_i \, |V_i >, \tag{1.4.1}$$

$$\text{avec } \phi_i \in \mathbb{C} \ \text{ : composantes} \tag{1.4.2}$$

Si la suite de vecteurs $|V_i >, i = 1, 2 \ldots \infty$ est infinie, on dit que l'espace $\mathcal{H}$ est de **dimension infinie**. Sinon, si $i = 1, 2, \ldots, N$, on dit que $\mathcal{H}$ est de **dimension finie** N.

Remarques et propriétés :

- On verra ci-dessous que l'espace des fonctions d'ondes $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ est de dimension infinie. Dans le chapitre suivant, on étudiera l'espace de Hilbert du spin 1/2 qui est de dimension finie $N = 2$.
- Les composantes $\phi_i \in \mathbb{C}$ du vecteur $|\phi >$ dans la base $|V_i >$ sont obtenues par le produit scalaire :

$$\phi_i =< V_i|\phi > \tag{1.4.3}$$

en effet : $< V_i|\phi >= \sum_j \phi_j < V_i|V_j >= \sum_j \phi_j \delta_{i,j} = \phi_i$. Voir figure 1.4.1.

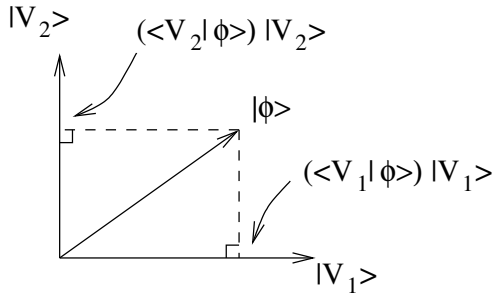


FIGURE 1.4.1 – Schéma de la décomposition du vecteur $|\psi>$ dans la base $|V_1>$,$|V_2>$.

- On a alors
$$<\phi|\phi>=\sum_i |\phi_i|^2$$
et donc forcément $\phi_i \to 0$, pour $i \to \infty$.
preuve : On a $<\phi|\phi>=\left(\sum_i \overline{\phi_i} <V_i|\right)\left(\sum_j \phi_j|V_j>\right)=\sum_{i,j}\overline{\phi_i}\phi_j <V_i|V_j>=\sum_i \overline{\phi_i}\phi_i$.

- (*) Par rapport à la la base $|V_i>$ choisie, on représente le vecteur $|\phi>$ par le tableau de composantes complexes, ou **vecteur colonne** :
$$|\phi>\equiv\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\\ \phi_3\\ \vdots\end{pmatrix}$$
mais attention, si on choisit une autre base, le même vecteur aura d'autres composantes, et sera représenté par un autre tableau.
- (*) Pour des calculs avec un ordinateur, on représente le vecteur $|\phi>$ par un tableau (vecteur colonne), que l'on tronque en ne gardant qu'un nombre fini N (mais très grand) de composantes. La propriété $\phi_i \to 0$, pour $i \to \infty$ mentionnée plus haut garanti que la précision peut être suffisante si N est assez grand.
- (*) Il y a un théorème sur l'existence de b.o.n. dans un espace de Hilbert, voir [RS72] page 44.

1.4.1.1 Exemple d'une particule sur un cercle

Pour décrire une particule confinée sur un cercle S^1 (par exemple un électron dans un petit fil conducteur circulaire, appelé **fil quantique**), l'espace de Hilbert est l'espace des fonctions de carré sommable périodiques :
$$\mathcal{H}=L^2\left(S^1\right)$$
Si le fil est de circonférence L, et si x est la position le long du fil, c'est l'espace des fonctions vérifiant :
$$\phi(x+L)=\phi(x)$$

Propriété Les fonctions

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right), \quad k \in \mathbb{Z} \tag{1.4.4}$$

forment une b.o.n. de l'espace $\mathcal{H} = L^2(S^1)$.

preuve (TD) : on vérifie d'abord l'orthonormalité : $< V_k|V_l >= \frac{1}{L}\int_0^L \exp\left(i(l-k)\frac{2\pi x}{L}\right) dx$. Si $k \neq l$, $< V_k|V_l >= \frac{1}{i(l-k)2\pi}\left[\exp\left(//\right)\right]_0^L = 0$. Si $k = l$, $< V_k|V_l >= 1$. Ensuite le **théorème des séries de Fourier**, dit que toute fonction périodique $\phi(x)$ de carré sommable, peut se décomposer sous la forme :

$$\phi(x) = \sum \frac{\phi_i}{\sqrt{L}} \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right).$$

Pour cette raison, on dit aussi que $|V_k >$ est la **base de Fourier** de $\mathcal{H} = L^2\left(S^1\right)$. □

Exercice 2. Donner une autre b.o.n. possible pour $\mathcal{H} = L^2(S^1)$?

1.4.2 Relation de fermeture

D'après eq.(1.4.1)et eq.(1.4.3) ci-dessus, on a :

$$|\phi >= \sum_i \left(< V_i|\phi >\right)|V_i >$$

que l'on écrit de la façon suivante (en écrivant le nombre complexe $< V_i|\phi >$ à droite du vecteur $|V_i >$) :

$$|\phi >= \sum_i |V_i >< V_i|\phi >= \left(\sum_i |V_i >< V_i|\right)|\phi >$$

ainsi la somme

$$\boxed{\sum_i |V_i >< V_i| = \hat{I} \qquad (1.4.5)}$$

laisse le vecteur $|\phi >$ inchangé, et peut donc être considérée comme l'opérateur identité. Cette expression donnant l'opérateur identité à partir des vecteurs d'une base o.n. s'appelle la **relation de fermeture** ; elle est extrêmement pratique.

Remarques (*)

La notation $Id = \sum_i |V_i >< V_i|$ peut se comprendre de façon précise avec la notion de vecteur dual $< V_i|$. En effet un terme de la somme $\hat{P}_i = |V_i >< V_i|$ correspond à un opérateur qui transforme le vecteur $|\phi >$ en $\hat{P}_i|\phi >= |V_i >< V_i|\phi >= (< V_i|\phi >)\,|V_i >$ c'est à dire en sa projection orthogonale sur le vecteur de base $|V_i >$, voir figure 1.4.1. On la relation

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i$$

qui traduit en général que $\hat{P}_i$ est un **projecteur**, et

$$\hat{P}_i^+ = \hat{P}_i$$

précisant que c'est un **projecteur orthogonal**. L'opérateur identité est alors $\hat{I} = \sum_i \hat{P}_i$.

1.4.3 Expression d'un opérateur dans une base

Plus généralement, pour un opérateur $\hat{O}$, on lui associe ses **éléments de matrice** dans une base o.n. ($|V_i >$) :

$$O_{i,j} =< V_i|\hat{O}|V_j >$$

Les coefficients $O_{i,j},\ i,j = 1, 2, \ldots$ forment une matrice de taille infinie.

Si $|\phi >= \hat{O}|\psi >$, alors les composantes ϕ_i de $|\phi\rangle$ s'obtiennent à partir des composantes ψ_j de $|\psi\rangle$ par la multiplication du vecteur par la matrice

$$\phi_i = \sum_j O_{i,j}\psi_j$$

En effet, à l'aide de la relation de fermeture, on a :

$$< V_i|\phi >=< V_i|\hat{O}\, Id|\psi >=< V_i|\hat{O}\sum_j |V_j >< V_j|\psi >= \sum_j < V_i|\hat{O}|V_j >< V_j|\psi >$$

Ainsi, étant donné une base o.n., il y a une correspondance parfaite entre les vecteurs, et les tableaux colonne d'une part, et les opérateurs et les matrices d'autre part.

Proposition 1.4.2. *Par rapport à la base o.n. $|V_i\rangle_i$, tout opérateur $\hat{O}$ peut s'écrire :*

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{i,j}|V_i\rangle\langle V_j|$$

avec $O_{i,j} = \langle V_i|\hat{O}V_j\rangle$.

Démonstration. On écrit $\hat{O} = \hat{I}\hat{O}\hat{I}$, on utilise la relation de fermeture (1.4.5) et on développe. □

1.4.4 Changement de base (*)

Si $|V_i>, i = 1, 2\ldots$ et $|W_i>, i = 1, 2\ldots$ sont deux bases o.n. différentes du même espace $\mathcal{H}$, et si $|\phi>\in \mathcal{H}$ est un vecteur, ses composantes $\phi_i =< V_i|\phi>$ (respect. $\tilde{\phi}_i =< W_i|\phi>$) dans chacune des bases sont reliées par :

$$\phi_i =< V_i|Id|\phi>= \sum_j < V_i|W_j >< W_j|\phi>= \sum_j < V_i|W_j > \tilde{\phi}_j$$

On a utilisé pour cela la relation de fermeture, et $Q_{i,j} =< V_i|W_j >$ s'interprète comme les éléments de matrice de la "matrice de changement de base", qui est une matrice unitaire.

Exercice 3.

1. montrer que la matrice dans une b.o.n. de l'opérateur adjoint $\hat{O}^+$ est la transposé-conjuguée de la matrice de l'opérateur $\hat{O}$. (On note $O^+ = \overline{O}^t$)
2. Montrer que la matrice dans une b.o.n. d'un opérateur unitaire est une matrice unitaire.
3. Montrer inversement qu'un opérateur unitaire $\hat{Q}$ correspond à un changement de base o.n., par $|W_i >= \hat{Q}|V_i >, \quad i = 1, 2\ldots$.

1.5 Spectre d'opérateurs

1.5.1 Définition et propriétés générales

Dans cette section nous continuons de développer des aspects mathématiques liés aux opérateurs linéaires, qui seront indispensables pour la suite.

Définition 1.5.1. pour un opérateur linéaire $\hat{T}$ donné, on dit que la fonction $|\phi>\in \mathcal{H}$ est un **vecteur propre** de l'opérateur $\hat{T}$, et que $\lambda \in \mathbb{C}$ est sa **valeur propre** associée, si :

$$\hat{T}|\phi>= \lambda|\phi>$$

L'ensemble des vecteurs propres et valeurs propres de $\hat{T}$ forment le **spectre** de l'opérateur $\hat{T}$.

Exercice Trouver le spectre (valeur propres et vecteurs propres) des matrices $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. Dessiner les axes propres dans le plan $\mathbb{R}^2$, et interpréter la particularité des solutions obtenues (angles entre les axes propres, et produit des valeurs propres). Aide : utiliser le résultat en annexe sur le spectre d'une matrice 2×2.

Proposition 1.5.2. *:*

1. ***Si*** $\hat{T}$ ***est un opérateur autoadjoint***, *(i.e.* $\hat{T}^+ = \hat{T}$*),* ***alors la valeur propre*** λ ***est réelle.*** *(*$\lambda \in \mathbb{R}$*).*
2. *Si* $\hat{T}$ ***est un opérateur autoadjoint*** *et si* $\hat{T}|\phi_1 >= \lambda_1|\phi_1 >$*, et* $\hat{T}|\phi_2 >= \lambda_2|\phi_2 >$*, avec* $\lambda_1 \neq \lambda_2$*, alors*
$$< \phi_1|\phi_2 >= 0 \tag{1.5.1}$$
c.a.d. que : ***les vecteurs propres de deux valeurs propres différentes sont orthogonaux.***

Démonstration. 1) On écrit

$$\overline{\lambda} < \phi|\phi >=< \lambda\phi|\phi >=< \hat{T}\phi|\phi >$$
$$=< \phi|\hat{T}^+\phi >=< \phi|T\phi >= \lambda < \phi|\phi >$$

donc $\lambda = \overline{\lambda}$.

2) On a

$$< \phi_2|\hat{T}|\phi_1 >= \lambda_1 < \phi_2|\phi_1 >= \lambda_2 < \phi_2|\phi_1 >$$

donc $(\lambda_1 - \lambda_2) < \phi_2|\phi_1 >= 0$ avec $(\lambda_1 - \lambda_2) \neq 0$, donc $< \phi_2|\phi_1 >= 0$.

□

Remarques

- si $|\phi >$ est un vecteur propre de $\hat{T}$ de valeur propre λ alors $|\phi' >= \mu|\phi >$, (avec $\mu \in \mathbb{C}$ quelconque) est aussi vecteur propre avec la même valeur propre (car $\hat{T}|\phi' >= \hat{T}(\mu|\phi >) = \mu\hat{T}|\phi >= \mu\lambda|\phi >= \lambda|\phi' >$).
  En particulier en peut toujours choisir un vecteur propre $|\phi' >$ normalisé (c.a.d. de norme un : $< \phi'|\phi' >= 1$). Il suffit de prendre :
$$|\phi' >= \frac{1}{\sqrt{< \phi|\phi >}}|\phi >$$
  C'est le procédé de **normalisation** d'un vecteur.
- Un opérateur peut avoir beaucoup de vecteurs propres et valeurs propres différentes ; mais ce ne sont que des vecteurs très particuliers, car la somme de deux vecteurs propres n'est pas un vecteur propre : $\hat{T}(|\phi_1 > +|\phi_2 >) = \lambda_1|\phi_1 > +\lambda_2|\phi_2 >$, sauf si $\lambda_1 = \lambda_2$.
- Il apparaitra parfois (et souvent pour des raisons de symétrie), que plusieurs vecteurs propres $\phi_1, \phi_2, \ldots \phi_N$ aient la même valeur propre λ :
$$\hat{T}\phi_i = \lambda\phi_i, \qquad i = 1 \ldots N$$

Notons $\mathcal{H}_\lambda = \mathbf{Vect}\,(\phi_1, \phi_2, \dots \phi_N)$ l'espace vectoriel engendré par ces vecteurs, cad contenant toutes les combinaisons linéaires, et $\dim \mathcal{H}_\lambda = N$. Si $\psi \in \mathcal{H}_\lambda$, cad si $|\psi\rangle = \psi_1|\phi_1\rangle + \dots \psi_N|\phi_N\rangle$ avec $\psi_i \in \mathbb{C}$, alors $\hat{T}|\psi\rangle = \sum_i \psi_i \hat{T}|\phi_i\rangle = \sum_i \psi_i \lambda|\phi_i\rangle = \lambda|\psi\rangle$ donc ψ est aussi vecteur propre. Autrement dit tous les vecteurs de $\mathcal{H}_\lambda$ sont vecteurs propres de même valeur propre λ. On dit que $\mathcal{H}_\lambda$ est l'**espace propre** associé à la valeur propre λ. On dit que $N = \dim \mathcal{H}_\lambda$ est la **multiplicité** ou la **dégénérescence** de la valeur propre λ. Si $N = 1$, on dit que λ est une **valeur propre simple**. Dans le cas des opérateurs autoadjoints ou unitaire, l'opérateur

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda := \sum_{i=1}^{N} \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} \tag{1.5.2}$$

est une expression utile du projecteur orthogonal sur l'espace propre $\mathcal{H}_\lambda$. (en effet, il vérifie[6] $\hat{\mathcal{P}}_\lambda^2 = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$, $\hat{\mathcal{P}}_\lambda^+ = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$ et $\psi \in \mathcal{H}_\lambda \Leftrightarrow \hat{\mathcal{P}}_\lambda \psi = \psi$). Si les vecteurs propres sont normalisés, $\|\phi_{i,\lambda}\| = \langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle = 1$, l'expression se simplifie :

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda := \sum_{i=1}^{N} |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|$$

La relation de fermeture sur $\mathcal{H}$ s'écrit[7]

$$\hat{I} = \sum_\lambda \hat{\mathcal{P}}_\lambda = \sum_\lambda \left(\sum_{i=1}^{N} |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}| \right)$$

et si l'on suppose de plus que les vecteurs propres de l'opérateur $\hat{T}$ forment une base de l'espace de Hilbert alors

$$\hat{T} = \sum_\lambda \lambda \hat{\mathcal{P}}_\lambda = \sum_\lambda \lambda \left(\sum_{i=1}^{N} |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}| \right)$$

- Si on note $(\lambda_i)_i$, $i = 1, 2, \dots$ la suite des valeurs propres, avec la possibilités de dégénérescences (cad $\lambda_i = \lambda_j$) alors l'écriture ci-dessus devient simplement :

$$\hat{T} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \tag{1.5.3}$$

6.

