

# Physique Quantique I

V. Savona

27 novembre 2013

## 1 Introduction

La « mécanique quantique » est la théorie qui décrit le comportement de la lumière et de la matière.

A l'échelle macroscopique, ces deux phénomènes sont décrits respectivement par la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell et par la théorie de la mécanique de Newton. A la base de ces deux descriptions, il y a les concepts d'onde et de particule, qui sont aussi les éléments conceptuels de base de notre compréhension de la nature. Le concept d'onde (électromagnétique, élastique dans un solide, de pression dans un gaz, etc.) évoque l'idée d'un phénomène étendu à tout l'espace, caractérisé par une amplitude et par une phase, et capable de produire le phénomène de l'interférence. Le concept de particule, par contre, nous fait penser à des entités localisées en un point de l'espace, caractérisées par des trajectoires en fonction du temps, et capables de subir des chocs.

Au début du vingtième siècle, des expériences sur la lumière et sur les particules élémentaires ont mis en évidence quelques « anomalies » par rapport aux comportements attendus. Plus exactement elles ont suggéré que, dans des conditions particulières et surtout à l'échelle microscopique, la lumière peut parfois se comporter comme une particule et une particule de matière comme une onde. Ce sont surtout ces expériences qui ont stimulé le progrès en physique théorique qui a eu lieu entre 1900 et 1927, grâce aux travaux de Pauli, Einstein, Bohr, Heisenberg, Schrödinger, Born, et Dirac. Ce progrès a produit la théorie de la mécanique quantique telle que nous la connaissons aujourd'hui.

La mécanique quantique n'est pas seulement un formalisme permettant de faire de calculs et de prévoir les résultats des expériences. Elle est surtout une nouvelle et révolutionnaire interprétation conceptuelle de la réalité physique à l'échelle microscopique, avec un côté profondément philosophique. C'est pourquoi un quart de siècle a été nécessaire pour sa compréhension. A la

base de cette révolution sont le concept de dualité onde-corpuscule et le processus de mesure.

La découverte fondamentale de ce quart de siècle a été que le comportement de la lumière et de la matière ne s'identifie ni à celui de l'onde, ni à celui de la particule. Il s'agit d'un comportement particulier, pour lequel les seules idées d'onde et de particule sont inadéquates. Malheureusement, nous ne disposons que des idées d'onde et de particule pour une description conceptuelle de la réalité. Ces concepts « classiques » dérivent de notre expérience directe du monde réel à l'échelle macroscopique, et sont donc insuffisants pour rendre compte de phénomènes naturels à l'échelle microscopique.

L'idée proposée par la « philosophie de Copenhague »<sup>1</sup> est de ne pas renoncer aux concepts d'onde et de particule. Il faut au contraire accepter le fait que lumière et matière ont un comportement qui est parfois celui d'une particule et parfois celui d'une onde... sans être donc ni l'un ni l'autre ! Nous appelons cette idée « dualité onde-particule ». La mécanique quantique nous offre toutefois une simplification essentielle : elle nous dit que la matière et la lumière se comportent exactement de la même façon ! Nous verrons par la suite que les mêmes expériences, mettant en évidence le comportement quantique de la nature, peuvent être menées avec de la lumière ou de la matière, avec des conclusions identiques.

Un autre aspect fondamental mis en évidence par les expériences est celui de la « complémentarité quantique », qui a été formalisée par Bohr. Le principe de la complémentarité quantique dit que les comportements d'onde et de particule sont mutuellement exclusifs : il ne peuvent pas se manifester en même temps pour le même système. Le principe d'incertitude de Heisenberg n'est qu'un cas particulier de ce comportement exclusif. Nous ne pouvons pas connaître en même temps, avec précision arbitraire, la position (trajectoire, caractère de particule) et l'impulsion ( $p = h/\lambda$ , longueur d'onde, caractère d'onde) d'un système physique. La complémentarité quantique semblerait donc être reliée au processus de mesure. Remarquez toutefois les mots que nous avons utilisés : « nous ne pouvons pas *connaître*... ». Nous aurions pu écrire « nous ne pouvons pas *mesurer*... », mais cela aurait été moins précis. Le développement de la mécanique quantique au cours du vingtième siècle, avec les idées de Feynman et les expériences en optique quantique des années '80 et '90, ont montré sans aucun doute que la complémentarité ne traduit pas simplement une limite des capacités de l'expérimentateur ou de l'équipement de laboratoire. Elle est au contraire une caractéristique in-

---

1. On appelle ainsi la structure interprétative de la mécanique quantique qui s'est développée à travers les plusieurs discussions entre Einstein et Bohr, ce dernier étant le représentant de l'École de Copenhague de physique.

trinsèque et inéluctable de la nature même. C'est cette découverte qui constitue la vraie révolution conceptuelle de la mécanique quantique.

Pour bien comprendre ces idées, une méthode consisterait à reparcourir en détail toutes les étapes historiques du développement de la mécanique quantique, de 1900 à 1927. Cela prendrait malheureusement beaucoup de temps et nous laissons donc le choix à l'étudiant d'approfondir cet aspect historique. Dans cette introduction, nous utiliserons une approche beaucoup plus directe, proposée par R. Feynman dans ses célèbres leçons. A travers l'illustration des résultats de plusieurs *expériences de pensée* (*Gedankenexperiment*), nous viserons droit au coeur de la mécanique quantique, pour comprendre les implications profondes de la dualité onde-particule et de la complémentarité quantique. Une fois ces concepts clairs, nous pourrions emprunter, dans les chapitres suivants, un chemin plus rigoureux qui nous emmènera à apprendre le formalisme, les éléments de base de la théorie et ses résultats les plus importants.

## 1.1 La dualité onde-particule

Nous allons considérer l'expérience de Young. Il s'agit d'une expérience très connue pour les ondes de lumière. Une onde électromagnétique arrive sur une plaque où se trouvent deux fentes. Si la taille des fentes est comparable à la longueur d'onde, la lumière qui passe à travers les deux fentes est diffractée et produit une figure d'interférence sur un écran posé de l'autre côté de la plaque. Dans le contexte des ondes électromagnétiques, ce comportement est parfaitement compris et expliqué par les équations de Maxwell.

Nous allons utiliser l'expérience de Young comme expérience de pensée, pour caractériser le comportement des particules, des ondes, et puis pour montrer qu'un « objet » quantique tel qu'un électron aura un comportement qui n'est ni celui des particules, ni celui des ondes.

### 1.1.1 Expérience de Young avec des balles

Considérons, comme exemple de particules, des balles tirées par une mitrailleuse. Il s'agit d'objets macroscopiques pour lesquelles nous sommes sûrs que la description classique s'applique. Supposons qu'il s'agit d'une très mauvaise mitrailleuse, qui tire les balles en plusieurs directions au hasard. Les fentes sont suffisamment grandes pour laisser passer une balle, mais assez petites pour que la balle, en passant, fasse presque toujours des chocs avec les bords de la fente. Dans l'expérience de Young nous allons avoir besoin d'un détecteur d'arrivée des balles. Nous pouvons utiliser une boîte de sable qui va absorber les balles, que nous allons compter à la fin de l'expérience.

La figure 1 montre un schéma de cette expérience. Voici, en quelques mots, les caractéristiques essentielles de cette expérience de pensée.

1. Mitrailleuse : tire au hasard en une direction variable sur l'angle
2. Deux fentes, petites, qui laissent juste passer les balles, souvent avec choc
3. Paroi qui absorbe toutes les balles (pas de rebond)
4. Détecteur (boîte de sable) : nous pouvons le placer le long de  $x$ , attendre un temps  $T$  et compter les balles à l'intérieur

$$P(x) = N/T \propto \text{probabilité de terminer en } x$$

**Remarque :** Nous parlons de probabilité : nous ne connaissons pas la direction de la mitrailleuse ni l'effet des fentes.

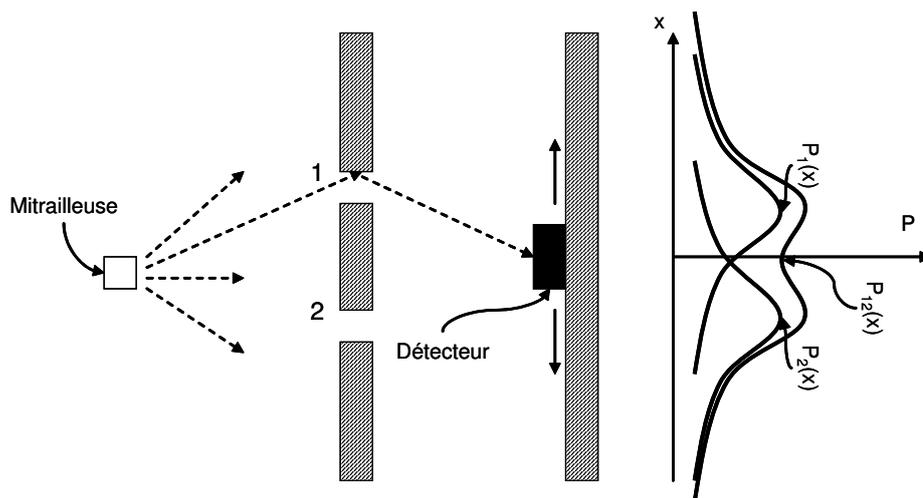


FIGURE 1 – Schéma de l'expérience de Young avec des balles tirées par une mitrailleuse.

Nous remarquons d'abord que les balles arrivent par unités discrètes. En d'autres mots, dans le détecteur il ne se passe rien jusqu'à l'arrivée d'une balle. Cette arrivée correspond à un choc dans le détecteur, avec une durée très courte dans le temps. Les balles ne se cassent jamais en plusieurs fragments, mais restent toujours entières et identiques : nous soulignons ce fait puisque nous avons besoin du concept de particule en tant qu'unité élémentaire. Nous pouvons maintenant fermer la fente 2 et mesurer la distribution  $P_1(x)$  des balles le long de la direction  $x$  de la paroi. Pour mesurer cette distribution nous pouvons placer le détecteur en  $x$  et compter

le nombre de balles qui arrivent en une unité de temps donnée, puis déplacer le détecteur et recommencer. Le résultat sera une fonction  $P_1(x)$ . Nous pouvons faire la même chose après avoir fermé la fente 1 à la place de la fente 2. Nous aurons ainsi mesuré la distribution  $P_2(x)$ . Les deux distributions sont illustrées dans la figure 1. Si maintenant nous effectuons la même mesure avec les deux fentes ouvertes, nous mesurons la distribution  $P_{12}(x)$ . Cette distribution est aussi illustrée dans la figure 1. Il est assez intuitif que la distribution  $P_{12}(x)$  soit donnée par la somme des deux distributions  $P_1(x)$  et  $P_2(x)$ . En d'autres mots, l'effet combiné des deux fentes ouvertes n'est rien d'autre que la somme des deux phénomènes avec une seule fente ouverte. Faisons un résumé des faits importants.

En résumant le résultat,

1. Les balles arrivent une à la fois, identiquement. Les chocs dans le détecteur sont toujours de la même intensité (pas de fragment de balle) et à la fin nous pouvons compter les balles.
2. Mesurons  $P_1(x)$  et  $P_2(x)$  en gardant la fente 2 ou 1 fermée, respectivement. Après, mesurons  $P_{12}(x)$  avec deux fentes ouvertes. Nous avons que  $P_{12} = P_1 + P_2$ .