Démonstration. On a $\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle = \delta_{i,j}\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle$ donc d'après (1.5.2)

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda^2 = \sum_{i,j} \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} \frac{\langle\phi_{j,\lambda}|}{\langle\phi_{j,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle} = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$$

□

7. Pour des opérateurs non autoadjoints et plus précisément non normaux, des relations analogues existent en dimension finie, mais il peut y avoir de grosses difficultés en dimension infinie.

et on a la relation de fermeture

$$\hat{I} = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \tag{1.5.4}$$

Dans la base des vecteurs propres $|\phi_i\rangle$, l'opérateur $\hat{T}$ est représenté par une matrice qui est diagonale (avec $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ sur la diagonale). En effet $T_{i,j} = \langle\phi_i|\hat{T}\phi_j\rangle = \lambda_j\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \lambda_j\delta_{i,j}$.

Le spectre d'un opérateur autoadjoint n'est pas toujours constitué de valeurs propres discrètes. Il peut y avoir du spectre continu comme le montre l'exemple suivant des opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$. Dans tous les cas, on peut cependant considérer que les vecteurs propres forment une "base" et écrire des relations de fermeture comme (1.5.3) et (1.5.4).

1.5.2 Spectre de l'opérateur $\hat{x}$, "base de position"

Une fonction propre de l'opérateur de position $\hat{x}$ serait une fonction *de norme finie et non nulle* $\phi(x)$ telle que $\hat{x}|\phi >= \lambda|\phi >$. Cela donne $x\phi(x) = \lambda\phi(x), \forall x$, soit $(x - \lambda)\,\phi(x) = 0, \forall x$ donc $\phi(x) = 0$ si $x \neq \lambda$. La fonction recherchée $\phi(x)$ est donc nulle partout sauf peut être au point $x = \lambda$. Sa norme est donc nulle.

Conclusion : **l'opérateur $\hat{x}$ n'admet pas de vecteur propre dans l'espace $\mathcal{H}$ (ni de valeurs propres).**

Cependant on peut quand même résoudre partiellement ce problème, par un processus de limite de la façon suivante :

Pour une valeur de $x \in \mathbb{R}$ donnée, et $\varepsilon \in \mathbb{R}$ donné petit, considérons la fonction notée $|x_\varepsilon >$ (ou $x_\varepsilon(x')$) définie par $x_\varepsilon(x') = 1/\varepsilon$ si $x' \in [x, x + \varepsilon]$, et $x_\varepsilon(x') = 0$ sinon. Voir figure (1.5.1).

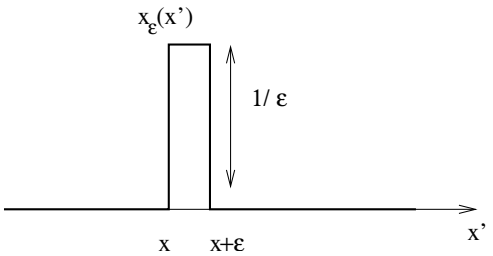


FIGURE 1.5.1 – Fonction $x_\varepsilon(x')$ aussi notée $|x_\varepsilon >$, convergeant vers la distribution de Dirac $|x_\varepsilon >\to |x >$pour $\varepsilon \to 0$.

On a alors

$$< x_\varepsilon|\phi >= \int x_\varepsilon(x')\phi(x')\,dx' = \int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon}\phi(x')dx' \;\to\; \phi(x)\int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon}dx' = \phi(x), \quad \text{pour } \varepsilon \to 0 \tag{1.5.5}$$

Comme la limite $< x_\varepsilon|\phi > \to \phi(x)$ pour $\varepsilon \to 0$, existe pour toute fonction continue $\phi \in C(\mathbb{R})$, on déduit que $\lim_{\varepsilon\to 0}\langle x_\varepsilon|$ est un vecteur dual bien défini noté :

$$\langle x| = \lim_{\varepsilon\to 0}\langle x_\varepsilon|$$

et on a donc la relation importante (qui défini $\langle x|$) :

$$\boxed{< x|\phi >= \phi(x), \qquad \forall\phi} \tag{1.5.6}$$

Et par définition de l'opérateur $\hat{x}$, voir eq.(1.2.1), on a : $(\hat{x}\phi)(x) = x\phi(x)$ que l'on peut écrire :

$$\boxed{< x|\hat{x}|\phi >= x < x|\phi >}$$

(valable pour tout $|\phi >$), donc :

$$< x|\hat{x} = x < x|$$
$$\hat{x}|x >= x|x >$$

La dernière équation montre ce que l'on recherchait :

$|x >$ est vecteur propre de l'opérateur $\hat{x}$ avec la valeur propre x.

En conclusion, le spectre de l'opérateur $\hat{x}$ est constitué par les valeurs propres $x \in \mathbb{R}$, et les états $|x >$ associés. On dit que $\hat{x}$ a un **spectre continu**. (car toutes les valeurs de x sont permises, formant un ensemble continu). Il n'y a pas de contradiction avec la remarque faite plus haut, car $|x\rangle \notin \mathcal{H}$ (En effet $\||x_\varepsilon\rangle\| = \int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon^2}dx' = \frac{1}{\varepsilon} \to \infty$ pour $\varepsilon \to 0$).

Remarques

- Du point de vue physique, si une particule est dans l'état $|x >$, cela signifie que l'onde de la particule est "très localisée" au point x. Précisément, l'onde a une certaine largeur ε (comme la fonction $|x_\varepsilon >$) mais que l'on considère comme très petite (négligeable) ; et bien sûr on espère que la valeur précise de la largeur ε, ainsi que la forme précise de l'onde à petite échelle n'importe pas. Au lieu de la fonction x_ε définie plus haut, on aurait pu prendre n'importe quelle forme se concentrant pour $\varepsilon \to 0$, et vérifiant eq.(49).
- D'un point de vue mathématique, pour $\varepsilon \to 0$, la valeur des fonctions $x_\varepsilon(x)$ diverge, donc la limite $|x >$ *n'est pas une fonction*, c'est à dire $|x\rangle \notin \mathcal{H}$. En physique, on appelle néanmoins cette limite la "**fonction de Dirac**" (introduite par Dirac pour les besoins de la mécanique quantique et avant lui par Heaviside à la fin du XIX ème siècle). Elle est aussi notée $\delta(x' - x)$ (abusivement puisque ce n'est pas une fonction), et la relation fondamentale (1.5.6) s'écrit :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}} \delta(x' - x)\phi(x')dx' = \phi(x)} \tag{1.5.7}$$

- C'est le mathématicien Laurent Schwartz en 1950 [Sch66]qui a donné un sens rigoureux à cette notion, en observant que la relation eq.(1.5.6), montre que $< x|$ est une

forme linéaire qui à la fonction $|\phi>$ associe le nombre $\phi(x)$. Il est donc correct de dire que $<x|$ est un vecteur dual mentionné page 25 (Habituellement noté $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$). Dans cette théorie mathématique, appelée **théorie des distributions**, $<x|$ est appelée la **distribution de Dirac** en x. (Le point de vue physique et mathématique sont donc assez semblables, ce qui est "raisonnable"). La théorie des distributions est fondamentale pour l'étude des équations aux dérivées partielles de la physique. Voir [Tay96a].

- Le fait que $\hat{x}$ a un spectre continu est étroitement relié au fait que les vecteurs propres associés ne sont pas des vecteurs de $\mathcal{H}$.

Exercise 1.5.3. Pour $\varepsilon > 0$, on considère la fonction suivante appelée **Lorentzienne** de largeur ε:

$$L_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \quad (\varepsilon > 0)$$

Tracer l'allure de $L_\varepsilon(x)$. Montrer que la suite de fonctions L_ε ne converge pas vers une fonction pour $\varepsilon \to 0$, mais qu'elle converge au sens des distributions vers la distribution de Dirac $\delta(x)$. Pour cela il faut montrer d'après la définition (1.5.5) ou (1.5.7) que pour toute fonction $\phi(x)$ (qui tend assez vite vers 0 pour $x \to \pm\infty$):

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\langle L_\varepsilon|\phi\rangle = \phi(0)$$

Montrer de même:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{1}{2\varepsilon}\,\mathrm{e}^{-|x|/\varepsilon} \quad ; \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{-x^2/\varepsilon^2}$$
$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{1}{\pi}\tfrac{\sin(x/\varepsilon)}{x} \quad ; \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\tfrac{\varepsilon}{\pi}\tfrac{\sin^2(x/\varepsilon)}{x^2}$$

1.5.2.1 Relation de fermeture en position

En utilisant (1.5.6) on a :

$$\forall|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \quad <\psi_1|\psi_2> = \int \overline{\psi_1(x)}\psi_2(x)\,dx = \int <\psi_1|x><x|\psi_2>\,dx$$

donc

$$\boxed{\hat{I} = \int |x><x|\,dx}$$

qui est la relation de fermeture dans la base position.

Abusivement, on dira que $|x>$, $x \in \mathbb{R}$ forme une base de l'espace $\mathcal{H}$ dite **base de position**, pour la **représentation en position**. (Attention, ce n'est une base au sens précis du terme, car $|x\rangle \notin \mathcal{H}$).

Ainsi la relation eq.(1.5.6) s'interprète par analogie avec eq.(1.4.3) en disant que :
$\phi(x)$ est la composante du vecteur $|\phi>$ dans la base $(|x>)_x$.

De même on a d'une part $<x|\phi>=\int <x|x'><x'|\phi> dx'$et eq.(1.5.7) : $\phi(x) = \int \delta(x'-x)\phi(x')dx'$. Donc par identification :

$$\boxed{<x|x'>=\delta(x'-x)}$$

Exercice 4. montrer que l'on peut écrire :

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|x><x|dx$$

qui est analogue à (1.5.3) page 47.

Exercice 1.5.4. Si $\hat{A}$ est un opérateur, montrer qu'il est caractérisé par la connaissance de "ses éléments de matrices dans la base position"

$$A\left(x',x\right) := \langle x'|\hat{A}|x\rangle$$

appelée **noyau de Schwartz**. Si ϕ est un vecteur, montrer que

$$\left(\hat{A}\phi\right)(x') = \langle x'|\hat{A}\phi\rangle = \int \langle x'|\hat{A}|x\rangle\langle x|\phi\rangle dx$$

1.5.3 Spectre de l'opérateur $\hat{p}$, "base d'impulsion"

On cherche une fonction $\phi_p(x)$ vecteur propre de l'opérateur $\hat{p}$ (qui sera aussi noté $|p\rangle = |\phi_p\rangle$ pour simplifier), et de valeur propre associée $p \in \mathbb{R}$. C'est à dire tels que :

$$\hat{p}|\phi_p>=p|\phi_p>$$

avec $\phi_p\left(x\right) = \langle x|\phi_p\rangle = \langle x|p\rangle$. D'après (1.2.2), cela donne

$$-i\hbar d\phi_p(x)/dx = p\phi_p(x)$$

soit $\phi(x) = C.\exp\left(ipx/\hbar\right)$. La constante C est arbitraire (cf remarque page 46). On choisit $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ de façon a pouvoir écrire simplement la relation de fermeture ci-dessous, eq.(1.5.9).

Le spectre de $\hat{p}$ est donc constitué par les valeurs propres $p \in \mathbb{R}$ avec vecteur propre associé noté $|p>$ donné par la fonction appelée **onde plane** (on utilise dorénavant la relation (1.5.6)) :

$$\phi_p(x) =<x|p>= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

On remarque que le spectre de $\hat{p}$ est continu, et que les fonctions ϕ_p ont une norme infinie (car $<p|p>=\int_{\mathbb{R}}\frac{1}{(2\pi\hbar)}dx = \infty$). Tout comme les états $|x\rangle$, les fonctions propres ϕ_p ne sont donc pas des vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2\left(\mathbb{R}\right)$.

1.5.3.1 Transformée de Fourier, et relation de fermeture en impulsion

Utilisons ($|p>, p \in \mathbb{R}$) comme une base de $\mathcal{H}$ (Comme expliqué plus haut, il est abusif d'appeler cela une base,). Les composantes d'un vecteur $|\phi>$ dans cette base sont donc $<p|\phi>$, et on a

$$<p|\phi>=\int <p|x><x|\phi> dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-i\frac{px}{\hbar}}\phi(x)\,dx = \tilde{\phi}(p) \tag{1.5.8}$$

montrant que les composantes $<p|\phi>$ sont la fonction **transformée de Fourier** $\tilde{\phi}(p)$ de la fonction d'onde $\phi(x)$ (avec le coefficient $\hbar$ en plus qui est juste un facteur d'échelle, par rapport à la définition mathématique de la transformé de Fourier, voir Annexe). On dit aussi que la base $|p>$ est **la base de Fourier,** et que $\tilde{\phi}(p)$ est la **représentation en impulsion**.

La relation de Fourier inverse (voir Annexe) :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{i\frac{px}{\hbar}}\tilde{\phi}(p)\,dp$$

s'écrit en notation de Dirac :

$$<x|\phi>=\int <x|p><p|\phi> \; dp$$

et montre donc que l'on a la relation de fermeture dans la base d'impulsion :

$$\boxed{\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p><p|\,dp \qquad (1.5.9)}$$

Remarques :

- Sans le choix $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ de la constante ci-dessus, cette relation de fermeture aurait eu un facteur supplémentaire.

1.5.3.2 Applications de la relation de fermeture

d'une part

$$<\phi|\phi>=\int <\phi|x><x|\phi> dx = \int |\phi(x)|^2\,dx$$

d'autre part :

$$<\phi|\phi>=\int <\phi|p><p|\phi> dp = \int \left|\tilde{\phi}(p)\right|^2 dp$$

donc $< \phi|\phi >= \int \left|\tilde{\phi}(p)\right|^2 dp = \int |\phi(x)|^2 dx$ qui est la **relation de Parceval**.

On a $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ avec $p \in \mathbb{R}$, donc pour tout $\phi \in \mathcal{H}$

$$< p|\hat{p}|\phi >= p < p|\phi > \tag{1.5.10}$$

donc :

$$\left(\hat{p}\tilde{\phi}\right)(p) = p\,\tilde{\phi}(p)$$

ainsi l'opérateur $\hat{p}$ agit comme une dérivation dans la base de position (voir définition (1.2.2)), et comme une multiplication dans la base d'impulsion.

Exercice 5. Calculer et représenter la fonction d'onde du paquet d'onde Gaussien en représentation impulsion :$\tilde{\psi}_{x_0,p_0,\sigma}(p) =< p|x_0, p_0, \sigma >$.

Exercice : montrer que l'on peut écrire

$$\langle p'|p\rangle = \delta\left(p' - p\right), \quad \hat{p} = \int p\left(|p\rangle\langle p|\right) dp.$$

Solution : d'après (1.5.9) on a $\langle p'|\phi\rangle = \int \langle p'|p\rangle\langle p|\phi\rangle dp$ montrant que $\langle p'|p\rangle = \delta\left(p' - p\right)$ d'après la définition (1.5.7) de la distribution de Dirac (ici en variable p). On a

$$\langle p'|\left(\int p\left(|p\rangle\langle p|\right) dp\right)|\phi\rangle = \int p\langle p'|p\rangle\langle p|\phi\rangle dp = \int p\delta\left(p' - p\right)\langle p|\phi\rangle dp = p'\langle p'|\phi\rangle = \langle p'|\hat{p}|\phi\rangle$$

d'après (1.5.10). Donc $\hat{p} = \int p\left(|p\rangle\langle p|\right) dp$.