### 1.1.2 Expérience de Young avec des ondes

Nous pouvons répéter l'expérience de Young avec des ondes. Par exemple nous pouvons utiliser les ondes produites par une perturbation mécanique sur la surface de l'eau. La source serait un mécanisme qui tape régulièrement sur la surface de l'eau. Les fentes ont un taille comparable à la longueur des ondes. L'onde initiale est diffractée par les deux fentes, chaque fente produisant une nouvelle onde sphérique à la sortie. Le détecteur pourrait être un mécanisme flottant, qui nous permet de mesurer l'amplitude  $A(x, t)$  des oscillations de la surface de l'eau à la position  $x$  et au temps  $t$ . Comme avant, le détecteur peut être déplacé le long de la paroi. La paroi est totalement absorbante (imaginons les ondes qui arrivent sur la plage). L'expérience est illustrée en figure 2. Les caractéristiques essentielles de cette expérience avec des ondes sont :

1. Ondes produites sur la surface de l'eau par un dispositif mécanique
2. Deux fentes, taille comparable ou plus petite de la longueur d'onde
3. Paroi absorbante
4. Détecteur (flotteur, dont on mesure la hauteur au cours du temps).

L'intensité des oscillations de la surface de l'eau est définie de manière standard pour un phénomène ondulatoire, comme  $I(x) = |\max A(x, t)|^2$ . Par

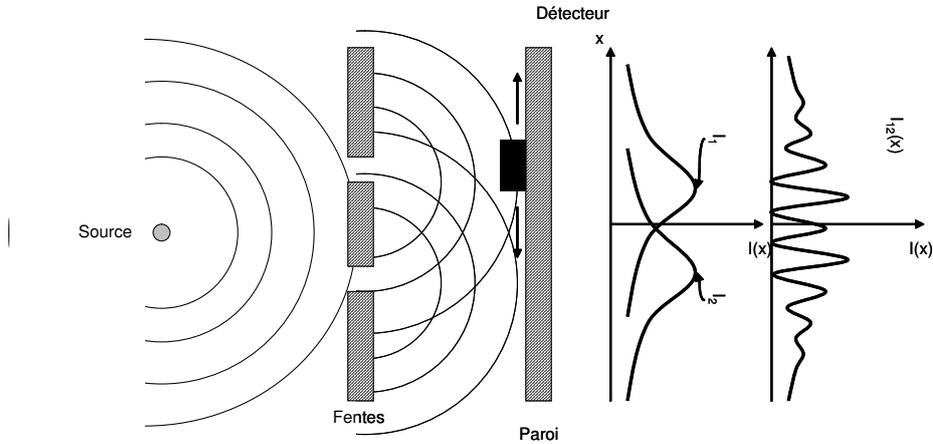


FIGURE 2 – Schéma de l'expérience de Young avec des ondes sur la surface de l'eau.

analogie avec l'électromagnétisme, nous pouvons représenter l'onde par une fonction complexe  $A(x, t) = A(x)e^{-i\omega t}$  dont la partie réelle décrit l'amplitude des oscillations. Dans ce cas, l'intensité est donnée par  $I(x) = |A(x, t)|^2$ . Il est très important de remarquer que maintenant l'intensité mesurée au détecteur peut varier sur une échelle continue, différemment du cas des balles. Le caractère « discontinu » (type particule) est remplacé par le caractère « continu » et étendu dans tout l'espace (type onde).

Comme avant, nous voulons mesurer  $I_1(x)$ ,  $I_2(x)$  et  $I_{12}(x)$ , respectivement avec la fente 1 ouverte, la fente 2 ouverte, et les deux fentes ouvertes. Nous obtenons :

$$I_1(x) = |A_1(x)|^2, \quad I_2(x) = |A_2(x)|^2,$$

et

$$\begin{aligned} I_{12}(x) &= |A_1(x) + A_2(x)|^2 \\ &= I_1(x) + I_2(x) + \underbrace{2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta(x)}_{\text{interférence}}, \end{aligned}$$

où  $\delta(x)$  est la différence entre les phases des deux ondes sphériques arrivant au point  $x$  des deux fentes. Ce terme produit l'interférence entre les deux ondes sphériques provenant des deux fentes. Pour des ondes, l'interférence est un phénomène très intuitif, auquel nous sommes habitués. Nous remarquons que  $I_{12}$  n'est pas la somme de  $I_1$  et  $I_2$ . Il peut être plus grand (interférence

constructive) ou plus petit (interférence destructive), selon la différence de phase des deux ondes au détecteur.

En résumé,

1. Les ondes arrivent de manière continue, à la fois en amplitude et extension spatiale
2. Il y a le phénomène de l'**interférence** :  $I_{12} \neq I_1 + I_2$ .

### 1.1.3 Expérience de Young avec des électrons

Maintenant nous imaginons de faire la même expérience avec des électrons. L'expérience est illustrée en figure 3. La source est un filament chauffé par un courant électrique. Nous pouvons supposer que les électrons ont tous (presque) la même énergie cinétique. Le détecteur pourrait être un détecteur Geiger, qui produit un clic à chaque arrivée d'un électron. Souvenez-vous qu'il s'agit d'une « expérience de pensée » (*Gedankenexperiment*). En réalité elle serait plus complexe (bien que pouvant être réalisée de façon presque similaire aujourd'hui avec des photons).

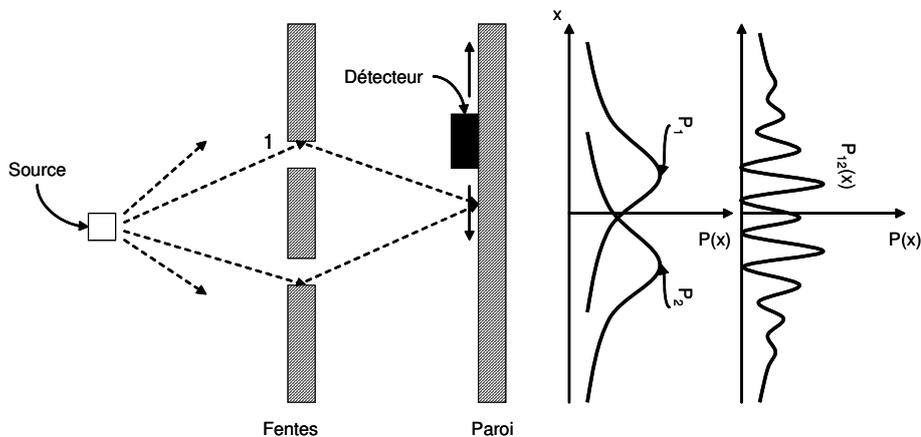


FIGURE 3 – Schéma de l'expérience de Young avec des électrons.

Résumons les caractéristiques de l'expérience :

1. Source : par exemple une cathode chaude. Directions aléatoires comme pour les balles. Énergie cinétique identique pour les électrons
2. Paroi absorbante
3. Deux fentes. L'expérience est sur une échelle microscopique
4. Détecteur (compteur Geiger ou multiplicateur, avec audio pour entendre les clics)

A l'arrivée des électrons, nous entendons des clics au détecteur. Ils sont tous semblables : même bruit, même intensité du son. Ils sont répartis dans le temps de manière aléatoire. Cela nous dit que les électrons arrivent de manière discrète et sont identiques, comme des balles. Le taux  $P = N/T$  est en moyenne constant dans le temps.

Encore une fois, nous pouvons mesurer  $P_1(x)$ ,  $P_2(x)$  et  $P_{12}(x)$ , respectivement avec la fente 1 ouverte, la fente 2 ouverte, et les deux fentes ouvertes. Le résultat est surprenant !

$$P_{12}(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$$

$P_{12}(x)$  montre de l'interférence ! Ce résultat est illustré dans la figure 3.

Comment expliquer cela ? Le comportement des électrons n'est visiblement ni celui des particules, ni celui des ondes. Comme les particules, les électrons arrivent par unités discrètes et identiques. Comme la lumière, par contre, ils produisent une figure d'interférence. Nous ne pouvons donc pas attribuer aux électrons un caractère de particule ou de lumière. **L'électron n'est ni l'un, ni l'autre.**

En revanche, il est difficile de comprendre ce qui se passe effectivement dans cette expérience. Si les électrons arrivent par unités distinctes, il est naturel de se poser la question : « par quelle fente est passé l'électron ? ». En d'autres mots, il est naturel de penser que chaque électron passe par une des deux fentes. Considérons cette proposition :

*Proposition A* : Chaque électron passe par la fente 1 **ou** par la fente 2.

L'aspect corpusculaire de l'expérience, c'est-à-dire que les électrons arrivent par unités discrètes, nous pousserait à dire que (A) est vraie. L'interférence qu'on observe, par contre, nous suggère qu'elle est fausse. Si elle était vraie, on pourrait bloquer 2 et mesurer  $P_1$ , puis bloquer 1 et mesurer  $P_2$ . (A) nous dit que nous avons ainsi mesuré l'effet combiné des deux fentes. Mais  $P_{12} \neq P_1 + P_2$  tandis que si un électron passait ou par 1 ou par 2, on devrait nécessairement avoir  $P_{12} = P_1 + P_2$ . Nous pouvons imaginer des trajectoires exotiques bizarres pour les électrons (cela a été fait) mais elles sont insuffisantes pour expliquer le résultat de cette expérience.

Toutefois, d'un point de vue strictement mathématique, nous pourrions suggérer une description très simple et très intéressante. Supposons que les distributions  $P(x)$  soient liées à des amplitudes complexes  $\phi(x)$ , exactement comme l'intensité  $I(x)$  du champ électromagnétique est liée à son amplitude complexe  $A(x)$ . Nous aurions dans ce cas :

$$\begin{aligned}
 P_1 &= |\phi_1|^2, \quad \phi_1 \in \mathbb{C} \\
 P_2 &= |\phi_2|^2, \quad \phi_2 \in \mathbb{C} \\
 P_{12}(x) &= |\phi_1 + \phi_2|^2 \neq P_1 + P_2
 \end{aligned}$$

Cette hypothèse n'a pour l'instant aucun fondement physique. Nous verrons par la suite qu'il s'agit du concept de *fonction d'onde*, et qu'il constitue un des éléments fondamentaux de la révolution conceptuelle apportée par la mécanique quantique.

En revenant à l'interprétation de notre expérience de Young, il est clair que le nombre d'électrons qui arrivent à un point n'est pas la somme de ceux qui passent par 1 et par 2. Il faut donc essayer de mieux étudier la trajectoire de l'électron.

#### 1.1.4 Expérience de détection de chemin

Pour mieux connaître la trajectoire de l'électron, nous rajoutons une source de lumière au milieu des fentes :

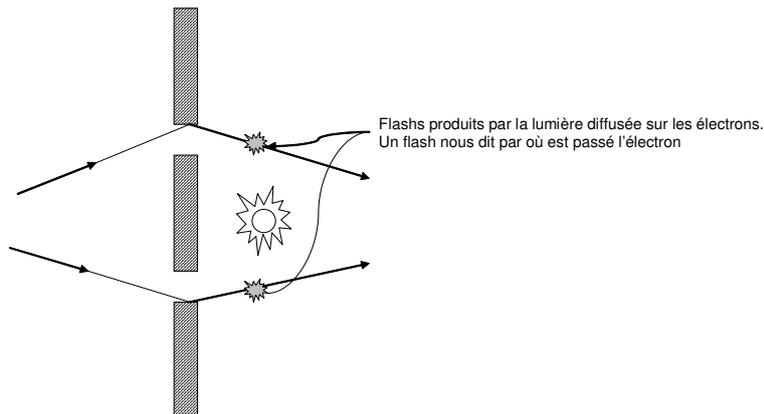


FIGURE 4 – Schéma du mécanisme de détection de la trajectoire prise par l'électron, au moyen d'une ampoule.