Exercice Écrire l'équation d'évolution de Schrödinger en représentation d'impulsion, pour la fonction $\tilde{\phi}(p, t)$.

1.5.4 Spectre de l'opérateur $\hat{H}$, base des états stationnaires

L'expression exacte de l'opérateur $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ dépend du potentiel $V(x)$ considéré.

Supposons qu'une onde $|\phi_E >\in \mathcal{H}$ (non nulle) vérifie l'équation appelée **équation de Schrödinger stationnaire** :

$$\boxed{\hat{H}|\phi_E >= E\,|\phi_E > \qquad (1.5.11)}$$

La valeur propre $E \in \mathbb{R}$ est appelée **énergie de** $|\phi_E >$ (car E comme le Hamiltonien $\hat{H}$ a la dimension d'une énergie).

Sauf dans des cas particuliers (dus à des symétries), il est impossible de trouver analytiquement l'expression des fonctions propres $\phi_E(x)$ et des valeurs propres E. On doit utiliser des méthodes d'approximation décrites dans le chapitre 8.

Ces cas particuliers à une dimension sont par exemple :

- $V(x) = 0$: potentiel nul, c.a.d. pas de force extérieure, donc **particule libre**.
- $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$: **potentiel quadratique**, c.a.d. force $F(x) = -dV/dx = -kx$ linéaire (dite **Harmonique**).
- Plus généralement $V(x) = ax^2 + bx + c$ par morceaux. Le cas de potentiels constants par morceaux est très étudié en licence.

1.5.4.1 Interprétation physique : onde stationnaire

Si à $t = 0$, $|\phi(0)\rangle = |\phi_E\rangle$ vérifie (1.5.11) alors au cours du temps, l'onde $|\phi(t) >$ évolue d'après (1.3.1) comme :

$$\frac{d|\phi(t) >}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)|\phi(t) >= -i\frac{E}{\hbar}|\phi(t) >$$

dont la solution est explicitement :

$$|\phi(t) >= \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)|\phi(0) > \tag{1.5.12}$$

c'est à dire

$$\phi(x,t) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\phi(x,0).$$

Autrement dit, l'enveloppe de l'onde ne change pas (i.e $|\phi(x,t)|$ est constant au cours du temps), seule sa phase complexe change à vitesse constante (dépendant de E). On dit alors que $|\phi(t) >$ est une **onde stationnaire** ou **un état stationnaire**. Remarques :

- c'est l'analogue des ondes stationnaires sur une corde vibrante qui pulsent d'après l'équation d'évolution des ondes $\partial_t^2\phi - c^2\partial_x^2\phi = 0$.
- Il est important de savoir que les ondes stationnaires (vecteurs propres de $\hat{H}$) sont des solutions particulières. En générale pour une condition initiale quelconque $\phi(x,0)$ l'onde évolue, se déforme et n'est pas stationnaire. Voir exemples ci-dessous. Les ondes stationnaires sont néanmoins importantes pour trois raisons au moins :

  1. Au niveau mathématique, les vecteurs propres de $\hat{H}$ forment une base de l'espace total $\mathcal{H}$.
  2. A température (presque) nulle, un système non isolé se met dans son état de plus basse énergie, qui est l'onde stationnaire de plus basse énergie. A température plus élevée, on montre en physique statistique (loi de Boltzmann) que le système est dans une répartition statistique d'ondes stationnaires de différentes énergies. L'état stationnaire de plus basse énergie s'appelle l'**état fondamental**.
  3. Dans les expériences de spectroscopies (Expérience assez standard pour sonder la matière par le rayonnement), on impose une force stationnaire au système (par exemple une onde monochromatique laser sur une molécule), la faisant transiter vers un état d'énergie spécifique.

- (*) Pour l'opérateur de Schrödinger $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, les vecteurs propres peuvent être choisis comme étant des fonctions $\phi(x)$ réelles (et non complexes), car l'équation différentielle est une équation réelle. **Exercice :** à montrer.

1.5.4.2 Exemple d'une particule libre sur l'axe x

Si $V(x) = 0$ pour tous $x \in \mathbb{R}$, c'est à dire $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, alors les fonctions propres sont les ondes planes $|\phi_E >= |p >$, car $\hat{H}|\phi_E >= \frac{p^2}{2m}|p >$ et donc $E = \frac{p^2}{2m} \geq 0$ est l'énergie cinétique.

Remarques

- Le spectre est continu car toutes les valeurs de $E \geq 0$ sont permises. Cela est relié au fait que à toute énergie $E \geq 0$, la particule peut partir à l'infini. Voir plus loin un critère plus précis, figure 1.5.2.
- Pour une valeur donnée de E, il y a deux fonctions propres différentes associées : $|p >, |-p >$, avec $p = \sqrt{2mE}$. On dit que la valeur propre E est **dégénérée**, avec une **multiplicité** deux.
- (*)La relation de fermeture dans la base d'énergie s'écrit pour la particule libre

$$I = \int_{\mathbb{R}} dp|p >< p|$$

- Physiquement $|p >$ correspond à une onde d'énergie E se déplaçant vers la droite, et $|-p >$ vers la gauche.

1.5.4.3 Exemple d'une particule libre sur un cercle

L'espace des fonctions périodiques est $\mathcal{H} = L^2(S^1)$ déjà décrit page 42. Pour une particule libre $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$. Pour une fonction de base $V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right)$, voir eq.(1.4.4), on a :

$$< x|\hat{p}|V_k >= -i\hbar\frac{dV_k}{dx}(x) = \frac{k2\pi\hbar}{L}V_k(x) = p_k < x|V_k >$$

donc les valeurs propres de l'impulsion sont discrètes

$$p_k = \frac{k2\pi\hbar}{L}, \quad k \in \mathbb{Z}$$

et aussi pour l'énergie $\hat{H}|V_k >= E_k|V_k >$ avec :

$$E_k = \frac{p_k^2}{2m}, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Le spectre d'énergie est à nouveau de multiplicité deux (sauf si $k = 0$), mais cette fois ci le spectre d'énergie est discret. On verra que cela est lié au fait que la particule est confinée sur un cercle. La relation de fermeture en énergie s'écrit :

$$I = \sum_{k\in\mathbb{Z}} |V_k >< V_k|$$

1.5.4.4 Remarques

Spectre discret ou continu ? En général ($V(x)$ quelconque) le spectre de $\hat{H}$ peut avoir une partie discrète (i.e des valeurs propres associée à des fonctions d'ondes normalisées) et une partie continue. C'est le cas dans l'exemple important d'un puits de potentiel, voir figure 1.5.2. Cela sera justifié plus loin.

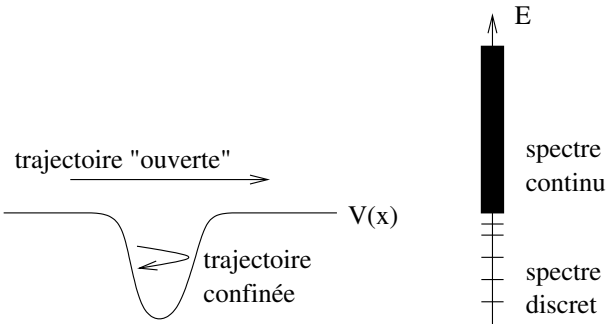


FIGURE 1.5.2 – Schéma d'un Spectre discret et continu en relation avec la nature des trajectoires classiques confinée ou ouvertes (partant à l'infini).

Il y a des exemples moins intuitifs, par exemple celui d'un potentiel $V(x)$ "aléatoire", mais borné ($0 < V(x) < V$), décrivant un électron dans un conducteur contenant des impuretés par exemple. On montre alors que le spectre est constitué de valeurs propres ("spectre ponctuel") discret pour toute valeur d'énergie (même au dessus du potentiel $E > V$) et que toutes les fonctions d'ondes d'énergie sont localisées (norme finie), alors qu'une particule classique d'énergie $E > V$ peut s'échapper à l'infini. C'est le phénomène de **localisation forte de Anderson**.

Relation de fermeture (*) A partir de l'ensemble des vecteurs propres de $\hat{H}$, on peut écrire la relation de fermeture. Supposons que chaque vecteur propre est indicé par i. Alors

$$I = \sum_i |\phi_i >< \phi_i|$$

Dans cette notation un peu vague, il faut comprendre que l'indice i peut être continu si le spectre est continu, et alors $\sum$ est une intégrale. Dans ce cas la relation de fermeture s'écrit :

$$\hat{I} = \int dn|E_n\rangle\langle E_n| = \int \left(\frac{dn}{dE}\right) dE|E_n\rangle\langle E_n| = \int |E_n\rangle\langle E_n|\rho\,(E)\,dE$$

où $\rho\,(E) = \frac{dn}{dE}$ est la densité d'état.

, et que deux indices i différents peuvent correspondre à une même énergie $E = E_i = E_{i'}$ si il y a dégénérescence.

On a de même

$$\hat{H} = \sum_i E_i|\phi_i >< \phi_i|$$

Exercice : Utilisation pour l'évolution d'un état quelconque (TD) : Exprimer $|\phi(t)>$ à partir de $<\phi_i|\phi(0)>$ où $|\phi_i\rangle$ sont les vecteurs propres de $\hat{H}$. Cas d'une particule libre.

1.6 Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure

1.6.1 Opération idéale de mesure d'un système quantique

1.6.1.1 Limite de validité de l'équation de Schrödinger

Jusqu'à présent nous avons supposé que la "particule" (i.e. l'onde quantique) se déplaçant selon l'axe x était parfaitement isolée du reste de la nature, dans le sens où son mouvement n'influençait pas l'environnement.

Donnons dès à présent une définition d'un système quantique isolé :

Définition 1.6.1. Dans une description quantique de deux systèmes en interaction, par exemple un système 1 couplé à un système 2 (par ex. "l'environnement"), on dit que le **système 1 est isolé du système 2 (par ex. de l'environnement)** si l'évolution de l'état quantique de l'environnement $\psi_{env}(t)$ est indépendant de l'état quantique du système 1 (ici $|\psi_1(0)\rangle$ou $|\psi_1'(0)\rangle$) pendant le processus étudié :

$$|\psi_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \to |\psi_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle, \qquad |\psi_1'(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \to |\psi_1'(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle$$

(en écrivant $|\psi_1\rangle|\psi_{env}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_{env}\rangle$ on utilise ici implicitement le produit tensoriel $\otimes$ qui sera introduit plus tard). Pour comprendre le sens de cette définition, remarquer que si le système 1 est préparé dans l'état de superposition $\psi_1"(0) = \psi_1(0) + \psi_1'(0)$ alors son évolution sera décrite par :

$$\begin{aligned}
|\psi_1"(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle &= |\psi_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle + |\psi_1'(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \\
&\to |\psi_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle + |\psi_1'(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle \\
&= (|\psi_1(t)\rangle + |\psi_1'(t)\rangle)\,|\psi_{env}(t)\rangle \\
&= |\psi_1"(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle
\end{aligned}$$

cet état $|\psi_1"(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + |\psi_1'(t)\rangle$ reste donc dans une superposition (cela peut se manifester expérimentalement par des figures d'interférences etc.). Sans l'hypothèse que le système soit isolé, on n'aurait pas pu obtenir cette conclusion.

Naturellement il n'est pas toujours vrai qu'un système soit isolé :

- Si la particule influence seulement quelques autres particules autour d'elle, il faut considérer cet ensemble de particules comme un système quantique dans sa globalité, (caractériser l'espace de Hilbert correspondant) et l'équation d'évolution de Schrödinger s'applique à l'ensemble du système quantique. Ce cas sera décrit dans les chapitres suivants. Par exemple il peut s'agir d'un atome influençant les quelques

atomes voisins dans une petite molécule. Il faut alors traiter la molécule entière par la mécanique quantique.

- Dans d'autres cas la particule influence un nombre incalculable de particules autour d'elle. Nous allons considérer le cas simplifié, lorsqu'un expérimentateur observe la particule afin de connaître son état dynamique comme sa position, sa vitesse ou son énergie : forcément la particule en question influence les appareils de mesure de l'expérimentateur. Et qu'on le veuille ou non ces appareils influenceront (un tant soit peu) leur environnement, ne serait-ce que les molécules d'air, ou les photons autour d'eux.

Dans ce dernier cas, on sort du cadre de la théorie quantique décrite précédemment : ***l'équation d'évolution de Schrödinger ne s'applique plus***, car la particule n'est plus isolée au sens que l'on a convenu. Ce qui se passe alors est décrit par une autre loi appelée **postulat de la mesure** énoncé ci-dessous. Ce postulat a été "découvert" seulement parce qu'il correspond parfaitement aux faits expérimentaux. (On doit dire "découvert" et non pas "inventé").

1.6.1.2 Exemple d'expérience : mesure de la position d'une particule passant par les double fentes de Young.

Afin de se fixer les idées sur un exemple concret, nous décrivons ici une expérience qui mesure la position d'un atome.

La particule est issue d'une source et passe par un dispositif de double fentes de Young (qui a pour but de créer des interférence de l'onde quantique). L'onde quantique arrive ensuite sur une rangée de détecteurs. Voir la figure 1.6.1. Une telle expérience a été réalisée, par exemple avec des atomes (néon), des électrons, et même des molécules C_{60}.

Supposons que la source soit capable de **lancer individuellement des atomes, toujours dans le même état** : un paquet d'onde répartit sur plusieurs directions. Voici la description orthodoxe de cette expérience :

(A) Au sortir de la source, ce paquet d'onde évolue librement (1) ; puis il passe à travers les deux fentes d'Young (2) (une partie est réfléchie), et ensuite les deux parties de l'onde transmises interfèrent entre elles, créant une onde (3) au niveau des détecteurs qui possède des ondulations d'intensité $|\psi(x)|^2$. Durant toute cette période, l'onde a subit l'influence des fentes d'Young, mais elle n'a pas influencé (de façon significative) son environnement. Par conséquent, il est correct de décrire la particule par l'équation de Schrödinger et par une fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$.

(B) En arrivant au détecteurs, la particule interagit avec eux. Il n'est plus correct de continuer à décrire la particule individuellement par l'équation de Schrödinger. De façon surprenante, un seul détecteur situé à la position x_1 détecte la particule. La valeur de x_1 sélectionnée est le fruit du hasard le plus total (Il n'y a aucun moyen de le prédire). On suppose qu'après la détection, la particule n'est pas détruite, et est à nouveau libre. Elle est alors décrite par une fonction d'onde qui est un paquet d'onde localisé en x_1 (la valeur observée). On dit qu'**il y a réduction du paquet d'onde.**

(C) La détection d'un seul atome donne une valeur x_1 de position qui est complètement aléatoire (imprévisible). Mais si l'on répète la même expérience un grand nombre de fois avec le même état initial, on détectera des atomes aux positions successives $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_N$, et l'on s'apercevra que l'histogramme des valeurs de x_i coïncide avec le module carré de la fonction d'onde $|\psi(x)|^2$ à l'approche des détecteurs. Cela signifie précisément, que la courbe ***Nombre de réponses du détecteur(x)* (renormalisée) converge vers** $|\psi(x)|^2$ **pour** $N \to \infty$. Ainsi, après l'envoi de N atomes, les détecteurs touchés seront répartis comme sur la figure (1.6.2).