La lumière émise par cette ampoule sera diffusée par l'électron qui passe à côté. Nous allons pouvoir visualiser cette lumière diffusée comme un « flash » de lumière au passage de l'électron. Le côté où le flash apparaît nous indique par quelle fente est passé l'électron. Donc, à chaque click dans le détecteur nous avons aussi un flash et nous pouvons compter les électrons qui passent par 1 et par 2. Définissons

$$P'_1(x) = \frac{N}{T} \text{ nombre de clicks avec passage (flash) en 1}$$

$$P'_2(x) = \frac{N}{T} \text{ nombre de clicks avec passage en 2}$$

L'expérience nous montre un fait très important : le flash est toujours en 1 ou en 2, jamais aux deux points ensemble ! Donc la proposition (A) semblerait correcte (avec cette expérience) ! Les deux quantités  $P'_1(x)$  et  $P'_2(x)$  sont illustrées en figure 5.

Il est d'ailleurs clair que, si à chaque click nous avons aussi un flash, alors nous pouvons identifier les distributions mesurées en fermant une fente avec celles mesurées par la méthode des flashes. En d'autres mots,

$$P'_1(x) = P_1(x)$$

$$P'_2(x) = P_2(x)$$

Mais maintenant la distribution totale des électrons, correspondant à l'effet combiné des deux fentes ouvertes, est par définition bien évidemment

$$P'_{12}(x) = P'_1(x) + P'_2(x).$$

Il est évident, par ailleurs, que  $P'_{12}(x)$  ainsi défini ne peut pas présenter des franges d'interférence ! Ceci est illustré en figure 5. Le résultat de cette nouvelle expérience devient de plus en plus bizarre. Nous aurions dit que  $P'_{12}(x)$  doit correspondre à  $P_{12}(x)$ , mais ce n'est pas le cas ! En effet, si à la place d'un détecteur nous avons utilisé une plaque photographique, alors en présence de la lumière nous aurions observé une trace uniforme, sans franges d'interférence, laissée par les électrons. En plus, si on éteint la lumière, la figure d'interférence réapparaît !!

Faisons maintenant l'hypothèse que la lumière influence les électrons et change leur trajectoire, de manière à pouvoir expliquer le changement radical produit par la présence de l'ampoule allumée. Essayons donc de baisser l'intensité de la lumière et d'en constater l'effet : les flashes ne sont pas plus faibles mais simplement moins fréquents. Ceci parce que la lumière a aussi un comportement quantique : en baisser l'intensité c'est diminuer le nombre

de « photons » sans les modifier (nous comprendrons cela par la suite). Le résultat est que certains électrons réussissent à passer sans être atteints par la lumière et donc sans produire de flash, tout en produisant un click à l'arrivée au détecteur. Maintenant, à chaque click du détecteur, nous pouvons compter

$$P'_1(x) \text{ (click et flash en 1)}$$

$$P'_2(x) \text{ (click et flash en 2)}$$

$$P''_{12}(x) \text{ (click sans flash)}$$

Considérons d'abord la distribution des électrons dont nous avons mesuré la trajectoire. Elle est définie comme avant par

$$P'_{12}(x) = P'_1(x) + P'_2(x).$$

Comme avant,  $P'_{12}(x)$  ne montre pas d'interférence, comme illustré dans la figure 5.

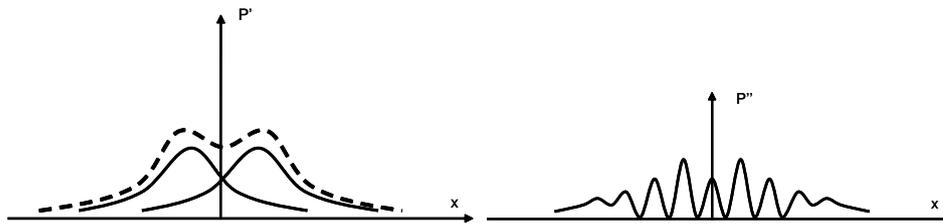


FIGURE 5 – Illustration des deux distributions  $P'_{12}(x)$  et  $P''_{12}(x)$  dans l'expérience où la lumière émise par l'ampoule est assez faible pour que certains électrons passent sans que leur trajectoire soit mesurée.

De manière surprenante, par contre, la distribution des électrons dont nous n'avons pas mesuré la trajectoire,  $P''_{12}(x)$  montre de l'interférence ! Il est donc impossible de tirer un conclusion sur la trajectoire suivie par l'électron. La seule conclusion que nous pouvons tirer de ces observations est : *il est impossible de connaître la trajectoire de l'électron et avoir de l'interférence en même temps*. Il s'agit exactement de l'expression du principe de complémentarité quantique, énoncé par Niels Bohr dans les années 20. Nous le rappelons encore :

**Principe de complémentarité quantique :** Dans une expérience de physique, la **connaissance de la trajectoire** (caractère de particule) et l'**interférence** (caractère d'onde) sont mutuellement exclusifs.

Le principe d'incertitude d'Heisenberg, comme nous le verrons, découle du principe de complémentarité quantique. Que pouvons-nous dire de la proposition (A)? Tout simplement, elle n'a pas de sens. La seule chose que nous pouvons affirmer est le principe de complémentarité : si nous pouvons savoir par où est passé l'électron, il n'y aura pas d'interférence ; autrement, il y aura de l'interférence.

Il nous reste une dernière question importante à nous poser. Le principe de complémentarité est-il une limitation de la mesure (de l'expérimentateur ou de l'équipement de laboratoire) ? En d'autres mots, est-il possible que la mesure de la trajectoire puisse influencer l'électron à un tel point qu'il change son « état » physique ? Cette interprétation a été en effet la plus acceptée pendant très longtemps. Assez récemment, au cours des années 70 et 80, des nouvelles expériences en optique quantique ont mené les chercheurs à modifier cette interprétation. On s'est posé la question, si la complémentarité quantique ne serait une caractéristique intrinsèque de la nature, qui ne dépend pas de l'action de l'expérimentateur. Ce nouveau point de vue serait moins « anthropocentrique » et donc plus acceptable dans le contexte des lois fondamentales de la nature.

### 1.1.5 Expérience de Young avec électrons et « dédoubleurs »

Pour répondre à cette dernière question nous allons nous imaginer une dernière expérience de pensée. Imaginons que dans les fentes de l'expérience de Young avec électrons, nous ayons installé deux dispositifs spéciaux que nous appelons « dédoubleurs d'électrons »

Un « dédoubleur » est un dispositif qui transforme chaque électron à l'entrée en deux électrons à la sortie, que nous appelons « électron signal » et « électron complémentaire » (indiqués par “s” et “c”). Ce processus se produit en conservant l'énergie et la quantité de mouvement totales. Un tel dispositif existe pour les photons : il suffit d'avoir un cristal qui soit caractérisé par une non-linéarité optique de type  $\chi^2$ , pour qu'un photon avec fréquence  $\nu$  et vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  soit transformé en deux photons avec fréquence  $\frac{\nu}{2}$  et vecteur d'onde  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  tels que  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ .

Cette expérience a en effet été réalisée par L.Mandel avec des photons en 1991 [1][2].

Il faut préciser qu'un « dédoubleur » ne détruit pas la « phase » de l'onde que nous avons constaté être présente pour un électron dans cette expérience. En d'autres termes, l'électron initial n'est pas détruit, mais véritablement transformé en deux électrons.

Nous pouvons régler l'expérience de manière à ce que l'électron signal soit dirigé vers la paroi, en suivant les chemins  $s_1$  et  $s_2$ . Nous allons considérer

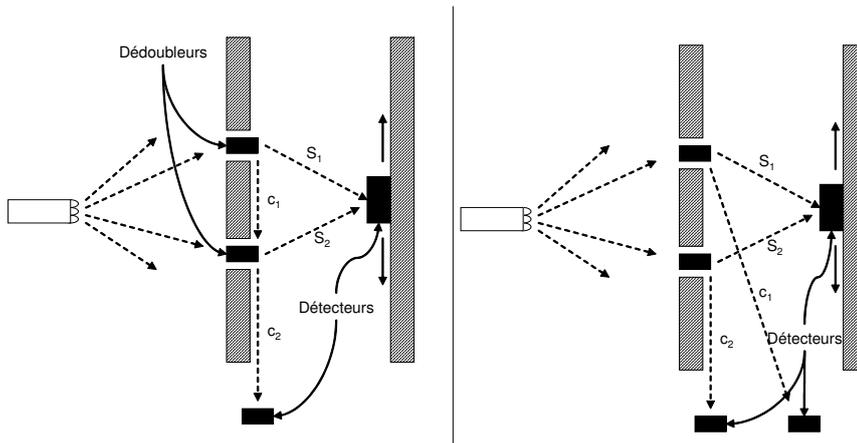


FIGURE 6 – Schéma de l’expérience de Young avec des électrons et des dédoubleurs.

deux cas de figure.

1. Le réglage est tel que l’électron complémentaire part toujours en direction parallèle à la paroi, donc suivant les chemins  $c_1$  et  $c_2$  qui se superposent.
2. Le réglages est tel que les chemins  $c_1$  et  $c_2$  ne se superposent pas.

Il faut maintenant faire une remarque importante. Un dédoubleur dédouble un électron avec probabilité 100%. En d’autres termes, si un électron signal est produit, alors nous avons la certitude qu’un électron supplémentaire a aussi été émis. C’est exactement ainsi que les cristaux non-linéaires de L.Mandel fonctionnent. On appelle cela une « corrélation de paires ».

Nous allons maintenant faire l’expérience sans jamais essayer de mesurer la trajectoire de l’électron signal. Son “état” ne peut donc pas être modifié par l’expérimentateur. Nous allons par contre choisir d’effectuer ou non la détection de l’électron complémentaire. C’est un peu comme pour la source de lumière du cas précédent, avec la seule différence que maintenant nous pouvons en principe mesurer la présence d’un électron signal sans le déranger, par la détection du complémentaire. Observons-nous de l’interférence dans les quatre cas suivants ?

- 1a)  $c_1 \equiv c_2$ ; on effectue la détection de l'électron complémentaire.
- 1b)  $c_1 \equiv c_2$ ; on n'effectue pas la détection de l'électron complémentaire.
- 2a)  $c_1 \not\equiv c_2$ ; détection (de  $c_1$  ou  $c_2$ ).
- 2b)  $c_1 \not\equiv c_2$ ; pas de détection.

La réponse est très étonnante. Nous observons l'interférence dans les cas (1a) et (1b). Nous ne l'observons pas (comme pour les balles) dans les cas (2a) et (2b). Donc *le fait d'effectuer ou non la mesure n'a aucune influence sur le résultat de l'expérience !*.