La seule prédiction que peut faire la mécanique quantique est donc d'ordre statistique : pour $N \to \infty$, l'histogramme converge vers $|\psi(x)|^2$ prédit par la théorie. (Bien que la théorie quantique décrive la fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$ individuelle d'un atome, celle-ci n'est pas observable).

1.6.1.3 Postulat de la mesure

L'expérience que nous venons de décrire montre une application du postulat de la mesure dans le cas d'une mesure de la position de la particule. En fait, ce postulat est valide pour toutes les mesures physiques possibles. Voici sa généralisation.

Supposons que avant la mesure, la particule soit isolée de l'environnement, et décrite par l'état quantique $|\phi> \in \mathcal{H}$.

L'expérimentateur décide de mesurer la position, ou l'impulsion ou l'énergie de la particule, ou toute autre grandeur qui est de même associée à un opérateur **auto-adjoint** noté $\hat{A}$. ($\hat{A} = \hat{x}$ ou $\hat{p}$ ou $\hat{H}$,...). On appelle cet opérateur $\hat{A}$ **l'observable**.

On note le spectre de $\hat{A}$ par

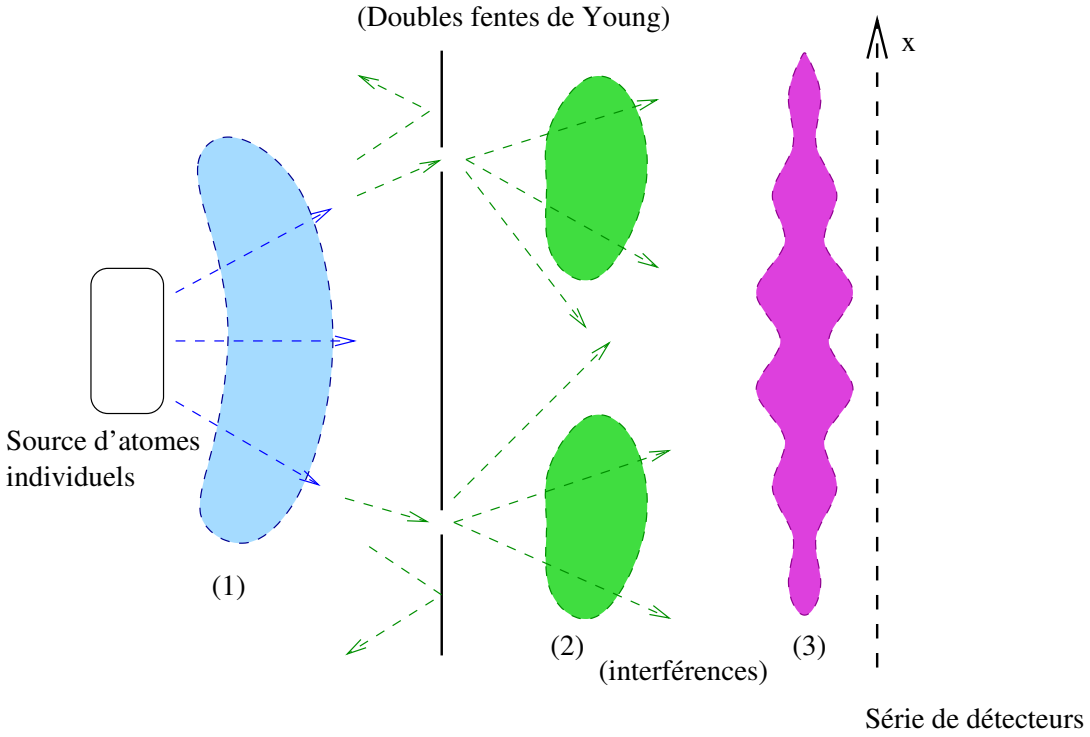
$$\hat{A}|\psi_a> = A_a|\psi_a>$$

où a est un indice discret ou continu et $(A_a)_a$ (nombre réel) sont les valeurs propres. D'après le postulat $(A_a)_a$ sont aussi les différents résultats possibles de la grandeur mesurée. Attention, il peut y avoir des **dégénérescences**, c'est à dire des valeurs propres identiques. $A_a = A_{a'}$ avec des indices $a \neq a'$.

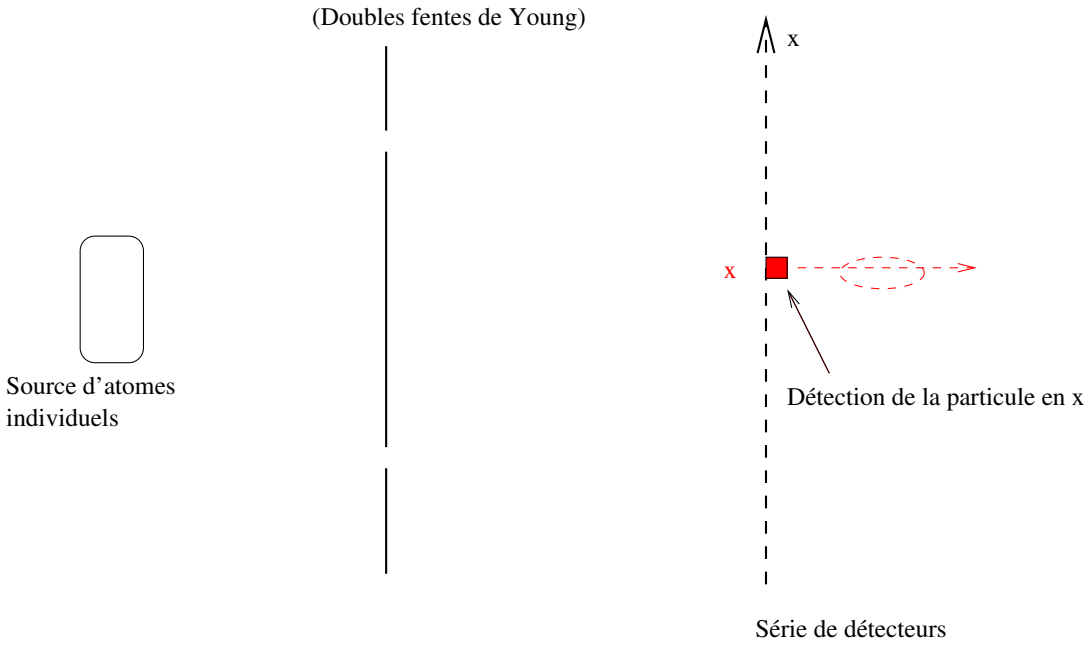
A une valeur propre $A \in \mathbb{R}$ donnée, on associe **le projecteur spectral :**

$$\hat{\mathcal{P}}_A = \sum_{a \text{ tq } A_a = A} \frac{|\psi_a\rangle\langle\psi_a|}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}$$

où la somme porte sur les indices a tel que $A_a = A$. projecteur orthogonal sur l'espace propre associé, voir (1.5.2) page 47.



(A) Avant la détection:
Propagation de l'onde quantique d'un atome,
décrite par l'équation de Schrodinger.



(B) après la détection:
Un détecteur apercoit la particule à la position x (Hasard total !)
La particule est ensuite localisée en x.

FIGURE 1.6.1 – Mesure de la position d'un atome (A) et (B)

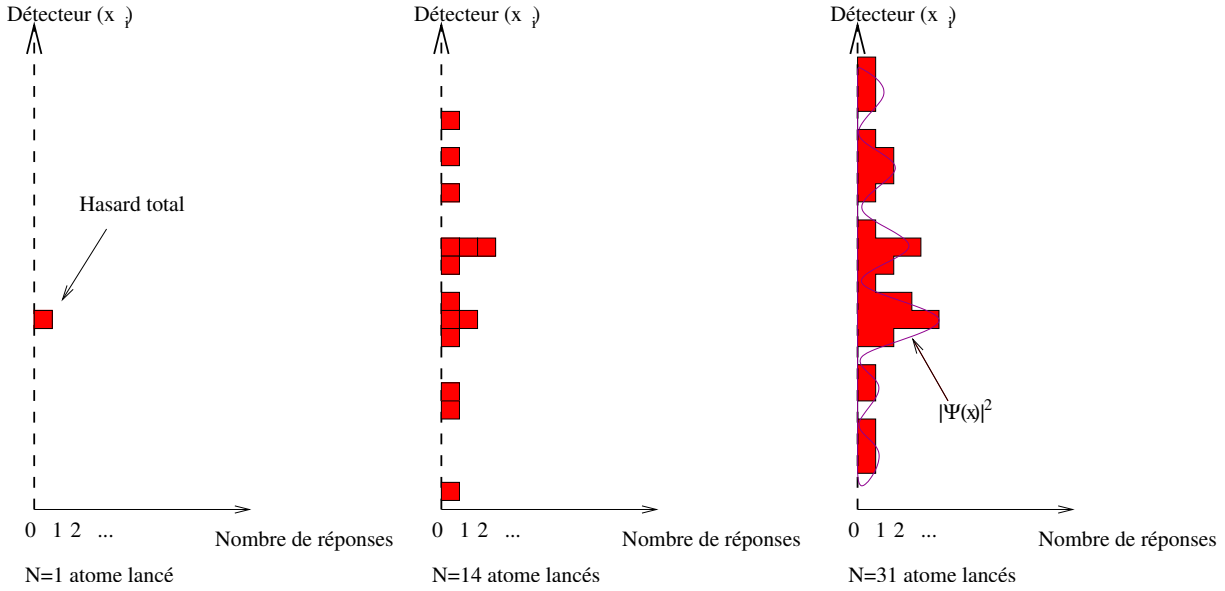


FIGURE 1.6.2 – (C) Réponses des détecteurs après l'envoi de N atomes. La seule prédiction de la mécanique quantique est pour $N \to \infty$: l'histogramme converge vers $|\psi(x)|^2$.

Alors juste après la mesure, la valeur observée sera l'une ou l'autre des valeurs propres A_a selon un hasard total. Si A_a est une valeur propre simple alors la valeur A_a est observée avec la probabilité

$$\text{Proba}\,(A) = \frac{|<\psi_a|\phi>|^2}{<\phi|\phi>\langle\psi_a|\psi_a\rangle} \tag{1.6.1}$$

et dans ce cas, juste après la mesure, la particule se trouve dans l'état

$$|\phi'\rangle = |\psi_a\rangle \frac{\langle\psi_a|\phi\rangle}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}.$$

Plus généralement, si la valeur propre A est dégénérée alors la valeur A est observée avec la probabilité

$$\text{Proba}\,(A) = \frac{\left\|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\right\|^2}{\|\phi\|^2} \tag{1.6.2}$$

et juste après la mesure, la particule se trouve dans l'état

$$|\phi'\rangle = \hat{\mathcal{P}}_A|\phi\rangle.$$

Remarque : si l'indice a est continu alors $P(A) = P_a$ est une **densité de probabilité**, c'est à dire que $P(A)dA$ est la probabilité de détecter A' avec $A' \in [A, A + dA]$.

Remarques

- Noter que dans le cas $N = 1$ (valeur propre A_a simple), les deux énoncés sont équivalents car $\hat{\mathcal{P}}_a = \frac{1}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}|\psi_a\rangle\langle\psi_a|$ donc $\left\|\hat{\mathcal{P}}_a\phi\right\|^2 = \left\||\psi_a\rangle\frac{\langle\psi_a|\phi\rangle}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}\right\|^2 = \frac{|\langle\psi_a|\phi\rangle|^2}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}$.
- Cela signifie précisément que juste après la mesure, un des évènement suivant arrive : soit l'expérimentateur observe la valeur A_1 et alors la particule est passée dans l'état $|\psi_1>$, soit il observe A_2 et la particule est en $|\psi_2>$, etc... on ne sait pas lequel de ces évènement se produit, seulement on sait que c'est A_1 avec la probabilité P_1, ou A_2 avec la probabilité P_2,...Que signifie précisément la notion de probabilité ? Comme expliqué ci-dessus, cela n'a de sens que si l'on répète la même opération de mesure dans des conditions strictement identiques un grand nombre N de fois. Après chaque mesure, on aura un résultat qui résulte du hasard ; on aura une série de résultats disons par exemple $A_1, A_3, A_4, A_1, A_2, A_1, \ldots$. Alors la proportion de A_1 par rapport au total est P_1, la proportion de A_2 est P_2, etc... (autrement dit, appelons N_{A_i} le nombre de fois que le résultat A_i apparaît. alors $(N_{A_i}/N) \to P_i$ pour $N \to \infty$)
- On a $\sum_a P_a = \frac{1}{<\phi|\phi>}\sum_a <\phi|\psi_a><\psi_a|\phi>= \frac{<\phi|\phi>}{<\phi|\phi>} = 1$, donc

$$\sum_a P_a = 1$$

  ce qui est nécessaire pour parler de probabilité. De plus la valeur des probabilité est la même pour deux vecteurs proportionnels : $|\phi>$ et $|\phi'>= \lambda|\phi>$, avec $\lambda \in \mathbb{C}$. En effet

$$P'_a = \frac{|<\psi_a|\lambda\phi>|^2}{<\lambda\phi|\lambda\phi>} = \frac{|\lambda|^2\,|<\psi_a|\phi>|^2}{|\lambda|^2 <\phi|\phi>} = P_a$$

  Par conséquent on dit que $|\phi>$ et $|\phi'>= \lambda|\phi>$correspondent au même **état physique**, puisqu'ils ont les même propriétés observables. Si les états $|\phi>$ et $|\psi_a\rangle$ sont normalisés, alors $<\phi|\phi>= 1$, $\langle\psi_a|\psi_a\rangle = 1$, et l'expression (1.6.1) est légèrement simplifiée, mais ce n'est pas du tout nécessaire.
- En résumé, tant que le système est isolé, la mécanique quantique est déterministe : elle est capable de prévoir l'évolution de la fonction d'onde grâce à l'équation de Schrödinger. Mais lorsque qu'une mesure se produit, elle n'est plus capable de prévoir exactement ce qu'il va se produire. Elle permet seulement de connaître les probabilités des différentes possibilités (ce qui est déjà très fort, puisque à partir de ces probabilités et avec la théorie de la physique statistique, on obtient les lois de la thermodynamique et de la mécanique classique). Il y a donc une part de hasard inhérent à la théorie quantique, lors de la mesure.
- Ce processus de mesure ne nécessite pas la présence d'un expérimentateur. Il se produit dès que la particule quantique influence son environnement, et peut donc se produire aussi bien dans une pièce vide, que sur une île déserte, que sur mars ou ailleurs. Ce phénomène est en fait incessant et omniprésent, c'est le contraire qui est plutôt exceptionnel : un système peut être considérer comme étant approximativement isolé que pendant un certain intervalle de temps appelé le **temps de**

décohérence $\tau_{decoh.}$. Il est intéressant d'appliquer l'équation de Schrödinger à ce système, seulement si son état quantique a le temps de changer de façon significative pendant cet intervalle. Voir le site Web `http://www.decoherence.de/`. Ou le cours en PDF de C. Cohen-T :[Cla88] ou de Serge Haroche [Har02].

Exemple de valeurs de τ_{decoh} ([DEC+96], p.57) :

τ_{decoh}	Grosse molécule taille a=10^{-6}cm	Poussière taille $a = 10^{-3}$cm
Effet des molécules d'air	10^{-18}s.	10^{-24}s.
Effet du" vide de labo" (10^3 part/cm^3) @@	10^{-5}s.	10^{-11}s.
Effet des photons fossiles à 300K.	10^6s.	