Nous pouvons interpréter ce résultat de la façon suivante : dans le cas (1) les trajectoires des deux complémentaires possibles  $c_1$  et  $c_2$  sont alignées. Même en détectant un électron complémentaire donc, il est impossible de dire s'il est venu de la première ou de la deuxième fente. Un électron  $c$  est toujours corrélé avec le  $s$  correspondant. Il est donc impossible dans cette configuration d'établir par quelle fente l'électron  $s$  est passé. Par le principe de complémentarité nous pouvons donc avoir (...et nous avons...) de l'interférence entre les deux possibles chemins  $s_1$  et  $s_2$ .

Dans le cas (2) les trajectoires  $c_1$  et  $c_2$  sont différentes. Il est donc possible, *en principe* de détecter un électron en  $c_1$  ou en  $c_2$ . Un électron en  $c_1$  nous assure que l'électron  $s$  est passé par la fente  $s_1$  (de même pour  $c_2, s_2$ ). Il est donc possible d'établir la trajectoire de l'électron  $s$  sans la modifier par une mesure directe, grâce à la corrélation avec l'électron  $c$ . Cette *possibilité* elle seule, suffit à assurer l'absence d'interférence grâce au principe de complémentarité. Il faut remarquer que dans le cas (2) il serait impossible d'obtenir deux réponses différentes pour (2a) et (2b). En effet, c'est l'électron  $s$  qui produit ou non l'interférence. Mais en mesurant l'électron  $c$  nous n'influons en aucun cas l'électron  $s$  (à moins d'imaginer des phénomènes très compliqués de rétroaction dont l'existence peut être exclue en modifiant l'expérience). Il serait donc impossible d'obtenir deux résultats différents pour (2a) et (2b).

Cette expérience (de pensée pour nous, mais effectivement réalisée en 1991 par Mandel) a donc démontré que le principe de complémentarité est une possibilité intrinsèque et inéluctable d'un système physique, et pas une conséquence de l'acte de la mesure. D'autres expériences menées à partir des années 80 ont mis en évidence ce fait. Nous aimerions mentionner en particulier les expériences où l'on a fait attention à ce que la mesure de la trajectoire ne puisse pas produire une perturbation assez grande pour changer l'état du système (c'est une preuve basée sur un argument quantitatif et donc moins frappante) [3]. Tout aussi enthousiasmantes ont été les expériences appelées l'« effaceur quantique » et le « choix retardé » menées par M.Scully dans les années 80 [4,5,6].

### 1.1.6 Choses à retenir

1. Dualité onde-particule : un système en mécanique quantique n'est pas caractérisé par un comportement toujours purement ondulatoire ou toujours purement corpusculaire. Le vrai comportement n'est ni celui d'une onde, ni celui d'une particule.
2. Principe de Complémentarité Quantique (dans sa forme la plus moderne : oublier la « rétroaction » de la mesure sur le système) : La *possibilité* de connaître la trajectoire d'un système et sa capacité de produire l'interférence quantique, sont deux aspects mutuellement exclusifs. Il ne peuvent donc pas se manifester simultanément.
3. Le concept de probabilité devient nécessaire (pas seulement une limitation de la mesure).
4. Un « champ » ondulatoire complexe  $\phi(x, t)$  avec la distribution de probabilité donnée par  $P(x, t) = |\phi(x, t)|^2$  pourrait facilement décrire les observations expérimentales.

## Références

- [1] L. Mandel, *Re. Mod. Phys* 71, S274, (1999)
- [2] X.Y.Zou, L.J. Wang & L.Mandel, *Phys. Rev. Lett.* 67, 318 (1991)
- [3] S.Dürr, T.Nonn & G.Rempe, *Nature* 395, 33 (1998)
- [4] M.O.Scully & K.Drühl, *Phys. Rev. A* 25, 2208 (1982)
- [5] M.O.Scully, B.-G. Englert & H.Walther, *Nature* 351, 111 (1991)
- [6] Y.-H. Kim, R.Yu, S.P. Kulik, Y.Shih & M.O.Scully, *Phys. Rev. Lett.* 84, 1 (1999)

## 1.2 Les relations de Einstein-de Broglie

Planck en 1900 a montré que la seule manière possible d'expliquer le spectre du corps noir est d'introduire la relation

$$E = nh\nu \quad (n \text{ entier})$$

entre l'énergie de la lumière et sa fréquence. C'était la première indication que l'énergie d'un système physique ne peut prendre que certaines valeurs discrètes. La découverte de ce « quantum d'énergie » a constitué le début de la mécanique quantique. La quantification de l'énergie évoque aussi une nature corpusculaire de la lumière, sans toutefois constituer une description formellement complète de la dualité onde-particule.

Face à la physique du corps noir, nous sommes amenés à réfléchir sur un détail important. Le corps noir contient un champ électromagnétique qui est produit par les processus d'émission et d'absorption par les atomes qui forment les parois. Comment pouvons-nous être sûrs que  $\epsilon = h\nu$  est une caractéristique intrinsèque de la lumière et non pas une conséquence spécifique de ces processus? En d'autres termes, peut-on produire de la lumière de fréquence  $\nu$  et énergie autre que  $E = nh\nu$ ? Ce sont deux expériences fondamentales, l'effet photoélectrique et l'effet Compton, qui prouvent que  $\epsilon = h\nu$  est une caractéristique intrinsèque et inéluctable de la lumière, indépendante du mécanisme qui la produit. De surcroît, ces deux expériences ont permis une interprétation beaucoup plus directe du champ électromagnétique comme étant constitué de particules.

### 1.2.1 Effet photoélectrique

L'expérience consiste à irradier un métal avec du rayonnement ultraviolet. On observe que sous certaines conditions le métal se charge positivement. Ce phénomène est interprété comme le résultat d'émission d'électrons qui viennent de l'ionisation des atomes. Des expériences plus avancées ont aussi mis en évidence les électrons émis et mesuré leur énergie cinétique.

Discutons d'abord à quel résultat nous nous attendrions en faisant appel à notre intuition basée sur la physique classique. Imaginons les électrons liés aux atomes comme des particules dans des puits de potentiel (voir le schéma en figure 7). En présence d'un champ électromagnétique oscillant, l'électron va acquérir de l'énergie cinétique à chaque oscillation et donc l'amplitude de ces oscillations va progressivement augmenter jusqu'à extraire l'électron du puits (ionisation) Nous nous attendons donc à ce que :

1. Le temps nécessaire à ioniser l'atome augmente si on réduit l'intensité de la lumière (moins d'énergie absorbée par oscillation).

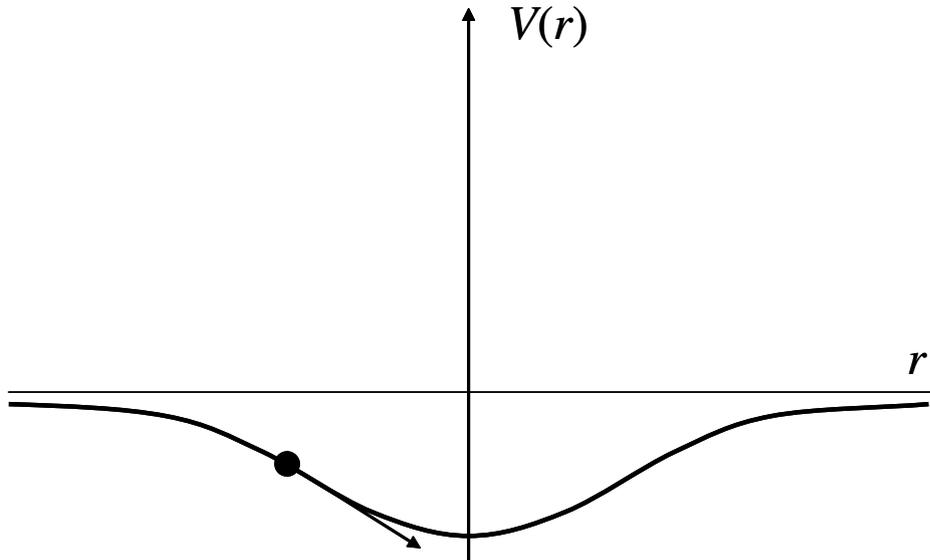


FIGURE 7 – Schéma d’une particule classique dans un puits de potentiel avec barrières de hauteur finie.

2. L’énergie cinétique  $E_c$  des électrons émis par le métal varie avec l’intensité de la lumière.

Les expériences ont par contre mis en évidence le comportement suivant :

1. Il y a une fréquence de seuil  $\nu_0$  du champ, au dessous de laquelle il n’y a pas de photoionisation.
2. Pour  $\nu = \nu_0$  le temps nécessaire à l’émission d’un électron est instantané. Même pour des très faibles intensités de lumière il y a quelques électrons qui seront émis instantanément.
3. L’intensité des électrons émis est proportionnelle à l’intensité de la lumière incidente.
4. L’énergie  $E_c$  des électrons émis est

$$E_c = \alpha (\nu - \nu_0) \quad \text{avec } \alpha = h \text{ constante de Planck}$$

L’idée d’Einstein, que le rayonnement électromagnétique est constitué de quanta d’énergie  $\epsilon = h\nu$ , permet d’expliquer très naturellement ces observations. L’énergie du quantum est donnée complètement à l’électron. Une partie de cette énergie est nécessaire pour l’extraction du puits de potentiel, le reste étant converti en énergie cinétique de l’électron émis, comme illustré dans la figure 8. Les points 1. et 4. sont ainsi très naturellement expliqués. Nous pouvons également comprendre le point 2. si nous réfléchissons au fait que,

pour une intensité arbitrairement basse de lumière, nous avons un nombre fini de quanta d'énergie  $\epsilon = h\nu$ , et qu'il suffit d'un de ces quanta pour ioniser un atome. Le même raisonnement nous permet de comprendre le point 3. : on en déduit que l'intensité de la lumière est proportionnelle au nombre de ces quanta.

L'effet photoélectrique a

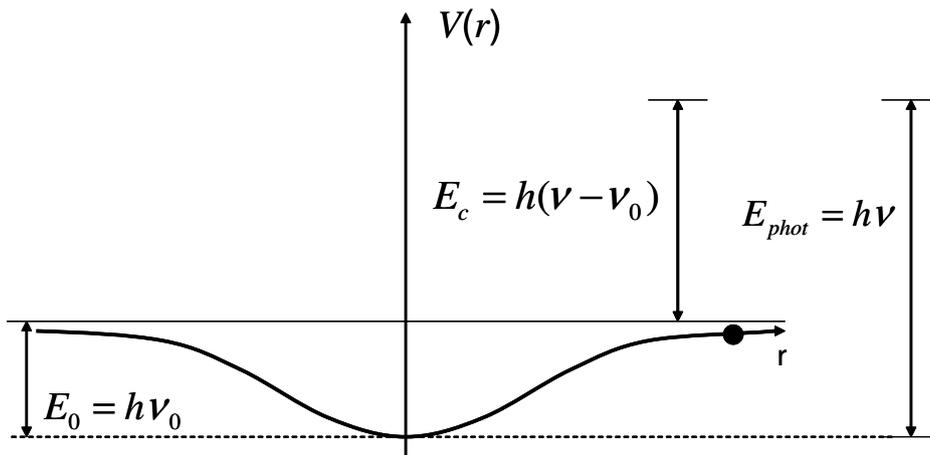


FIGURE 8 – Illustration du processus d'ionisation d'un atome par l'effet photoélectrique.

donc permis de démontrer que le quantum d'énergie est une propriété intrinsèque du rayonnement électromagnétique. L'étape suivante consistait à donner une description formelle de la lumière comme étant composée de particules, et à démontrer l'existence de ces particules.