Il faut comparer ces temps aux temps électroniques (période d'un électron dans un atome) $\tau_e \simeq \hbar/eV \simeq 10^{-15}s$, ou aux temps moléculaires (période de vibration d'un atome) $\tau_{vib} \simeq \hbar/10^{-3}eV \simeq 10^{-10}s$. Les effets de cohérence quantique "n'existent pas" si les temps de décohérence sont plus courts que ces temps caractéristiques.

- Dans la description vectorielle de la mécanique quantique que nous avons adoptée jusqu'à présent, nous avons montré que toutes les bases ortho-normées de $\mathcal{H}$ sont "équivalentes" dans le sens où elles permettent de représenter les mêmes états quantiques et la même équation d'évolution. Ce ne sont que des représentations différentes.

  Par contre le mécanisme de la mesure qui résulte de l'interaction du système quantique avec son environnement privilégie une certaine base, qui est **la base de position** en général, ou **la base d'énergie** dans les expériences de spectroscopie.

Exemple : mesure de la position Voyons comment l'énoncé général du postulat de la mesure donne l'exemple de la mesure de position d'une particule traité plus haut.

Supposons que l'état de la particule soit un paquet d'onde $|\phi>$, et que l'observateur effectue une mesure de la position x. L'observable est donc l'opérateur $\hat{A} = \hat{x}$. La grandeur observée est la position x qui est une grandeur continue. On cherche l'expression de la loi de probabilité : $P(x)dx$ qui est la probabilité de détecter la particule dans l'intervalle $[x, x + dx[$. la fonction $P(x)$ s'appelle **densité de probabilité**.

La base de l'observable est la base de position $|x>$, et d'après (1.6.1), on a :

$$P(x) = \frac{|<x|\phi>|^2}{<\phi|\phi>} = \frac{1}{<\phi|\phi>}|\phi(x)|^2 \tag{1.6.3}$$

Dans le cas d'un paquet d'onde normalisé $|\phi>= |x_0, p_0, \sigma>$eq.(1.1.6) , cela donne

$$P(x) = |\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x)|^2 = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-(x - x_0)^2/\sigma^2\right)$$

qui est une Gaussienne représentée sur la figure 1.1.3.

Si après une mesure, l'observateur détecte la particule dans l'intervalle $|x, x + dx[$, alors la particule se trouve dans l'état $|x>$(plus précisément $|x_\varepsilon>$ avec $\varepsilon = dx$, voir fig. 1.5.1). L'onde de la particule subit un brusque changement $|\phi> \rightarrow |x>$, et se concentre spatialement ; on dit qu'il y a **réduction du paquet d'onde**.

Mesure de l'impulsion De la même façon si l'observable est l'opérateur de position $\hat{A} = \hat{p}$, on obtient que la probabilité d'observer une impulsion comprise dans l'intervalle $[p, p + dp[$ est

$$P(p)dp = \frac{1}{< \phi|\phi >} \left|\tilde{\phi}(p)\right|^2 dp$$

.

Dans le cas du paquet d'onde normalisé eq.(1.1.6) , cela donne

$$P(p) = \left|\tilde{\psi}_{x_0,p_0,\sigma}(p)\right|^2 = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

qui est une Gaussienne. Après la mesure, la fonction d'onde de la particule est une certaine onde plane $|p >$.

1.6.2 Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique

1.6.2.1 Faut il interpréter ? La description orthodoxe suffit t-elle ?

Le postulat de la mesure présenté plus haut est indispensable pour donner une réalité à la théorie quantique, pour la confronter aux résultats d'expériences. **Par rapport à la confrontation avec l'expérience, la théorie quantique, avec le postulat de la mesure est parfaitement satisfaisant** : il n'y a pas de mesure qu'il les contredisent, et tous les phénomènes observables semblent entrer dans le cadre de cette théorie (bien que de nombreux phénomènes physiques, soient en pratique hors de portée d'explications simples et directes à partir des premiers principes : citons les phénomènes complexes comme la turbulence (météo) ou l'auto-organisation de la matière).

Cependant d'un point de vue théorique ou plus conceptuel, une lacune demeure : si la théorie quantique décrit tous les phénomènes physiques, elle devrait aussi décrire les phénomènes macroscopiques, les appareils de mesure, et donc l'interaction entre une particule quantique et un appareil de mesure. Autrement dit, le "postulat de la mesure" ne devrait pas être un "postulat" (c'est à dire imposé sans explications), mais il devrait pouvoir s'expliquer dans le cadre de la théorie quantique ordinaire lorsque celle ci est appliquée à la particule et à son environnement.

1.6.2.2 Où est la Limite classique-quantique ?

(lire l'article Zureck [Zur91])

Disons tout de suite, que cela n'est pas fait, aucune expérience ne permet de montrer que la théorie quantique (comme le principe de superposition d'états) s'applique à des objets macroscopiques. Tout au plus des expériences récentes montrent des phénomènes d'interférences avec des systèmes contenant quelques dizaines de particules, donc encore

microscopique (expériences d'Aroche et al. entre photons et atomes)[8]. La raison de cette limite n'est pas que le principe de superposition cesse de s'appliquer au-delà de quelques particules, cela on ne le sait pas. La difficulté vient du fait que pour tester le principe de superposition, il faut faire des expériences de type interférences, et pour cela isoler suffisamment le système quantique de son environnement ; c'est cet isolement qui est quasiment impossible à obtenir en pratique ; c'est le phénomène de décohérence quantique.

La question suivante reste donc ouverte : la théorie quantique s'applique t-elle aux assemblées d'objets (objets macroscopiques) ou se limite t-elle à peu de particules ? Sinon quelle expérience faire pour détecter cette limite ? Quelle nouvelle théorie permettrait de dépasser cette limite ?

Remarquons que comme le prouve l'histoire des sciences, en général, une nouvelle théorie physique ne se trouve que à partir de résultats expérimentaux préalables.

1.6.2.3 Une interprétation alternative : appliquons le principe de superposition aux objets macroscopiques

Essayons cependant d'appliquer naturellement les idées de la mécanique quantique au delà de son domaine de validité prouvé, c'est à dire d'appliquer le principe de superposition aux objets macroscopiques comme les détecteurs, et tout l'environnement. Voici ce que cela donnerait dans l'exemple de la mesure de position d'une particule, figure (1.6.1) ci-dessus.

Il y a des détecteurs à chaque position (discrète) x. L'état du détecteur situé en x éteint est noté : $|D_x\rangle$. Par contre si le détecteur interagit avec la particule, il "s'allume" et passe dans l'état quantique noté $|D_x^*\rangle$. Autrement dit, l'interaction de l'onde quantique de la particule avec les détecteurs, est définie par la règle d'évolution suivante. (En notant $|x\rangle$ un état de la particule à la position x)

$$|x\rangle|D_{x'}\rangle \xrightarrow{\textit{Evolution}} \begin{cases} |x\rangle|D_{x'}^*\rangle : & \text{si } x = x' \\ |x\rangle|D_{x'}\rangle : & \text{si } x \neq x' \end{cases}$$

L'état quantique de l'ensemble des détecteurs est décrit par la notation

$$|D\rangle = (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \ldots |D_{x_N}\rangle)$$

(on verra au chapitre suivant qu'il s'agit d'un produit tensoriel).

Avant d'interagir avec les détecteurs, la particule est dans l'état quantique $|\psi\rangle$ qui est répartit dans l'espace, et se décompose donc (principe de superposition) en paquet d'ondes localisés en x : $|\psi\rangle = \sum_x \psi(x)|x\rangle$.

8. Une remarque est nécessaire ici : les phénomènes physiques comme la super-fluidité, la supraconductivité ou la condensation de Bose-Einstein font intervenir au moins des milliers de particules et se décrivent par un état collectif. La théorie quantique permet de bien décrire cet état collectif, en terme "d'état cohérent". Pour cela on dit souvent que la matière est dans un état quantique macroscopique. Notons cependant, que l'on n'observe pas la matière dans une superposition cohérente de tels états (ou alors dans une superposition de deux ou trois de ces états, voir expériences sur les jonctions Josephsons quantiques). En fait d'un point de vue théorique, ces états collectifs de la matière pour les atomes, sont des "états classiques" semblables à l'état du champ classique électromagnétique pour les photons.

En arrivant sur les détecteurs, toujours en appliquant le principe de superposition, l'interaction particule-détecteurs est décrite par (faire schéma avec deux détecteurs@@) :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|D\rangle &= \sum_x \psi(x)|x\rangle\left(|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle\ldots|D_{x_N}\rangle\right) \\ &\xrightarrow{Evolution} \sum_x \psi(x)|x\rangle\left(|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle\ldots|D_x^*\rangle\ldots|D_{x_N}\rangle\right) \end{aligned}$$

Ainsi le résultat de la mesure serait une superposition d'état de la forme

$$|x\rangle\left(|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle\ldots|D_x^*\rangle\ldots|D_{x_N}\rangle\right)$$

. Un tel état décrit la particule localisée en $|x\rangle$, le détecteur correspondant D_x allumé et les autres éteints. C'est bien la réalité physique observée dans une expérience. Cet état quantique décrit donc la particule et son environnement. On dit que c'est une description du "monde classique". (Dans la description ci-dessus, on pourrait rajouter d'autres objets de l'environnement sans difficulté, de la même façon que l'on a traité les détecteurs).

Mais contrairement à l'explication orthodoxe (postulat de la mesure) et au bon sens de ce que l'on voit, l'état final décrit ici est une superposition de tels états de type "mondes classiques". Autrement dit tous ces états coexisteraient simultanément. Voici donc ce que donnerait une application (abusive et naïve) de la mécanique quantique à tous les objets macroscopiques de notre environnement : l'existence de mondes multiples qui coexistent et s'ignorent mutuellement. Cette interprétation de la mécanique quantique a été remarquée dès le début par les physiciens (qui imaginaient le chat de Schrödinger...), et a porté le nom de **"Many world interpretation"** après la thèse de H. Everett en 1957.

Notons cependant que cette description des choses ne donne aucune explication quand à l'origine des probabilités : d'où provient la loi (1.6.1) ? Il ne s'agit donc pas d'une interprétation complète de la mécanique quantique.

Nous en avons parlé, premièrement car cette démarche théorique qui est de décrire l'environnement par ses états quantiques est couramment utilisée, notamment dans les théories de la décohérence qui elles ont des conséquences observables.

Deuxièmement, c'est aussi pour montrer que le phénomène de la mesure quantique, et donc du sens de la mécanique quantique elle même, est un problème difficile. Il n'y a même pas de question claire. C'est un sujet très difficile, qui préoccupe les physiciens depuis le début de la mécanique quantique, sans qu'aucun n'ait pu apporter une réponse satisfaisante à ce jour. Il faut savoir que de nombreuses tentatives d'interprétations existent, voir par exemple le livre de R.Omnès [Omn00].

1.6.3 Valeurs moyenne et variance de l'observable

Dans cette section nous étudions les relations possibles entre un opérateur autoadjoint donné $\hat{A}$ et un état quantique donné $|\phi>\in\mathcal{H}$.

Cette étude a un sens physique immédiat dans le cadre du processus de mesure de l'observable $\hat{A}$ sur l'état $|\phi>$ comme expliqué plus haut, et permettra de donner les formules statistiques (moyenne et variance) de la grandeur observée.

Mais cette étude a aussi un sens si le système reste isolé de son environnement. L'interprétation de l'étude dans ce cas est d'analyser l'état $|\phi>$ par rapport à la base propre de $\hat{A}$.

Comme ci-dessus, on note le spectre de $\hat{A}$ par

$$\hat{A}|\psi_a>= A_a|\psi_a>$$

où a est un indice discret ou continu et $\langle\psi_a|\psi_a\rangle = 1$. Dans la base propre de $\hat{A}$, un vecteur $|\phi>\in \mathcal{H}$ quelconque se décompose :

$$|\phi>= \sum_a \phi_a|\psi_a>, \quad \text{avec } \phi_a =<\psi_a|\phi>$$

et l'on pose comme ci-dessus :

$$P_a = \frac{|<\psi_a|\phi>|^2}{<\phi|\phi>}$$

qui s'interprète comme la probabilité d'observer la valeur A_a dans le cadre d'une mesure, voir section précédente. (Dans le cadre d'un système isolé, P_a est juste un coefficient positif qui ne s'interprète pas comme une probabilité).

La liste des valeurs possibles A_a avec leur probabilité respective P_a pour différents a constitue un histogramme, et il est conventionnel de définir des grandeurs caractéristiques pour un tel histogramme (voir figure 1.6.3) :

Définition 1.6.2. La **valeur moyenne** de l'histogramme $(A_a, P_a)_a$ est

$$\langle A\rangle := \sum_a P_a A_a$$

Graphiquement, la valeur moyenne caractérise le barycentre de l'histogramme.
La **variance** de l'histogramme $(A_a, P_a)_a$ est :

$$(\Delta A)^2 := \left\langle (A - \langle A\rangle)^2 \right\rangle \tag{1.6.4}$$

$$= \sum_a P_a \left(A_a - \langle A\rangle\right)^2 \tag{1.6.5}$$

ΔA s'appelle **l'écart type** ou encore l'**incertitude** sur la valeur de A**.** Graphiquement, l'écart type ΔA (et la variance) caractérise la largeur de l'histogramme. Cette définition de "largeur" est naturelle car elle montre comment les valeurs A_a s'écartent du barycentre $\langle A\rangle$. On a pris la valeur moyenne des écarts au carré (au lieu des distances) pour des raisons de commodité.

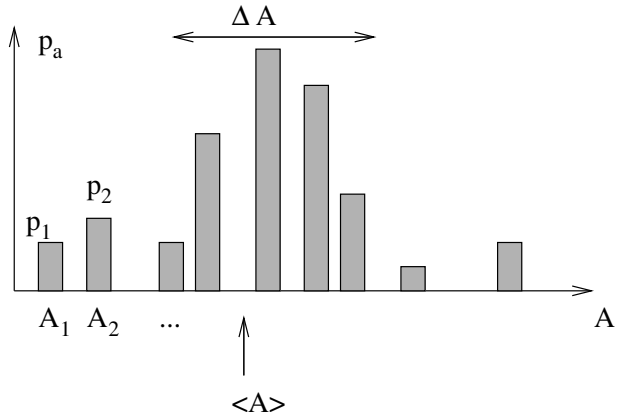


FIGURE 1.6.3 – Histogramme de valeurs $A_1, A_2, \ldots$ avec les poids respectifs $P_1, P_2, \ldots$. Valeur moyenne $\langle A \rangle$ et écart type ΔA de l'histogramme.

Proposition 1.6.3. *on a les relations très utiles :*

$$\langle A \rangle = \frac{< \phi | \hat{A} | \phi >}{< \phi | \phi >} \tag{1.6.6}$$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \left\langle A^2 \right\rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \frac{< \phi | \hat{A}^2 | \phi >}{< \phi | \phi >} - \left(\frac{< \phi | \hat{A} | \phi >}{< \phi | \phi >} \right)^2 \end{aligned}$$

Ces écritures en terme de vecteur et d'opérateur, sont intéressantes car ne dépendent pas explicitement de la base.

Démonstration. On écrit

$$\begin{aligned} \frac{< \phi | \hat{A} | \phi >}{< \phi | \phi >} &= \left(\sum_a < \psi_a | \overline{\phi}_a \right) \hat{A} \left(\sum_{a'} \phi_{a'} | \psi_{a'} > \right) / < \phi | \phi > \\ &= \left(\sum_a A_a \overline{\phi}_a \phi_a \right) / < \phi | \phi > = \sum_a P_a A_a \end{aligned}$$

Et

$$\left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \right\rangle = \left\langle A^2 \right\rangle - 2 \langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A \rangle^2 - \langle A \rangle^2$$

.

□

Remarque (*) plus généralement, pour un histogramme ou distribution, on définit le **moment d'ordre** n par $M_n = \langle A^n \rangle$. Ici, $\langle A \rangle = M_1$, et $Var(A) = M_2 - M_1^2$.

Exercice Pour le paquet d'onde $|\phi >= |x_0, p_0, \sigma >$ défini en (1.1.6) page 22, et les observables de position $\hat{x}$ ou d'impulsion $\hat{p}$, montrer que :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int xP(x)dx = \int x \left|\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x)\right|^2 dx = x_0$$
$$\langle \hat{p} \rangle = \int pP(p)dp = \int p \left|\tilde{\psi}_{x_0,p_0,\sigma}(p)\right|^2 dp = p_0$$

$$\begin{aligned} \Delta x = & \ \tfrac{1}{\sqrt{2}}\sigma \\ \Delta p = & \ \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\tfrac{\hbar}{\sigma}\right) \end{aligned}$$

Remarque : on a

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{1.6.7}$$

indépendant de σ.

$\langle x \rangle = x_0$ est donc la moyenne de la distribution $|\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x)|^2$. Et $\Delta x = \sigma/\sqrt{2}$ est sa largeur.

$\langle p \rangle = p_0$ est donc la moyenne de la distribution $\left|\tilde{\psi}_{x_0,p_0,\sigma}(p)\right|^2$. Et $\Delta p = (\hbar/\sigma)/\sqrt{2}$ est sa largeur.

Ce résultat est schématisé sur la figure 1.6.4.

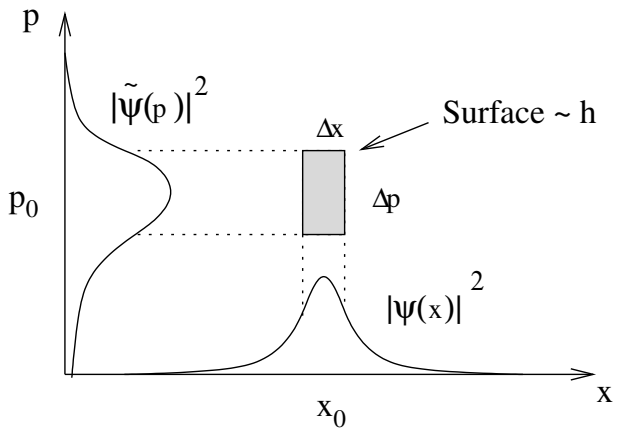


FIGURE 1.6.4 – Distribution de probabilité $|\psi(x)|^2$ et $\left|\tilde{\psi}(p)\right|^2$ pour le paquet d'onde. La relation $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ montre que la paquet d'onde "occupe" une surface $\simeq h$ dans l'espace de phase. Cela est formulé plus rigoureusement plus loin.

Exercice 1.6.4. Calculer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ et la largeur en énergie ΔE pour un paquet d'onde $|\phi >= |x_0, p_0, \sigma >$ libre (cad avec le Hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$).

Exercice 1.6.5. (voir Cohen T. p.240)

Montrer que

$$\frac{d\langle A\rangle(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

Déduire la conservation de l'énergie moyenne (et d'une manière plus directe).

Déduire le **théorème d'Erhenfest** pour $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle\\ \frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\left\langle\frac{dV}{dx}(\hat{x})\right\rangle\end{aligned}$$

qui sont des relations très analogues aux équations de Hamilton classiques (dans ces dernières la deuxième relation serait plutôt $\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\frac{dV}{dx}(\langle\hat{x}\rangle)$; cette différence apparament minime est en fait cruciale et se manifeste dans les différences entre évolution quantique du paquet d'onde et l'évolution classique d'une distribution de Liouville observées numériquement au début du chapitre).

1.6.4 Relation d'incertitude et relations de commutation

Supposons maintenant la donnée d'un état quantique $|\phi>$ et de deux opérateurs autoadjoints $\hat{A}$ et $\hat{B}$.

Définition 1.6.6. Le **commutateur** de deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ est l'opérateur :

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Proposition 1.6.7. *Dans le cas des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$, on a*

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\,\hat{I} \tag{1.6.8}$$

Démonstration. considérons une fonction $\phi(x)$ quelconque. On $(\hat{x}\hat{p}\phi)(x) = -i\hbar\left(x\frac{d\phi}{dx}\right)$ et $(\hat{p}\hat{x}\phi)(x) = -i\hbar\frac{d(x\phi)}{dx} = -i\hbar\phi - i\hbar\left(x\frac{d\phi}{dx}\right)$. Donc $([\hat{x},\hat{p}]\,\phi)(x) = i\hbar\phi(x) = \left(i\hbar\hat{I}\right)\phi(x)$. Cela étant vrai pour toute fonction ϕ, on déduit $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\,\hat{I}$. □

Proposition 1.6.8. *La relation suivante montre plus généralement que pour deux opérateurs autoadjoints $\hat{A}, \hat{B}$, l'incertitude dans l'état $|\phi>$ sont contraintes par la relation de commutation : (ref : Ballentine [L.E90] p.166)*

$$\Delta A\, \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle \right|, \quad \forall |\phi> \in \mathcal{H} \tag{1.6.9}$$

Remarque : attention que bien que ce ne soit pas explicite, les expressions ΔA et $\langle . \rangle$ dépendent de l'état $\phi \in \mathcal{H}$.

Démonstration. On considère un état $\phi \in \mathcal{H}$, $\|\phi\| = 1$, et pour simplifier, on suppose que $\left\langle \hat{A} \right\rangle = \left\langle \phi | \hat{A}\phi \right\rangle = 0$, et $\left\langle \hat{B} \right\rangle = 0$ (pour cela il suffit de retrancher la moyenne). Alors $\Delta A = \sqrt{\left\langle \phi | \hat{A}^2 \phi \right\rangle} = \sqrt{\left\langle \hat{A}\phi | \hat{A}\phi \right\rangle} = \left\| \hat{A}\phi \right\|$. On a

$$\begin{aligned} \left\langle i \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle &= i \left(\left\langle \phi | \hat{A}\hat{B}\phi \right\rangle - \left\langle \phi | \hat{B}\hat{A}\phi \right\rangle \right) = i \left(\left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle - \left\langle \hat{B}\phi | \hat{A}\phi \right\rangle \right) \\ &= i \left(\left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle - \overline{\left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle} \right) = -2\Im \left(\left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle \right) \end{aligned}$$

alors, utilisant l'inégalité de Schwartz [9]

$$\frac{1}{2} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle \right| = \left| \Im \left(\left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle \right) \right| \leq \left| \left\langle \hat{A}\phi | \hat{B}\phi \right\rangle \right| \leq \left\| \hat{A}\phi \right\| \left\| \hat{B}\phi \right\| = \Delta A \Delta B$$

□

Remarques :

- Dans le cas où $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = 0$, on verra (page 231) que les deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ont des vecteurs propres en commun. Si $|\phi>$ est un tel vecteur, alors $\Delta A = 0$, $\Delta B = 0$. Dans ce cas les deux termes de l'inégalité sont nuls.
- Dans le cas des opérateurs $\hat{q}, \hat{p}$, d'après (1.6.8), l'inégalité (1.6.9) devient l'**inégalité de Heisenberg** ou **relation d'incertitude** bien connue :

$$\boxed{\Delta q \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar} \tag{1.6.10}$$

  Remarquer que dans le cas du paquet d'onde Gaussien $|\phi >= |x_0, p_0, \sigma >$, on a montré eq.(1.6.7), que cette inégalité est une égalité.

9. Pour deux vecteurs $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^n$ l'**inégalité de Schwartz** est $|\vec{u}.\vec{v}| \leq \|\vec{u}\| \, \|\vec{v}\|$. De même pour deux vecteurs $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, $|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \, \|\psi\|$.

1.7 Résumé du chapitre 1

Ce résumé sert au premier cours de Master 1, car on suppose ce premier chapitre comme étant connu, déjà étudié en L3.

Il est apparu dès le XIXème siècle que de nombreux phénomènes de la physique ne trouvaient pas d'explications avec la mécanique classique. De nouvelles idées apparaissent progressivement (« loi du corps noir » par Planck 1900, « effet photo électrique » par Einstein 1905) et en 1925 Schrödinger propose une « théorie ondulatoire » pour des « ondes de matière », que l'on appelle la **mécanique quantique.** Dans cette théorie, une particule élémentaire est modélisée par une **fonction d'onde** $\psi_t(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ qui est une fonction à valeur complexes sur l'espace $x \in \mathbb{R}^3$ qui évolue en temps $t \in \mathbb{R}$ selon l'**équation de Schrödinger**. Commençons par parler des fonctions d'ondes.

1.7.1 Fonction d'onde

On va décrire une **particule quantique** élémentaire qui se déplace à une dimension selon $x \in \mathbb{R}$.

Remarque importante :

- La "particule" peut être **soumise aux "influences extérieures"** (par exemple une force $F(x)$ associées à une énergie potentielle $V(x)$) mais on suppose que en retour, **elle n'influence pas son environnement**. Cela est le cas par exemple, d'une particule légère (un électron) et de son environnement qui serait des atomes lourds. Sinon, il est nécessaire de décrire aussi l'environnement dans le système quantique étudié.

L'état de la particule à l'instant t est décrit par une fonction appelée **fonction d'onde**

$$\psi : x \in \mathbb{R} \to \psi(x) \in \mathbb{C}$$

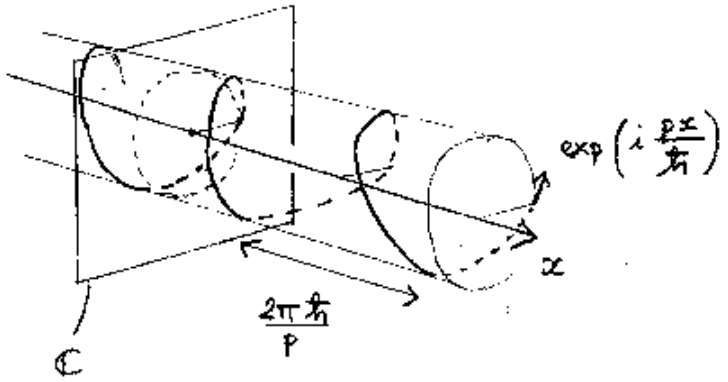
notée parfois $|\psi\rangle$ et appelé **ket** (notation de Dirac). En mathématiques, l'espace des fonctions $\psi \in C^\infty(\mathbb{R})$ est un **espace vectoriel** (on peut considérer la somme $\psi_1 + \psi_2$ et le produit externe $\lambda.\psi$ avec $\lambda \in \mathbb{C}$).

Exemple particuliers mais importants :

- Une **onde plane** d'**impulsion** $p \in \mathbb{R}$ est

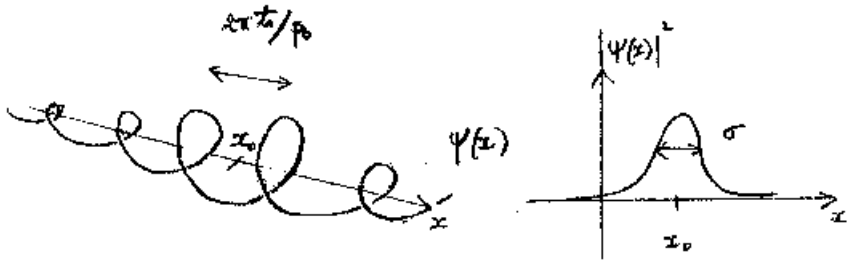
$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)$$

aussi notée $|p\rangle$, avec la **constante de Planck** $\hbar = \frac{h}{2\pi}$,$h = 6.626\,10^{-34} J.s$. Il est important de noter que la longueur d'onde (= période spatiale) de cette onde plane est $l = 2\pi\hbar/p$ qui est très petite à notre échelle.



- Un **paquet d'onde Gaussien** de position moyenne $x_0 \in \mathbb{R}$, d'impulsion moyenne $p_0 \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma > 0$, est :

$$\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$



Remarque : un paquet d'onde est "localisé" comme une particule. On parle aussi d'**état quasi-classique**.

Aspects mathématiques (Analyse) :

- Le **produit scalaire** entre deux fonctions d'ondes $\psi(x)$ et $\varphi(x)$ est

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}(x)\,\varphi(x)\,dx$$

La **norme** de φ est

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} = \left(\int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2\,dx\right)^{1/2}$$

Par exemple $\|\psi_{x_0,p_0,\sigma}\| = 1$ et $\|\psi_p\| = \infty$ (norme infinie).

- L'**espace de Hilbert des fonctions de carré sommable** est (la fermeture)

$$L^2(\mathbb{R}) := \overline{\{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}), \quad \|\varphi\| < \infty\}}$$

  On notera aussi

$$\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$$

  l'espace de Hilbert des états quantiques. Si $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$, $\varphi \neq 0$, alors $\tilde{\varphi} = \frac{1}{\|\varphi\|}\varphi$ vérifie $\|\tilde{\varphi}\| = 1$. On dit qu'elle est **normalisée**.
- Avec la notation de Dirac, on note $\langle\psi|$ ou $\langle\psi|.\rangle$, appelée **bra**, la forme linéaire :

$$\langle\psi| : \begin{cases} L^2(\mathbb{R}) & \to \mathbb{C} \\ \varphi & \to \langle\psi|\varphi\rangle \end{cases}$$

  On appelle $\langle\psi|$ le **vecteur dual métrique** de $|\psi\rangle$. On peut penser que le vecteur dual ψ détecte des propriétés de φ (voir sens physique du produit scalaire ci-dessous).
- La **distribution de Dirac** en x ou l'**état de position** x, est la forme linéaire : $\delta_x : \psi \in C^\infty(\mathbb{R}) \to \delta_x(\psi) = \psi(x) \in \mathbb{C}$ qui donne la valeur de ψ en x. On note aussi $\langle x| \equiv \delta_x$ ainsi on peut écrire $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Son dual est $|x\rangle$. L'écriture suivante est abusive mais utile. $\delta_x(y) = \langle x|y\rangle = \delta(y-x)$. Ainsi les deux écritures suivantes sont équivalentes (la deuxième utilise la notation de Dirac) :

$$\psi(x) = \int \delta_x(y)\,\psi(y)\,dy \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle x|\psi\rangle = \int \langle x|y\rangle\langle y|\psi\rangle dy$$

  On peut penser que la distribution de Dirac est une fonction d'onde infiniment concentrée au point x et sans impulsion.

Le sens physique du produit scalaire deviendra clair lorsque nous rappelerons le postulat de la mesure. Rappelons déjà l'**inégalité de Cauchy-Schwartz** qui est la relation générale

$$|\langle\psi|\varphi\rangle| = (\cos\alpha)\,\|\psi\|\,\|\varphi\| \leq \|\psi\|\,\|\varphi\|$$

où $\alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ est "l'angle" entre les états ψ et φ. On a donc

$$0 \leq \cos\alpha = \frac{|\langle\psi|\varphi\rangle|}{\|\psi\|\,\|\varphi\|} \leq 1$$

Signification physique de l'angle α :

- Si $\alpha \simeq \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow \frac{|\langle\psi|\varphi\rangle|}{\|\psi\|\|\varphi\|} \simeq 0$ alors ψ et φ décrivent **deux états physiques différents**.
- Si $\alpha \simeq 0 \Leftrightarrow \frac{|\langle\psi|\varphi\rangle|}{\|\psi\|\|\varphi\|} \simeq 1$ alors ψ et φ décrivent **deux états physiques semblables**. On a alors $\psi \simeq \lambda\varphi$ où $\lambda \in \mathbb{C}$ est une constante ($\lambda = e^{i\theta}$ est une phase si les états sont normalisés).