### 1.2.2 Nature corpusculaire de la lumière

D'après l'électrodynamique, une relation précise existe entre le vecteur de Poynting  $\mathbf{S}$ , qui représente le flux d'énergie du champ par unité de surface, et la densité d'impulsion  $\mathbf{g}$  du champ électromagnétique<sup>2</sup> :

$$\begin{aligned}\mathbf{S} &= \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H} \\ \mathbf{g} &= \frac{1}{4\pi c} \mathbf{E} \times \mathbf{H} \\ &= \frac{\mathbf{S}}{c^2}\end{aligned}$$

2. Voir Jackson 2<sup>nd</sup> éd., Sec. 6.8 et 6.9 : le problème de la détermination de  $\mathbf{g}$  dans un milieu n'est pas trivial et présente toujours des ambiguïtés

Pour un « quantum » de lumière, le flux total d'énergie (c'est-à-dire énergie  $\times$  vitesse ; il ne s'agit pas du flux par unité de surface) est donné par

$$S = \epsilon c = h\nu c$$

et l'impulsion du « quantum » est donc donnée par

$$p = \frac{S}{c^2} = \frac{h\nu}{c}$$

D'après ces considérations, Einstein a proposé l'idée que la lumière ait un caractère de particule (souvenez-vous de la discussion sur la dualité onde-particule). Un « quantum » a donc une énergie  $\epsilon = h\nu$  et une impulsion  $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ . La « particule » de lumière a été baptisée « photon » par G.N. Lewis en 1926.

La nature corpusculaire de la lumière a été démontrée (principalement) par la mesure de l'effet Compton. D'ailleurs, le principe de complémentarité de Bohr est toujours respecté : la lumière ne se comporte pas toujours comme une particule, comme les nombreuses expériences d'interférence et de diffraction (par exemple diffraction de rayons X par des cristaux, M. von Laue, 1912 ; W.L.Bragg et W.H. Bragg, 1913) l'ont démontré.

### 1.2.3 Effet Compton

L'effet Compton a été observé en 1923, en effectuant des mesures de diffusion de rayons X sur des atomes. L'expérience peut par exemple être effectuée avec de la paraffine, riche en hydrogène. Les rayons X ont une longueur d'onde  $\lambda$  dans l'intervalle  $10^{-2}\text{\AA} < \lambda < 10\text{\AA}$  et une énergie  $1.8\text{ keV} < h\nu < 1.8\text{ MeV}$ . Par rapport à ces énergies, les électrons autour des atomes d'hydrogène peuvent être considérés comme libres, puisque leur énergie de liaison (l'énergie nécessaire pour ioniser un atome d'hydrogène) est de 1 Rydberg = 13.5 eV. D'après l'électrodynamique classique, une onde monochromatique (à une longueur d'onde  $\lambda$  fixée) est diffusée de manière élastique, c'est-à-dire que l'onde diffusée a la même énergie  $E = h\nu$ , et donc la même fréquence  $\nu$ , que l'onde incidente. C'est la diffusion Thomson, avec section efficace de diffusion

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{2} (1 + \cos^2\theta)$$

$\theta$  étant l'angle entre la direction diffusée et la direction incidente. Dans l'expérience, par contre, on mesure une fréquence de la lumière diffusée  $\nu'$  inférieure à celle de la lumière incidente  $\nu$ , et qui dépend de l'angle de diffusion  $\theta$ . Pour  $\theta = 0$  on mesure  $\nu'|_{\theta=0} = \nu$ .

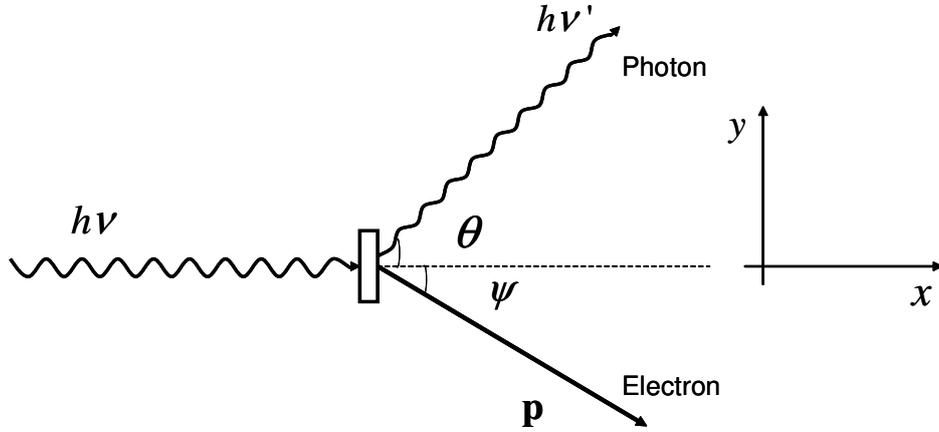


FIGURE 9 – Schéma de l'effet Compton. Une particule de lumière (trait ondulé) subit un choc avec un électron (trait droit).

L'idée est que le « quantum » de lumière, le photon, et l'électron effectuent une collision élastique comme deux points matériels, avec conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement totales. Cette situation est illustrée en figure 9. Les lois de conservation s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 h\nu &= h\nu' + \frac{p^2}{2m} && \text{conservation de l'énergie} \\
 \frac{h\nu}{c} &= \frac{h\nu'}{c} \cos \theta + p \cos \psi && \text{quantité de mouvement selon } \hat{x} \\
 0 &= \frac{h\nu'}{c} \sin \theta - p \sin \psi && \text{quantité de mouvement selon } \hat{y}
 \end{aligned}$$

Éliminons les variables  $\psi$  et  $p$  (l'électron n'étant pas observé dans l'expérience).

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c} \cos \theta\right)^2 &= p^2 \\
 &= 2mh(\nu - \nu')
 \end{aligned}$$

d'où

$$(\nu - \nu')^2 + 2\nu\nu'(1 - \cos \theta) = \frac{2mc^2}{h} (\nu - \nu')$$

Nous pouvons nous restreindre à des petits  $\theta$  pour lesquels  $\nu \sim \nu'$  et donc  $(\nu - \nu')^2$  peut être négligé par rapport à  $(\nu - \nu')$ . Nous trouvons

$$2(1 - \cos \theta) = \frac{2mc}{h} \left(\frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu}\right)$$

donc

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$

qui est la relation de Compton. Elle reproduit très bien le résultat expérimental. La quantité

$$\lambda_c = \frac{h}{mc}$$

est dite longueur d'onde de Compton. Pour l'électron  $\lambda_c \simeq 0.02 \text{ \AA}$ . C'est donc un très petit effet. Pour de la lumière visible  $\lambda \simeq 4000 \text{ \AA}$  et cet effet serait négligeable. C'est pourquoi on a utilisé des rayons X avec  $\lambda \simeq 10^{-2} \text{ \AA}$ . L'expérience a été effectuée également avec des rayons  $\gamma$  ( $\lambda \simeq 10^{-6} \div 10^{-2} \text{ \AA}$ ) sur des protons ( $m_p \sim 2000m_e$ ). Il est important de remarquer que, pour ce calcul, nous avons utilisé la mécanique non relativiste. Il est simple de vérifier que, à l'aide de la relativité restreinte, la relation de Compton est valable sans approximation pour toutes valeurs de  $\theta$ .

#### 1.2.4 De Broglie et la nature ondulatoire de la matière

Parallèlement aux études sur la nature corpusculaire de la lumière, l'autre aspect de la dualité onde-corpuscule, c'est-à-dire la nature ondulatoire de la matière, faisait l'objet des premières études. Louis de Broglie en particulier, a été le premier à proposer l'idée qu'une particule puisse être caractérisée par une longueur d'onde et par une fréquence. De Broglie avait été inspiré par l'analogie profonde entre les lois de l'optique géométrique et le principe de moindre action en mécanique analytique. Nous verrons plus tard comment ce lien permet non seulement d'attribuer une longueur d'onde à une particule, mais aussi de déduire l'équation de base de la mécanique quantique : l'équation de Schrödinger (Ce lien était connu d'après les travaux d'Hamilton depuis presque un siècle, mais restait tout de même un lien formel, sans aucune interprétation physique).

Stimulé par cette idée et par les développements récents de la physique quantique, en 1923 de Broglie a avancé l'hypothèse qu'une particule puisse être reliée à une onde, sans toutefois donner d'interprétation physique au phénomène ondulatoire. Il avait remarqué qu'en relativité restreinte, le quadrivecteur énergie-quantité de mouvement

$$\left( \mathbf{p}, \frac{iE}{c} \right) = m_0 \gamma (\mathbf{v}, ic)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad m_0 = \text{masse de la particule}$$

obéit aux mêmes lois de transformation que le quadrivecteur

$$\left( \mathbf{k}, \frac{i\omega}{c} \right), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu$$

qui définit une onde plane  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$  sous changement de référentiel inertiel (transformation de Lorentz). On peut montrer cela simplement par la remarque qu'un produit scalaire de deux quadrivecteurs est invariant sous une transformation de Lorentz. En particulier, le produit

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \left( \mathbf{k}, \frac{i\omega}{c} \right) \cdot (\mathbf{r}, it)$$

est invariant. Par analogie avec les relations d'Einstein, de Broglie a donc posé que

$$\left( \mathbf{p}, \frac{iE}{c} \right) \propto \left( \mathbf{k}, \frac{i\omega}{c} \right)$$

Ensuite, par analogie avec la relation, valable pour la lumière,  $E = h\nu = \hbar\omega$  ( $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ), de Broglie a proposé que la constante de proportionnalité soit  $\hbar$ . On en déduit pour une particule

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

l'idée de de Broglie suggère donc l'association d'une longueur d'onde

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

et d'une fréquence

$$\nu = \frac{E}{h}$$

à une particule de quantité de mouvement  $p$  et d'énergie  $E$ .

Sans donner d'interprétation, de Broglie suggère que les particules devraient montrer le phénomène de la diffraction, comme pour les ondes. L'expérience cruciale a été menée par Davisson et Germer aux Bell Laboratories, en 1927-28. Des électrons ont été envoyés sur une surface cristalline. Pour observer le phénomène de la diffraction il est nécessaire que la longueur d'onde  $\lambda$  soit comparable à la taille caractéristique de la structure qui produit la diffraction, dans notre cas la maille du cristal  $a \simeq 1 \div 2 \text{ \AA}$ . Si on accélère un

électron à travers une différence de potentiel  $V$ , sa quantité de mouvement sera donnée par  $p = \sqrt{2meV}$  et

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \frac{12\text{\AA}}{\sqrt{V/\text{Volt}}} \quad \text{pour un électron}$$

Il suffit donc une différence de potentiel de quelques Volts pour observer une figure de diffraction. Il est intéressant de remarquer que pour un électron la vitesse de phase (vitesse de propagation de la phase de l'onde) est donnée par

$$kx - \omega t = cte$$

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\omega}{k} = \nu\lambda = \frac{E}{p} \\ &= \frac{m_0\gamma c^2}{m_0\gamma v} = \frac{c^2}{v} > c \end{aligned}$$

La vitesse de phase est donc une quantité inappropriée à représenter la vitesse  $v$  de la particule. La vitesse de groupe est par contre définie, pour une onde, selon

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$$

mais pour une particule relativiste

$$p^2 - \frac{E^2}{c^2} = -m_0^2c^2$$

et

$$\frac{dE}{dp} = \frac{c^2 p}{E} = \frac{c^2 m_0 \gamma v}{m_0 \gamma c^2} = v$$

Donc la vitesse de groupe  $v_g$  est la bonne quantité à associer à la vitesse de la particule  $v$ . Nous verrons par la suite quelle est l'interprétation physique de la vitesse de groupe en terme de vitesse de propagation d'un paquet d'onde.

## 2 La mécanique ondulatoire

Louis de Broglie avait introduit l'idée du comportement ondulatoire de la matière. Il avait associé à une particule libre une longueur d'onde et une fréquence données par

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}, \quad (1)$$

Cette idée avait reçu plusieurs confirmations expérimentales très claires, notamment avec les expériences de diffraction d'électrons par des réseaux cristallins. Il reste cependant à répondre à deux questions fondamentales :

- Comment détermine-t-on la forme de cette onde dans le cas le plus général ?
- Quelle est l'interprétation physique de cette onde ?

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la première question, à laquelle Schrödinger a donné une réponse en 1926 en proposant sa célèbre équation. Par la suite, nous allons brièvement reparcourir les étapes conceptuelles qui ont mené Schrödinger à cette découverte.

### 2.1 L'analogie entre la mécanique et l'optique

Commençons par un petit rappel de mécanique analytique. Considérons une particule décrite à l'aide des variables canoniques  $p$  et  $q$ . Son mouvement est régi par l'Hamiltonien  $H(p, q, t)$ . En particulier, la loi du mouvement est déterminée par les équations de Hamilton-Jacobi

$$H\left(q, p = \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (2)$$

La fonction  $S = S(q, t)$  n'est rien d'autre que l'action

$$S = \int_0^t L(q, \dot{q}, t) dt \quad (3)$$

avec le Lagrangien  $L$  défini par

$$L(q, \dot{q}, t) = p\dot{q} - H(p, q, t). \quad (4)$$

Une fois résolue l'équation de Hamilton-Jacobi, la fonction  $S$  permet de déduire les équations du mouvement par une transformation canonique faisant intervenir les constantes du mouvement<sup>3</sup>. Pour un Hamiltonien qui ne

---

3. Pour les détails, il est utile de réviser les notes du cours de mécanique analytique par le Prof. De Los Rios (<http://itp.epfl.ch/page41881.html>)

dépend pas explicitement du temps, l'énergie est une constante du mouvement et  $H = E$ . Dans ce cas, on peut montrer que l'équation de Hamilton-Jacobi s'écrit comme

$$H\left(q, p = \frac{\partial S_0}{\partial q}, t\right) - E = 0, \quad (5)$$

où  $S = S_0 - Et$ . Pour une particule dans un potentiel  $V(q)$ , l'Hamiltonien est donné simplement par

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (6)$$

et l'équation de Hamilton-Jacobi dévient

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dq}\right)^2 + V(q) - E = 0. \quad (7)$$

En trois dimensions nous pouvons facilement généraliser cette équation en remplaçant la dérivée par le gradient

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(q) - E = 0. \quad (8)$$

Nous allons maintenant passer au problème de l'électrodynamique. En l'absence de charges et de courants externes, dans un milieu d'indice de réfraction  $n(\mathbf{r})$  dépendant de la position  $\mathbf{r}$ , les composantes du champs électrique sont décrites par l'équation d'onde

$$\left(\nabla^2 - \frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) E(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (9)$$

Pour une onde monochromatique de fréquence  $\nu = \omega/2\pi$  nous pouvons poser  $E(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r}) \exp(i\omega t)$  et l'équation devient

$$\left(\nabla^2 - \frac{\omega^2 n^2(\mathbf{r})}{c^2}\right) E(\mathbf{r}) = 0. \quad (10)$$

Nous pouvons introduire maintenant des définitions standard

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega n(\mathbf{r})}{c}. \quad (11)$$

Dans le vide, les quantités correspondantes sont données par

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{\omega}{c}. \quad (12)$$

Nous pouvons maintenant écrire l'équation d'onde en utilisant l'expression  $E(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) \exp(ik_0 S(\mathbf{r}))$ , qui définit les fonctions  $A(\mathbf{r})$  et  $S(\mathbf{r})$ . Ces quantités représentent respectivement l'amplitude et la phase (normée par  $k_0^{-1}$ ) de l'onde. En remplaçant cette expression dans l'équation d'onde on obtient deux équations couplées pour  $A$  et  $S$ .

L'idée est maintenant d'introduire l'approximation de très courte longueur d'onde  $\lambda_0 \rightarrow 0$  ou  $k_0 \rightarrow \infty$ . Physiquement, cela correspond à la limite de l'optique géométrique. La lumière est décrite donc par des rayons qui se propagent selon des trajectoire déterminées par le principe de Fermat. Ce principe affirme que la trajectoire d'un rayon de lumière entre deux points  $A$  et  $B$  est celle qui minimise le temps du parcours. En effet, dans la limite  $k_0 \rightarrow \infty$ , on peut vérifier que l'équation d'onde se réduit à

$$(\nabla S(\mathbf{r}))^2 - n^2(\mathbf{r}) = 0. \quad (13)$$

Cette équation est dite « éikonale ». Puisque  $S(\mathbf{r})$  représente la phase de l'onde, les surfaces définies par  $S(\mathbf{r}) = \text{cte}$  sont les fronts de l'onde. Le gradient  $\nabla S(\mathbf{r})$  est orthogonal à cette surface et définit donc la direction de propagation du rayon de lumière. L'éikonale décrit donc, dans la limite de courte longueur d'onde, la trajectoire des rayons de lumière.

L'intuition géniale de Schrödinger était de remarquer l'analogie entre l'éikonale (13) et l'équation de Hamilton-Jacobi (8). Il s'agit de la même équation si on associe l'action  $S$  en (8) à la phase  $S$  en (13) et on définit  $n(\mathbf{r}) = \sqrt{E - V(\mathbf{r})}$ .

Schrödinger a réfléchi à la signification physique de l'éikonale : il s'agit de la limite où la propagation de la lumière peut être décrite par des rayons avec des trajectoires bien définies. Pour une particule, la description du mouvement par une trajectoire correspond à la mécanique classique. Schrödinger remarque donc que l'équations de la mécanique classique et celle des ondes électromagnétiques dans la limite de l'optique géométrique sont identiques. Mais la description la plus générale du champ électromagnétique est donnée par l'équation d'onde. Quelle serait donc une équation d'onde pour la mécanique, telle que l'équation de Hamilton-Jacobi (8) en découle dans la limite de courte longueur d'onde ? A l'aide du calcul des variations, et en tenant compte de la relation de de Broglie  $p = h/\lambda = \hbar k$ , il est immédiat de montrer que cette équation est donnée par

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (14)$$

où  $\psi(\mathbf{r})$  est dite *fonction d'onde* de la particule. C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Cette démarche nous suggère donc que la mécanique

classique est à la mécanique quantique ce que l'optique géométrique est à l'optique ondulatoire.

Avant de continuer, une remarque s'impose. Nous avons illustré la démarche qui a été historiquement suivie par Schrödinger pour aboutir à son équation. Il ne faut pas toutefois penser que cette démarche est une démonstration de l'équation de Schrödinger, puisque elle est basée simplement sur une analogie conceptuelle. Nous verrons par la suite que la mécanique quantique est une théorie basée sur un ensemble d'axiomes, et que un de ces axiomes est exactement l'équation de Schrödinger dans sa forme dépendante du temps que nous étudierons par la suite.

## 2.2 L'équation de Schrödinger

L'équation que nous avons déduite est l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (15)$$

Nous pouvons la réécrire symboliquement comme

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (16)$$

où  $H$  est un opérateur qui agit sur une fonction  $\psi(\mathbf{r})$ , défini par la partie gauche de 15. Ce n'est pas par hasard que nous appelons cet opérateur  $H$ . Considérons en effet l'Hamiltonien classique d'une particule dans un potentiel  $V(\mathbf{r})$

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

Nous pouvons remplacer formellement les composantes du vecteur quantité de mouvement  $\mathbf{p}$  (qui sont des nombres réels) par des opérateurs différentiels, de la façon suivante

$$p_x \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

En remplaçant ces opérateurs dans l'expression de l'Hamiltonien  $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ , nous obtenons

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

Ce qui implique l'équation de Schrödinger 15 à partir de 16. Pour l'instant nous ne devons pas essayer de comprendre le passage qui consiste à remplacer une variable classique par un opérateur. Considérons-le comme un passage purement formel. Nous verrons par la suite qu'il est à la base de la

théorie formelle de la mécanique quantique, et il est connu sous le nom de « quantification canonique ».

L'équation (15) ou (16) est une équation différentielle aux dérivées partielles en  $R^3$ . Elle est linéaire. Mathématiquement, elle peut être résolue en imposant des conditions au bord pour la fonction  $\psi(\mathbf{r})$ . Une fois données les conditions au bord, cette équation possède des solutions seulement pour certaines « valeurs propres » du « paramètre »  $E$  (elles pourraient être en nombre infini). Nous appelons ces valeurs propres  $E_n$  et les solutions correspondantes  $\psi_n(\mathbf{r})$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Nous pouvons donc réécrire le problème comme

$$H\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$$

En mathématiques, le problème aux valeurs propres est très bien connu. Schrödinger a suggéré que les valeurs propres  $E_n$ , correspondant aux différentes solutions  $\psi_n(\mathbf{r})$ , sont les valeurs quantifiées que l'énergie du système peut prendre. Les contraintes imposées par les conditions au bord expliquent pourquoi les  $E_n$  sont les seules valeurs possibles que l'énergie peut prendre.

Comme nous le verrons par la suite, l'équation de Schrödinger appliquée au problème de l'atome d'hydrogène, explique très bien les valeurs des énergies qui étaient mesurées par la spectroscopie optique, ce qui était un premier grand succès de cette théorie.