Exercice : Voici des exemples de fonctions d'ondes, construites à partir du paquet d'onde $\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x)$ ci-dessus et différentes valeurs des paramètres x_0, p_0.

- $\psi_1 = \psi_{0,0,\sigma}$ avec largeur $\sigma \ll 1$.
- $\psi_2 = -\psi_{0,0,\sigma}$.
- $\psi_3 = 2\psi_{0,0,\sigma}$.
- $\psi_4 = \psi_{0,p,\sigma}$ avec impulsion $p \gg \frac{\hbar}{\sigma}$.
- $\psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{0,0,\sigma} + \psi_{1,0,\sigma}\right)$ avec $\sigma \ll 1$.
- $\psi_6 = \psi_{1,0,\sigma}$.
- $\psi_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\psi_{0,0,\sigma} + \psi_{1,0,\sigma}\right)$.

1. Tracer l'allure de ces fonctions d'ondes.
2. Dans la limite $\sigma \ll 1$ et $p \gg \frac{\hbar}{\sigma}$, calculer les produits scalaires $\langle\psi_i|\psi_j\rangle$ pour $i, j = 1\ldots 6$ et déduire les valeurs de $\cos\alpha_{i,j} = \frac{|\langle\psi_i|\psi_j\rangle|}{\|\psi_i\|\|\psi_j\|}$ qui mesure la différence entre les états quantiques.

1.7.2 Evolution d'un état quantique $\psi_t(x)$

1.7.2.1 Equation de Schrödinger

On suppose que la particule est soumise à une force

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}$$

où $V(x)$ est l'énergie potentielle (qui peut dépendre du temps : $V(x,t)$).

L'onde quantique évolue d'après **l'équation de Schrödinger :**

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)\psi(t)$$

avec

$$\begin{aligned}
&\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \text{ opérateur Hamiltonien (énergie)}\\
&\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \text{ opérateur impulsion}\\
&\hat{x} \text{ opérateur position}
\end{aligned}$$

donc $\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ et $(\hat{x}\psi)(x) = x\psi(x)$, $(V(\hat{x})\psi)(x) = V(x)\psi(x)$. L'équation de Schrödinger s'écrit donc de façon plus explicite comme une **équation linéaire aux dérivées partielles** (**E.D.P.**) :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x}(x,t) + V(x)\psi(x,t) \qquad : \forall\, x, t$$

Remarques :

- Le fait que l'équation de Schrödinger est linéaire s'appelle le **principe de superposition**. La conséquence est que si $\psi_1(x,t), \psi_2(x,t)$ sont solutions alors $(\psi_1+\psi_2)(x,t)$ et $\lambda.\psi_1(x,t)$ sont aussi solutions. La manifestation physique sont les **phénomènes d'interférences**.
- Un résultat fondamental (qui a un statut mathématique) est qu'un paquet d'onde Gaussien $\psi_{x_0,p_0,\sigma}$ évoluant d'après l'équation de Schrödinger est proche à tout instant t d'un paquet d'onde $\psi_{x(t),p(t),\sigma(t)}$ avec $x(t), p(t)$ régit par les équations de mouvement de Hamilton de la mécanique classique :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

  Plus précisément, cela est vrai approximativement pour t fixé et dans la limite de $\hbar$ petit (i.e. petite longueur d'onde) par rapport aux unités physique du problème (respect. taille du système). Pour les temps plus longs le paquet d'onde se disperse. Cette approximation est donc d'autant plus valable que l'on observe les ondes à grande échelle (par rapport aux échelles atomiques où $\hbar \simeq 1$). En physique, la petite valeur de $h = 6.626\,10^{-34} J.s$ à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XXème siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique qui se manifestent à l'échelle des atomes [10].
- Le fait d'obtenir l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ en substituant les variables x, p dans le Hamiltonien classique (0.1.4) par les opérateurs $\hat{x}, \hat{p}$ s'appelle le **principe de correspondance.** La remarque précédente explique ce principe. On en discutera encore en Section 1.7.2.3.
- (*) Voir videos d'évolutions d'ondes quantiques sur la page web [Faub].

1.7.2.2 Ondes stationnaires

Une **onde stationnaire** est un état particulier, c'est un vecteur propre de $\hat{H}$:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \qquad E \in \mathbb{R} \text{ énergie} \tag{1.7.1}$$

qui s'appelle l'**équation de Schrödinger stationnaire.**

L'évolution de ψ est donc :

$$\frac{d\psi}{dt}(x,t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\hat{H}\psi = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)E\psi(x,t)$$

donnant

$$\psi(x,t) = \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{phase}\psi(0,t)$$

10.
— En mathématique cette correspondance classique-quantique s'appelle l' « **analyse semi-classique** » ou « **analyse micro-locale** »[Zwo12, Tay96b, chap.7].

Par conséquent le module $|\psi(x,t)| = |\psi(x,0)|$ ne bouge pas (d'où le nom d'onde stationnaire).

L'ensemble des valeurs propres E_e, $e = 1, \ldots \infty$ s'appelle les **niveaux d'énergie**. Les états d'énergie, vecteurs propres ou ondes stationnaires associées sont notées ψ_e.

Bien que les vecteurs propres (ondes stationnaires) soient des états très particuliers, ils ont une importance en physique car :

- l'état stationnaire de plus basse énergie $\psi_{e=1}$, appelé **état fondamental**, apparait à basse température à cause des phénomènes de relaxation thermique.
- Dans les expériences de spectroscopie, on excite un atome ou une molécule avec un rayonnement monochromatique, le faisant transiter par effet de résonance vers un état stationnaire ψ_e d'énergie plus élevée.

Dans le cas d'un électron gravitant autour d'un proton (atome d'Hydrogène, voir (**??**)), on peut calculer les valeurs propres de $\hat{H}$ qui sont négatives et prennent des valeurs discrètes[BC89] :

$$E_n = -\mathcal{R}\frac{1}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*, \tag{1.7.2}$$

avec la constante de Rydberg $\mathcal{R} = \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2$ et la constante de structure fine $\alpha = \frac{k_c e^2}{\hbar c}$. Historiquement ce spectre discret a permis d'expliquer les raies de fluorescence des atomes, observées dès 1752 par T. Melvill. Voir figure 1.7.1.

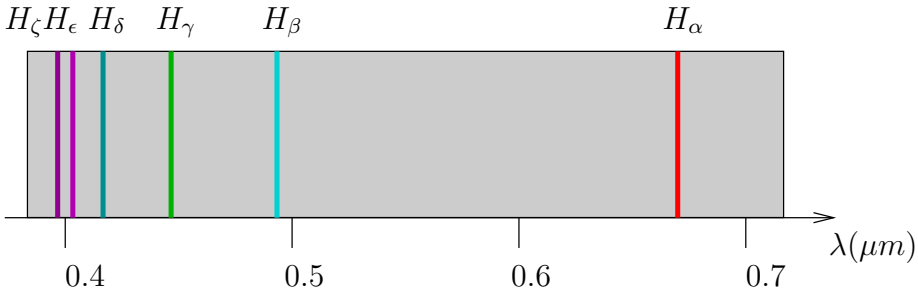


FIGURE 1.7.1 – On éclaire un gaz d'hydrogène avec un laser pour lui fournir de l'énergie. Les électrons des atomes réemmettent l'énergie $h\nu$ sous forme lumineuse (appelée fluorescence) après une transition entre des niveaux d'énergie $E_n \to E_m$, avec $E_m < E_n$. Par exemple les raies de Balmer (1885), notées $H_\alpha, H_\beta, \ldots$, ont des longueurs d'ondes λ_n dans le visible données par $h\nu_n = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_n} = E_n - E_2$, $n \geq 3$ avec E_n données par (1.7.2).

Modèle très simple : c'est celui à une dimension $d = 1$ d'une particule libre dans l'intervalle $x \in [0, L]$. On a $H(x,p) = \frac{1}{2m}p^2$, $\hat{H} = -\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$ et (1.7.1) s'écrit $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$ avec les conditions aux bords $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Les ondes stationnaires sont donc $\psi_n(x) = \sin\left(n\pi\frac{x}{L}\right)$, $n \geq 1$ et les niveaux d'énergie sont $E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$.

1.7.2.3 Explication du principe de correspondance sur un modèle simple

On considère dans cette Section la position dans l'espace $x \in \mathbb{R}^d$. Considérons la fonction de Hamilton classique linéaire suivante [11]

$$H(x,p) = v \cdot p + w \cdot (-x) \tag{1.7.3}$$

avec $\mathcal{V} = (v,w) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^{2d}$ fixé. Les équations de Hamilton (0.1.5) donnent alors

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = v, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = w$$

qui signifient que le point $(x(t), p(t))$ se déplace à vitesse constante $\mathcal{V} = (v,w)$ sur l'espace des phases. Voir figure 1.7.2.

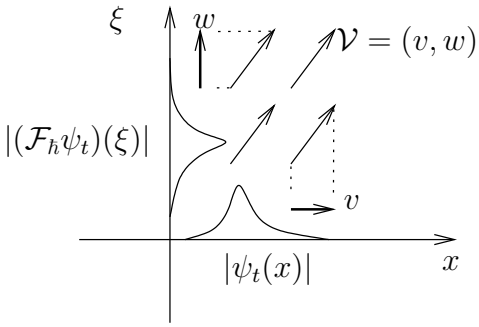


FIGURE 1.7.2 – Champ de vecteurs de Hamilton $\mathcal{V} = (v,w)$ du modèle simple (1.7.3). On montre qu'avec l'équation de Schrödinger, une onde (respect. sa T.F.) se déplace aussi à la vitesse v en x (respect. w en p).

Au niveau de la mécanique quantique, avec le principe de correspondance on obtient l'opérateur :

$$\hat{H} = v \cdot \hat{p} + w \cdot (-\hat{x}) \tag{1.7.4}$$

et l'équation de Schrödinger (**??**) peut se résoudre pour donner explicitement pour toute fonction $\psi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ [12] :

$$\psi_t(x) = \left(e^{-it\mathrm{Op}_\hbar(H)/\hbar}\psi_0\right)(x) = e^{iw\left(xt - \frac{1}{2}vt^2\right)/\hbar}\psi_0(x - vt) \tag{1.7.5}$$

ainsi la fonction

$$|\psi_t|(x) = |\psi_0(x - vt)|$$

11. Attention ce modèle ne correspond pas directement à un modèle de physique. Il peut cependant être considérer (par linéarisation) comme le comportement local d'une fonction $H(x,p)$ quelconque.

12. En effet $i\hbar\frac{d\psi_t}{dt} = -w(x - vt)\psi_t(x) + i\hbar(-v)e^{iw\left(xt-\frac{1}{2}vt^2\right)/\hbar}(\partial_x\psi_0) = \hat{H}\psi_t$ et car $\partial_x\psi_t = i\frac{wt}{\hbar}\psi_t + e^{iw\left(xt-\frac{1}{2}vt^2\right)/\hbar}\partial_x\psi_0$

se déplace à la vitesse v selon x, comme en mécanique classique. Voir figure 1.7.2. Ensuite, pour comprendre l'effet de w, considérons la **$\hbar$-transformée de Fourier** [13] de ψ_t :

$$(\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p) := \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ipx/\hbar} \psi_t(x)\, dx.$$

Eq. (1.7.5) donne :

$$(\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p) = e^{-iv\left(pt - \frac{1}{2}wt^2\right)/\hbar} (\mathcal{F}_\hbar \psi_0)(p - wt) \tag{1.7.6}$$

qui montre que la fonction

$$|\mathcal{F}_\hbar \psi_t|(p) = |(\mathcal{F}_\hbar \psi_0)(p - wt)|$$

se déplace à la vitesse w selon p. Voir figure 1.7.2.

Ce petit modèle justifie à posteriori le principe de correspondance car avec le Hamiltonien (1.7.3), l'onde se déplace comme une particule avec la vitesse $\mathcal{V} = (v, w)$ sur l'espace des phases (en fait vitesse v en x et vitesse w en p après transformée de Fourier). De plus il montre la signification de l'impulsion p : elle intervient dans l'expression $e^{-ipx/\hbar} = e^{-i\omega_x x}$ et on peut donc dire que $\omega_x = \frac{1}{\hbar}p$ est une fréquence spatiale [14]. Pour un Hamiltonien quelconque $H(x, p)$, le champ de vecteur $\mathcal{V}$ n'est pas uniforme mais l'idée du calcul semiclassique est de montrer que dans la limite $\hbar \to 0$, on peut considérer que $\mathcal{V}$ est « localement constant » dans l'espace de phase (x, p) (on dit « microlocalement »), on se ramène à ce modèle simple où le principe de correspondance est valide. Dans le calcul semiclassique, on calcule les corrections à cette approximation sous la forme d'un developpement en $\hbar$.

1.7.3 Signification probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x)$

1.7.3.1 L'expérience des doubles fentes de Young

Voir figure 1.7.3. Il s'agit d'une expérience les plus intriguante de mécanique quantique mettant en valeur la **dualité onde-corpuscule,** très simple en principe mais suscitant des questions d'interprétation qui n'ont pas vraiment de réponse. En rapport avec cette expérience qu'il commente dans son chapitre 1, Richard Feynmann [Fey63](physicien notoire dans l'élaboration de la mécanique quantique) a écrit « Personne ne comprends la mécanique quantique ».

Les résultats de cette expérience est "expliquée" par le "postulat de la mesure".

1.7.3.2 Le postulat de la mesure

Dans cette Section on considère une particule dans l'espace $\mathbb{R}^3$. La fonction d'onde $\psi(x)$ a une signification probabiliste : si une même expérience est répétée un grand nombre de

13. Inversement $\psi_t(x) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx/\hbar} (\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p)\, dp$.

14. en langage de la géométrie différentielle, l'impulsion p est un vecteur cotangent

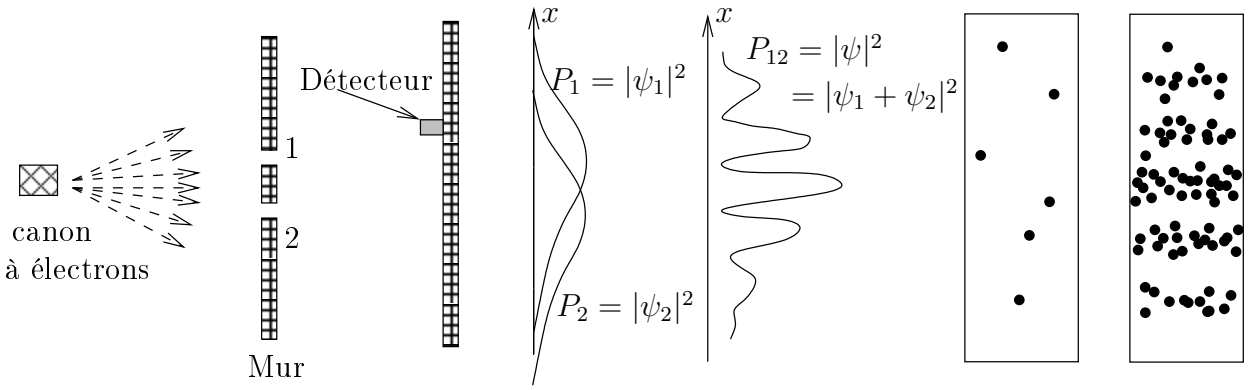


FIGURE 1.7.3 – Schéma d'une expérience faite en 2012 [BPLB13], interférences et détection de l'onde quantique d'un électron après le passage dans une double fente. Après un petit nombre de détections les résultats semblent aléatoires, mais après un grand nombre d'expériences indentiques on observe la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ prédit par la théorie quantique. Voir video des impacts sur la page web du journal.

fois et produit une particule toujours dans le même état décrit par la fonction $\psi(x)$ alors cela signifie que la probabilité de détecter expérimentalement la particule dans le domaine $U \subset \mathbb{R}^3$ de l'espace est :

$$P(U) = \frac{1}{\|\psi\|} \int_U |\psi(x)|^2 \, dx, \tag{1.7.7}$$

avec la constante de normalisation $\|\psi\| := \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 \, dx\right)^{1/2}$. Autrement dit la densité de probabilité est $\frac{1}{\|\psi\|} |\psi(x)|^2 \, dx$. Noter que grâce au préfacteur $\frac{1}{\|\psi\|}$, et comme attendu, la probabilité sur tout l'espace est $P(\mathbb{R}^3) = 1$. Notons aussi que le résultat $P(U)$ est inchangé si on modifie $\psi \to \lambda\psi$ avec $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Cette invariance est aussi vraie pour l'équation d'évolution (**??**) qui est linéaire. Donc il est plus pratique de supposer que les fonctions d'ondes sont normalisées c'est à dire $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$, ce que l'on fera dans la suite.

Ce résultat (1.7.7) étonnant (appelé **postulat de la mesure**) montre que pour une unique expérience, la théorie quantique ne prédit rien. Elle ne peut prédire que des moyennes sur des grands nombres. En physique, on parle de « hasard quantique intrinsèque ». Par exemple la position moyenne de la particule $\langle x \rangle \in \mathbb{R}^3$ est donnée par

$$\langle x \rangle := \int x \, |\psi(x)|^2 \, dx = \langle \psi | x \psi \rangle \tag{1.7.8}$$

Dans ce principe de la mesure il est aussi postulé que après une mesure où la particule a été détectée dans un domaine $U \subset \mathbb{R}^3$, alors la nouvelle fonction d'onde est supportée sur U. Cela s'appelle le « **collapse de la fonction d'onde** » ou « **réduction du paquet d'onde** ».

La relation (1.7.8) est en fait plus générale. Par exemple pour une mesure de l'énergie,

la **valeur moyenne** prédite est donnée par

$$\langle H \rangle = \left\langle \psi | \hat{H} \psi \right\rangle$$

et il est postulé en physique que cela est valable pour toutes les « **observables** ». Ce postulat de la mesure est en accord remarquable avec tous les expériences de physique menées jusqu'à ce jour.

Nous allons énoncé dans la Section 1.7.3.4 le postulat de la mesure de façon plus générale (et plus abstraite). Avant cela nous rappelons quelques aspects d'algèbre linéaire (mathématiques).

1.7.3.3 Rappel d'algèbre linéaire. Spectre d'opérateurs. (Analyse fonctionnelle).

Considérons un opérateur linéaire $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$. L'opérateur adjoint $\hat{A}^+$ est défini par la relation $\langle \varphi | \hat{A}^+ \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi | \psi \rangle$ pour tous $\psi, \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. On dit que $\hat{A}$ est autoadjoint si $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Par exemple les opérateurs $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$ sont auto-adjoints. Pour simplifier on considère des opérateurs autoadjoints.

On considère les vecteurs propres ψ_a et valeurs propres $A_a \in \mathbb{R}$ de l'opérateur $\hat{A}$:

$$\hat{A} \psi_a = A_a \psi_a$$

où $a = 1, 2, \ldots$ sont des indices.

Les valeurs propres A_a sont réelles et que les vecteurs propres ψ_a forment une base orthogonale de l'espace des états $\mathcal{H}$.

Démonstration. On écrit

$$\langle \psi_a | \hat{A} \psi_b \rangle = A_b \langle \psi_a | \psi_b \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi_a | \psi_b \rangle = \overline{\langle \psi_b | \hat{A} \psi_a \rangle} = \overline{A_a \langle \psi_b | \psi_a \rangle} = \overline{A_a} \langle \psi_a | \psi_b \rangle$$

En faisant $a = b$ on déduit que $A_a = \overline{A_a}$ donc $A_a \in \mathbb{R}$, valeurs propres réelles. En supposant $A_a \neq A_b$ on déduit que $(A_b - A_a) \langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0$ et $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0$ cad vecteurs propres orthogonaux. □

On peut classer les valeurs propres par ordre croissant $A_1 \leq A_2 \leq \ldots$. Attention, on peut avoir des valeurs propres répétées $A_a = A_{a+1}$, appelées **dégénérescences**. Plus précisément, pour une valeur propres $A \in \mathbb{R}$ donnée, on note $\mathcal{E}_A := \left\{ \psi \in \mathcal{H}, \hat{A} \psi = A \psi \right\}$ l'**espace propre** associé. $\dim(\mathcal{E}_A) \geq 1$ est le degré de dégénérescence. Les espaces propres $(\mathcal{E}_A)_A$ sont orthogonaux entre eux. Dans un espace propre donné $\mathcal{E}_A$ on choisit les vecteurs propres $(\psi_a)_a$ comme formant une base orthogonale de $\mathcal{E}_A$.

A une valeur propre donnée A, on associe le projecteur spectral $\hat{\mathcal{P}}_A : \mathcal{H} \to \mathcal{E}_A$. On a les expressions utiles suivantes pour le projecteur spectral :

$$\hat{\mathcal{P}}_A = \sum_{i \, t.q. A_i = A} \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}$$

Pour l'opérateur $\hat{A}$:

$$\hat{A} = \sum_A A\hat{\mathcal{P}}_A$$

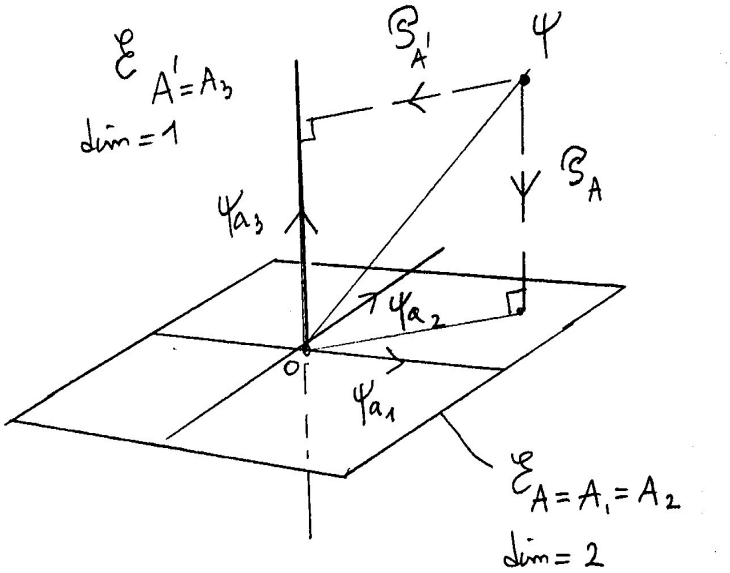
et pour l'opérateur identité :

$$\mathrm{Id} = \sum_A \hat{\mathcal{P}}_A$$

appelée **relation de fermeture**.

Démonstration. Il suffit de les vérifier sur les vecteurs propres car ils forment une base orthogonales : $\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \delta_{a,b}\langle\psi_a|\psi_a\rangle$. Considérons un vecteur propre ψ_b de $\hat{A}$. On a vu que si $A_i = A \neq A_b$ alors $\langle\psi_i|\psi_b\rangle = 0$ donc $\hat{\mathcal{P}}_A\psi_b = 0$. Au contraire si $A_b = A$ alors $\hat{\mathcal{P}}_A\psi_b = \frac{|\psi_b\rangle\langle\psi_b|\psi_b\rangle}{\langle\psi_b|\psi_b\rangle} = \psi_b$. C'est bien la définition du projecteur orthogonal sur $\mathcal{E}_A$.

De même, $\left(\sum_A A\hat{\mathcal{P}}_A\right)\psi_b = A_b\hat{\mathcal{P}}_{A_b}\psi_b = A_b\psi_b = \hat{A}\psi_b$ donc $\hat{A} = \sum_A A\hat{\mathcal{P}}_A$. Et finalement $\left(\sum_A \hat{\mathcal{P}}_A\right)\psi_b = \hat{\mathcal{P}}_{A_b}\psi_b = \psi_b$ donc $\mathrm{Id} = \sum_A \hat{\mathcal{P}}_A$. □



Il est important de savoir qu'un projecteur othogonal $\hat{\mathcal{P}}$ est caractérisé par les relations $\hat{\mathcal{P}}^2 = \hat{\mathcal{P}}$ et $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}$, voir [Fau10b].

- Dans le cas simple où la valeur propre A est non dégénérée et le vecteur propre est normalisé, $\|\psi_a\| = 1$, alors on a l'expression plus simple :

$$\hat{\mathcal{P}}_A = |\psi_a\rangle\langle\psi_a|$$

- Par exemples
  - pour l'opérateur Hamiltonien (énergie) on a

$$\hat{H} = \sum_{e=1}^{\infty} E_e |\psi_e\rangle\langle\psi_e|$$

et

$$\mathrm{Id} = \sum_e |\psi_e\rangle\langle\psi_e|$$

  - L'opérateur de position a un spectre continu car ses "valeurs propres" sont $x \in \mathbb{R}$. Pour appliquer les relations présentées ici, il faut considérer un intervalle $[x, x+dx]$ et le projecteur spectral associé s'écrit $\mathcal{P}_{|x,x+dx]} = \int_x^{x+dx} |x'\rangle\langle x'|dx'$. Pour l'opérateur position on a alors

$$\hat{x} = \int_{\mathbb{R}} x|x\rangle\langle x|dx$$

et

$$\mathrm{Id} = \int |x\rangle\langle x|dx$$

  - De même, pour l'opérateur impulsion, on a

$$\hat{p} = \int_{\mathbb{R}} p|p\rangle\langle p|dp$$

et

$$\mathrm{Id} = \int |p\rangle\langle p|dp$$

1.7.3.4 Mesure d'un état quantique

- Si la particule interagit et influence son environnement, alors l'équation de Schrödinger ci-dessus n'est pas valable.
- On dit que cet environnement est un "**détecteur**" si il "mesure" une grandeur physique particulière A appelée **observable** (ex : position x de la particule, impulsion p, énergie H, etc..). Voici comment décrire la mesure dans un cas idéal.
  - Un opérateur autoadjoint $\hat{A}$ (comme discuté ci-dessus) est associé à l'observable A. On considère ses vecteurs propres ψ_a et ses valeurs propres A_a définies par :

$$\hat{A}\psi_a = A_a\psi_a$$

où $a = 1, 2, \ldots$ sont des indices. (Dans le cas d'une mesure de position, penser par exemple que $a = 1, 2 \ldots$ numérote des détecteurs alignés sur l'axe x, et que $A_a = x_a \in \mathbb{R}$ est la position du détecteur a.)

Postulat de la mesure :

- Si la particule est dans un état initial ϕ et intéragit avec le détecteur alors le **résultat de la mesure sera une des valeurs propres** $A_1, A_2, \ldots$. Après une seule expérience il est impossible de savoir quelle valeur est obtenue, c'est le **"hasard quantique"**.
- Mais si on répète un grand nombre de fois la même expérience (cad avec le même état initial ϕ, même détecteur, même observable) alors la valeur A apparait avec la **probabilité** [15] :

$$\text{Proba}\,(A) = \frac{\left\|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\right\|^2}{\|\phi\|^2} = \frac{\langle\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}$$

  On vérifie [16] que $\sum_A \text{Proba}\,(A) = 1$.
  Remarques :
  — dans le cas simple où la valeur propre A est non dégénérée et les états sont normalisés, cad $\|\psi_a\| = 1$, $\|\phi\| = 1$, alors on a l'expression simple :

$$\text{Proba}\,(A) = \langle\phi|\underbrace{\psi_a\rangle\langle\psi_a}_{\hat{\mathcal{P}}_A}|\phi\rangle = |\langle\psi_a|\phi\rangle|^2$$

  — Si les résultats expérimentaux après N mesures sont $a_1, a_2, \ldots, a_N$, la **moyenne expérimentale** est $\langle a\rangle_N := \frac{1}{N}(a_1 + a_2 + \ldots + a_N)$. Pour $N \to \infty$ la théorie quantique prédit qu'elle converge vers une valeur précise

$$\langle a\rangle_N \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \langle A\rangle$$

  qui est la **moyenne statistique** donnée par (on utilise la relation de fermeture) :

$$\langle A\rangle := \sum_A A \cdot \text{Proba}\,(A) = \sum_A A\frac{\langle\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{\langle\phi|\hat{A}\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}$$

- **Juste après la mesure**, si la particule n'a pas été détruite, elle est alors dans l'état

$$\phi' = \hat{\mathcal{P}}_A\phi$$

  qui est donc un vecteur propre de $\hat{A}$: $\hat{A}\phi' = A\phi'$. Ce phénomène s'appelle aussi la **réduction du paquet d'onde** ou le **collapse de la fonction d'onde**.

Par exemple si on mesure la position de la particule, l'observable est l'opérateur position $\hat{x}$ et (supposant l'état initial normalisé $\|\psi\| = 1$)

$$\text{Proba}\,(x \in [x, x+dx]) = \langle\psi|\hat{\mathcal{P}}_{[x,x+dx]}\psi\rangle = \int_x^{x+dx} |\langle x'|\psi\rangle|^2\,dx' \underbrace{=}_{dx\to 0} |\langle x|\psi\rangle|^2\,dx = |\psi\,(x)|^2\,dx$$

On dit que $|\psi\,(x)|^2$ est la **densité de probabilité** en position.

15. la dernière égalité vient de ce que $\hat{\mathcal{P}}_A$ est un projecteur orthogonal vérifiant $\hat{\mathcal{P}}_A^2 = \hat{\mathcal{P}}_A$ et $\hat{\mathcal{P}}_A^\dagger = \hat{\mathcal{P}}_A$ donc : $\frac{\|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\|^2}{\|\phi\|^2} = \frac{\langle\hat{\mathcal{P}}_A\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{\langle\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{\langle\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}$.

16. Preuve : avec la relation de fermeture, $\sum_A \text{Proba}\,(A) = \sum_A \frac{\langle\phi|\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{\langle\phi|\sum_A\hat{\mathcal{P}}_A\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{\langle\phi|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = 1$

Remarque 1.7.1. Une particule quantique qui se déplace dans un milieu pas parfaitement vide est localisée sans cesse par le phénomène de réduction. Cela lui donne l'aspect d'une particule classique localisée qui se déplace .

1.8 Conseils de Lecture

- Cohen-Tannoudji [CBF], chapitres I,II,III
- Cours de Feynmann [Fey63], chapitres 1,2,3,8,20.

Pour approfondir :

- **Pour approfondir les problèmes de décohérence et de mesure quantique :**
  - Cours de C. Cohen Tanoudji du collège de France, (à télécharger sur le web !) :[Cla88]
  - Très bon cours de Joos dans : [DEC+96]
  - Cours de S. Haroche du collège de france [Har02].
- **Pour approfondir les aspects mathématiques,**
  - Mathématiques générales : [YCB82]
  - Livre de mathématiques sur l'analyse fonctionnelle : Reed & Simon [RS72].
  - Pour plus de précisions sur la théorie mathématique des opérateurs linéaires non bornés :[RS72] chapitre VIII.
  - Sur la théorie des distributions : [Tay96a],[Sch66], ou [CB73].
  - Mathématiques pour la mécanique quantique : [SI00].