L'équation (15) décrit un système stationnaire pour lequel la fonction d'onde ne dépend pas du temps. Pour pouvoir décrire un système non stationnaire (par exemple une particule qui fait un choc et est diffusée) il faut généraliser l'équation de Schrödinger. La théorie de de Broglie nous vient encore une fois en aide. Une particule libre est décrite par cette théorie comme une onde plane :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$$

avec

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Cette équation est solution de l'équation de Schrödinger 15 avec  $V(\mathbf{r}) = 0$  et  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Vérifions-le

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\ &= \frac{p^2}{2m} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\ &= E e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \end{aligned}$$

Pour cette fonction d'onde, la forme la plus simple d'équation différentielle dépendante du temps, qui implique 15 et soit en accord avec la relation de De Broglie  $E = \hbar\omega = h\nu$  est

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t) \quad (17)$$

où nous avons utilisé la notation de l'opérateur Hamiltonien introduite en 16. Nous pouvons facilement vérifier que l'équation 17 implique l'équation aux valeurs propres 15 pour la particule libre. Plus en général, si  $\psi_n(\mathbf{r})$  est une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps 15 avec valeur propre  $E_n$ , la solution correspondante de l'équation 17 est

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (18)$$

(vérifier que 18 satisfait l'équation 17)

Il ne faut pas se laisser décourager par l'introduction de deux différentes fonctions d'onde,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  et  $\psi(\mathbf{r})$ . Nous verrons par la suite que les propriétés physiques d'un système sont déterminées par le module carré de la fonction d'onde. Pour une solution propre 18 de l'équation de Schrödinger, on voit que

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$$

Cette fonction d'onde décrit un état du système dit « état propre », ou « état stationnaire ». Comme nous le verrons, l'équation de Schrödinger dépendante du temps 17 admet des solutions non stationnaires, qui ne sont pas de la forme 18, et qui ne satisfont donc pas l'équation de Schrödinger indépendante du temps 15. C'est donc l'équation 17 qui constitue la description la plus générale d'un système physique. Nous allons maintenant discuter la linéarité de la mécanique quantique et le principe de superposition. Ces deux concepts nous permettront de mieux comprendre le lien entre l'équation 15 et l'équation 18.

## 2.3 L'équation de Schrödinger dépendante du temps

L'équation 15 décrit un système stationnaire pour lequel la fonction d'onde ne dépend pas du temps. Pour pouvoir décrire un système non stationnaire (par exemple une particule qui fait un choc et est diffusée) il faut généraliser l'équation de Schrödinger. La théorie de De Broglie nous vient encore une fois en aide. Une particule libre est décrite par cette théorie comme une onde plane :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

avec

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Cette équation est solution de l'équation de Schrödinger 15 avec  $V(\mathbf{r}) = 0$  et  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Vérifions-le

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\ &= \frac{p^2}{2m} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\ &= E e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \end{aligned}$$

Pour cette fonction d'onde, la forme la plus simple d'équation différentielle dépendante du temps, qui implique 15 et soit en accord avec la relation de De Broglie  $E = \hbar\omega = h\nu$  est

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t) \quad (19)$$

où nous avons utilisé la notation de l'opérateur Hamiltonien introduite en 16. Nous pouvons facilement vérifier que l'équation 19 implique l'équation aux valeurs propres 15 pour la particule libre. Plus en général, si  $\psi_n(\mathbf{r})$  est une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps 15 avec valeur propre  $E_n$ , la solution correspondante de l'équation 19 est

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (20)$$

(vérifier que 20 satisfait l'équation 19)

Il ne faut pas se laisser décourager par l'introduction de deux différentes fonctions d'onde,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  et  $\psi(\mathbf{r})$ . Nous verrons par la suite que les propriétés physiques d'un système sont déterminées par le module carré de la fonction d'onde. Pour une solution propre 20 de l'équation de Schrödinger, on voit que

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$$

Cette fonction d'onde décrit un état du système dit « état propre », ou « état stationnaire ». Comme nous le verrons maintenant, l'équation de Schrödinger dépendante du temps 19 admet des solutions non stationnaires, qui ne sont pas de la forme 20, et qui ne satisfont donc pas l'équation de Schrödinger indépendante du temps 15. C'est donc l'équation 20 qui constitue la description la plus générale d'un système physique. Nous allons maintenant discuter la linéarité de la mécanique quantique et le principe de superposition. Ces

deux concepts nous permettront de mieux comprendre le lien entre l'équation 15 et l'équation 19.

Considérons deux solutions distinctes de l'équation 19  $\psi_1(\mathbf{r}, t)$  et  $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ . L'équation 19 est linéaire dans le sens que pour deux constantes arbitraires  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ , la combinaison linéaire

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

est aussi une solution de 19. En particulier :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \\ &= c_1 i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + c_2 i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} H\psi &= H(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \\ &= c_1 H\psi_1 + c_2 H\psi_2 \end{aligned}$$

Il s'ensuit que, si 19 est valable pour  $\psi_1$  et  $\psi_2$ , alors elle est valable aussi pour  $\psi$ . D'un point de vue physique, si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont deux « états » possibles d'un système, alors  $\psi(\mathbf{r}, t) = c_1\psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\psi_2(\mathbf{r}, t)$  l'est aussi. C'est le principe de superposition. L'équation 15 aux valeurs propres n'a pas toujours la même propriété. Si  $\psi_1$  est une solution propre avec valeur propre  $E_2$ , alors la fonction  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$  n'est manifestement pas une solution propre de 15.

Nous comprenons donc que les états dits « propres » ou « stationnaires » jouent un rôle spécial. En particulier, pour un état stationnaire, la fonction d'onde dépendante du temps

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

est telle que son module carré  $|\psi_n(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$  reste identiquement le même au cours du temps (d'où le nom d'état stationnaire). Nous pouvons construire une solution générale de l'équation de Schrödinger dépendante du temps 19 à partir de solutions propres de 15 :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(\mathbf{r}), \quad c_n \in \mathbb{C}$$

On vérifie facilement que cette fonction est solution de 19 si on suppose que pour chaque  $n$ ,  $H\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$ . Pour cette solution nous avons que le module carré  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  évolue au cours du temps. C'est un état non stationnaire du système.

La linéarité et le principe de superposition ont une signification très importante pour la physique. Revenons à l'expérience de pensée de Young avec des électrons. Nous avons vu que, si la probabilité  $P(x)dx$  pour la particule d'arriver à un point entre  $x$  et  $x + dx$  peut s'exprimer comme le module carré d'une fonction,  $P(x)dx = |\psi(x, t)|^2 dx$ , alors l'interférence et la relation entre  $P_1(x)$ ,  $P_2(x)$  et  $P_{12}(x)$  pourraient être facilement expliquées, **pourvu** que le principe de superposition soit valable pour la fonction  $\psi(x)$ . Nous devons en effet introduire l'hypothèse que :

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

c'est-à-dire que l'effet combiné des fentes 1 et 2 ouvertes s'obtient en faisant la somme des fonctions d'onde  $\psi(x)$  (et pas des probabilités  $P(x)$ ).

Nous verrons que la linéarité de la théorie est un des postulats de la mécanique quantique formelle. Par la suite, nous allons appliquer l'idée de superposition aux états d'une particule dans l'espace vide. nous verrons qu'à partir de l'état stationnaire de l'onde plane

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

nous pouvons construire un état non stationnaire dit « paquet d'onde », et nous allons étudier ses propriétés.

Comme dernière remarque de ce paragraphe, nous aimerions souligner un fait important. En général, la quantité

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) d^3r$$

ne dépend pas du temps. En effet

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d^3r \psi^* \psi &= \int d^3r \left[ \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi + \psi^* \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \int d^3r (H\psi)^* \psi - \int d^3r \psi^* H\psi \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \int d^3r \psi^* H^\dagger \psi - \int d^3r \psi^* H\psi \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \int d^3r \psi^* H\psi - \int d^3r \psi^* H\psi \right] = 0 \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait suivants. Si  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$  alors le complexe conjugué de cette relation implique

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (H\psi)^* .$$

Le conjugué hermitique  $H^\dagger$  d'un opérateur  $H$  est défini par

$$\int d^3r (H\psi)^*\phi = \int d^3r \psi^* H^\dagger\phi \quad \forall \psi, \phi.$$

L'Hamiltonien est un opérateur « autoadjoint » (ou « hermitique »), c'est-à-dire :

$$H^\dagger = H.$$

L'idée donc, que le module carré de la fonction d'onde représente une probabilité (par exemple, qu'une particule se trouve à un endroit  $\mathbf{r}$ ), se renforce suite à cette remarque : nous avons vu en effet que la somme des probabilités étendue à tout l'espace est conservée. Nous verrons dans la théorie axiomatique de la mécanique quantique, que la notion de probabilité et son lien avec la fonction d'onde sont des postulats de la théorie. La quantité

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$$

est la probabilité que la particule se trouve dans un volume  $d^3r$  autour du point  $\mathbf{r}$ , au temps  $t$ .

Revenons maintenant à l'onde de de Broglie.

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \\ \hbar\omega_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \end{aligned}$$

où nous avons introduit un facteur constant  $1/(2\pi)^{3/2}$  pour des raisons qui deviendront claires par la suite. Cette fonction d'onde n'est pas à carré sommable

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \infty$$

et semblerait ne pas pouvoir décrire une densité de probabilité, pour laquelle nous souhaitons que  $\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1$  (somme des probabilités = 1). Nous verrons que ceci ne constitue pas un problème et que nous pouvons généraliser le concept de « normalisation » à des fonctions qui ne sont pas à carré sommable, par une approche mathématiquement appropriée. Pour l'instant, nous allons utiliser le principe de superposition de manière plus générale, pour construire des fonctions d'onde arbitraires à partir de la fonction d'onde de De Broglie.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k A(\mathbf{k}) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \quad (21)$$

L'intégrale en  $\mathbf{k}$  est interprétée de la façon suivante. L'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est une superposition linéaire d'ondes avec quantité de mouvement  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  et énergie

$E = \hbar\omega_{\mathbf{k}}$  donnés. Pour cette raison, l'expression 21 s'appelle « décomposition spectrale » de la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$ . Nous pouvons maintenant étudier sous quelle condition  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est normalisée :

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &= \int d^3r \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3k' A^*(\mathbf{k})A(\mathbf{k}') e^{i[(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r} - (\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})t]} \end{aligned}$$

Utilisons (voir Série 3)

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$$

Après avoir inversé l'ordre des intégrales en  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{k}$  nous avons

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3k \int d^3k' A^*(\mathbf{k})A(\mathbf{k}') e^{-i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})t} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &= \int d^3k |A(k)|^2 \end{aligned}$$

Donc, pour que  $\psi(\mathbf{r}, t)$  soit normée, il faut que

$$\int d^3k |A(k)|^2 = 1$$

La quantité  $|A(k)|^2$  est souvent appelée « densité spectrale ». Nous pouvons l'interpréter de la façon suivante :  $|A(k)|^2 d^3k$  est la probabilité que la particule décrite par la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  ait une quantité de mouvement comprise dans un volume infinitésimal  $\hbar^3 d^3k$  autour de la valeur  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ .

### 3 La mécanique matricielle de Heisenberg

Nous avons vu comment Schrödinger était arrivé à déduire l'équation d'onde de la mécanique quantique en 1926, en réfléchissant sur l'analogie entre l'équation Hamilton-Jacobi en mécanique classique et la limite de l'optique géométrique des équations de Maxwell. L'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel  $V(\mathbf{r})$  s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t)$$

Nous avons déjà remarqué que cette équation peut être écrite comme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

où  $\hat{H}$  peut être considéré comme un opérateur qui agit sur l'espace de Hilbert des fonctions  $\psi(\mathbf{r})$ . Nous avons appelé cet opérateur  $\hat{H}$  puisqu'on peut établir un lien avec l'Hamiltonien du système

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

pourvu que l'on définisse un opérateur  $\hat{\mathbf{p}}$  correspondant à la quantité de mouvement  $\mathbf{p}$  de la manière suivante

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &\equiv -i\hbar \nabla \\ \hat{\mathbf{p}}_\alpha &\equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \quad \alpha = x, y, z \end{aligned}$$

Pour compléter ce passage formel, nous pouvons aussi définir l'opérateur  $\hat{\mathbf{r}}$  qui agit comme un opérateur « de multiplication » sur une fonction  $\psi(\mathbf{r})$  :

$$\hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{r} \psi(\mathbf{r})$$

De telle manière, à chaque fonction de  $\mathbf{r}$ , comme par exemple  $V(\mathbf{r})$ , est associé un opérateur  $V(\hat{\mathbf{r}})$  de multiplication

$$V(\hat{\mathbf{r}}) \psi(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

Avec ces définitions, il est clair que

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) &= \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Ces considérations avaient amené Schrödinger à établir une correspondance précise entre sa théorie de la mécanique ondulatoire et la théorie de la « mécanique matricielle ». Cette dernière avait été développée par Heisenberg en 1925 et était l'autre théorie formelle de la physique quantique. L'« unification » des théories de Schrödinger et de Heisenberg a donné naissance à la mécanique quantique moderne. Heisenberg avait déduit sa théorie en 1925, en même temps que Schrödinger. Il avait été inspiré par l'observation expérimentale des spectres d'énergie des atomes, en particulier par le fait que les raies spectrales suivaient toujours le critère

$$\nu_{mn} = T_m - T_n$$

toutes les fréquences mesurées  $\nu_{mn}$  sont données par la différence entre deux valeurs prises d'une série de valeurs discrètes  $T_m$   $m = 1, 2, 3, \dots$

Pour expliquer cela, Heisenberg avait introduit l'idée que les quantités physiques sont représentées par des matrices hermitiques (une matrice  $A$  est dite hermitique si  $(A_{mn})^* = A_{mn}$ ). Les valeurs mesurées pour ces quantités sont données par les valeurs propres des matrices correspondantes. La propriété de matrice hermitique nous assure que ces valeurs propres sont réelles et peuvent donc représenter des quantités physiques. Heisenberg avait en particulier postulé que les matrices correspondant aux quantités  $x$  et  $p$  remplissent la règle de commutation

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

avec  $\hat{I}$  matrice identité. Ce postulat est nécessaire pour la raison suivante. L'Hamiltonien  $H$  du système est une fonction de  $p$  et de  $x$ , en général. Par exemple, pour un oscillateur harmonique, nous avons

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

où  $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$  est la fréquence de l'oscillateur.

N'oublions pas qu'en physique classique  $H$  représente l'énergie du système. En tant que quantité physique qui peut être mesurée,  $H$  doit être représentée par une matrice selon la théorie de Heisenberg. Le choix le plus naturel est que

$$\hat{H}(p, x) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

où  $\hat{p}^2 = \hat{p} \cdot \hat{p}$  et  $\hat{x}^2 = \hat{x} \cdot \hat{x}$ , produit au sens des matrices :  $(\hat{A} \cdot \hat{B})_{mn} = \sum_j A_{mj} B_{jn}$ .

Or, pour une particule en général (par exemple dans le vide), les valeurs mesurées de  $p$  et  $x$  peuvent être quelconques. Donc les matrices  $\hat{p}$  et  $\hat{x}$  ont des

valeurs propres correspondant à l'ensemble de tous les nombres réels (nous verrons que cela est possible si on généralise la définition mathématique de matrice en dimension infinie et avec des indices continus)

D'après l'algèbre linéaire, nous savons que si deux opérateurs commutent, alors il existe une transformation unitaire  $U$  qui diagonalise les deux opérateurs simultanément. Supposons que  $[\hat{x}, \hat{p}] = 0$ . Les vecteurs de la base qui diagonalise  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  sont vecteurs propres de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  par définition. Appelons-le  $\phi_{p,x}$ . Nous avons

$$\begin{aligned}\hat{p}\phi_{p,x} &= p\phi_{p,x} \\ \hat{x}\phi_{p,x} &= x\phi_{p,x}\end{aligned}$$

Mais ces vecteurs sont aussi vecteurs propres de  $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$ , qui est une fonction de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$ . Donc

$$\hat{H}\phi_{p,x} = \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \phi_{p,x}$$

Les valeurs propres de  $\hat{H}$  seraient donc toutes les valeurs prévues par la physique classique. Ceci est contraire à l'idée qu'en mécanique quantique seulement des valeurs discrètes de l'énergie sont possibles. Il faut donc que  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  ne commutent pas. Dans la théorie de Heisenberg, le commutateur entre  $\hat{p}$  et  $\hat{x}$  est introduit comme postulat, mais on voit qu'il est en accord avec la théorie de Schrödinger (qui, à son tour, est obtenue à partir de postulats : une théorie de la mécanique quantique déduite seulement à partir de principes premiers n'existe pas).

D'après la relation

$$\hat{x} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{x} = i\hbar \hat{I}$$

s'ensuit que, pour une matrice  $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$  qui est une fonction arbitraire de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$ ,

$$\begin{aligned}-i\hbar \frac{\partial \hat{F}(\hat{x}, \hat{p})}{\partial \hat{p}} &= \hat{F} \cdot \hat{x} - \hat{x} \cdot \hat{F} \\ i\hbar \frac{\partial \hat{F}(\hat{x}, \hat{p})}{\partial \hat{x}} &= \hat{F} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{F}\end{aligned}$$

où la dérivée par rapport à une matrice est définie comme

$$\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial \hat{x}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(\hat{x} + \epsilon \hat{I}) - f(\hat{x})}{\epsilon}$$

en analogie avec la dérivée d'une fonction de variable réelle.

Si nous prenons en particulier  $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{H}$  Hamiltonien du système, nous avons :

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})}{\partial \hat{p}} &= \hat{H} \cdot \hat{x} - \hat{x} \cdot \hat{H} \\ i\hbar \frac{\partial \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})}{\partial \hat{x}} &= \hat{H} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{H} \end{aligned}$$

A ce point il faut se souvenir des équations de Hamilton en mécanique classique, qui expriment la variation temporelle des variables conjuguées  $x$  et  $p$  pour un système Hamiltonien caractérisé par une fonction Hamiltonienne  $H(x, p)$  :

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

Si nous voulons que ces relations soient valables pour les valeurs propres des matrices dans la théorie de Heisenberg alors il faut que

$$\begin{aligned} -i\hbar \dot{\hat{x}} &= \hat{H} \cdot \hat{x} - \hat{x} \cdot \hat{H} \\ -i\hbar \dot{\hat{p}} &= \hat{H} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{H} \end{aligned}$$

Il s'ensuit que pour une matrice arbitraire  $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$  fonction de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{F}(\hat{x}, \hat{p})}{\partial t} = \hat{H} \cdot \hat{F} - \hat{F} \cdot \hat{H}$$

C'est l'équation de Heisenberg, qui donne l'évolution temporelle des matrices qui représentent des quantités physiques, en fonction de l'Hamiltonien du système.

### 3.1 Lien avec la théorie de Schrödinger

Le lien de la théorie de Schrödinger avec la mécanique matricielle de Heisenberg s'établit en considérant l'espace vectoriel de Hilbert formé par les fonctions d'onde :

$$\mathcal{H} = \left\{ \psi(\mathbf{r}); \quad \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 < \infty \right\}$$

On peut considérer une base orthonormée, complète  $\{U_m(\mathbf{r})\}$   $m = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} \int d^3r U_m^*(\mathbf{r}) U_n(\mathbf{r}) &= \delta_{mn} \\ \sum_m U_m^*(\mathbf{r}) U_m(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

avec le produit scalaire défini comme

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})$$

A un opérateur Hermitique  $\hat{A}$  nous pouvons associer une matrice selon

$$\begin{aligned} A_{mn} &\equiv \langle U_m | \hat{A} U_n \rangle \\ &= \int d^3r U_m^*(\mathbf{r}) \hat{A} U_n(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

De cette manière, on peut facilement montrer que les propriétés suivantes sont remplies

$$\begin{aligned} (A + B)_{mn} &= A_{mn} + B_{mn} \\ (AB)_{mn} &= \sum_j A_{mj} B_{jn} \end{aligned}$$

Il nous reste à montrer que  $\hat{\mathbf{r}}$  et  $\hat{\mathbf{p}}$  sont opérateurs hermitiques. Montrons-le pour une composante. Pour  $\hat{x}$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{x}^\dagger \psi \rangle &= \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle \\ &= \int d^3r (x \phi(\mathbf{r}))^* \psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) \\ &= \langle \phi | \hat{x} \psi \rangle \end{aligned}$$

Pour  $\hat{p}_x$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{p}_x^\dagger \psi \rangle &= \langle \hat{p}_x \phi | \psi \rangle \\ &= i\hbar \int d^3r \frac{\partial \phi^*(\mathbf{r})}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Intégrons par parties

$$\begin{aligned} i\hbar \int d^3r \frac{\partial \phi^*(\mathbf{r})}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) &= -i\hbar \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} \\ &\quad + \underbrace{i\hbar \phi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})}_0 \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= \langle \phi | \hat{p}_x \psi \rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que des fonctions à carré sommable s'annulent à l'infini. Finalement nous pouvons montrer que  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{I}$  :

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}, \hat{p}_x]\phi(\mathbf{r}) &= \hat{x}\hat{p}_x\phi(\mathbf{r}) - \hat{p}_x\hat{x}\phi(\mathbf{r}) \\
 &= \hat{x}(-i\hbar)\frac{\partial\phi}{\partial x} - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}(x\phi) \\
 &= -i\hbar x\frac{\partial\phi}{\partial x} + i\hbar\left(x\frac{\partial\phi}{\partial x} + \phi\right) \\
 &= i\hbar\phi \quad \forall\phi \in \mathcal{H}
 \end{aligned}$$

Le lien entre les théories de Schrödinger et Heisenberg est donc établi. Nous verrons par la suite que la procédure formelle de représenter des quantités physiques observables par des opérateurs hermitiques s'appelle « quantification canonique ».

Nous pouvons donc récapituler l'essentiel de la théorie de Heisenberg. Les valeurs « observables » (mesurables) d'une quantité physique correspondent aux valeurs propres d'une matrice (d'un opérateur linéaire qui agit sur un espace vectoriel, typiquement de dimension infinie) qui caractérise la quantité physique en question.

Exemples :

$\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  opérateur de multiplication sur l'espace des fonctions à carré sommable.

$$\begin{aligned}
 \hat{x}\psi(\mathbf{r}) &= x\psi(\mathbf{r}) \\
 \hat{y}\psi(\mathbf{r}) &= y\psi(\mathbf{r}) \\
 \hat{z}\psi(\mathbf{r}) &= z\psi(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

opérateur quantité de mouvement sur le même espace.

Il est clair qu'une fonction  $\psi(\mathbf{r})$  est vecteur propre de  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  avec valeur propre  $x, y, z$  par définition. La transformée de Fourier

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \psi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

est vecteur propre de  $\hat{\mathbf{p}}$  avec valeur propres  $\hbar\mathbf{k}$  : la relation

$$\hat{\mathbf{p}}\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}\tilde{\psi}(\mathbf{k})$$

découle des propriétés de la transformée de Fourier.

### 3.2 Principe d'incertitude de Heisenberg

Définissons les écarts-type de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  comme

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &\equiv \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 \\ (\Delta p)^2 &\equiv \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2\end{aligned}$$

Il s'agit en effet des écarts-type des valeurs possibles d'une mesure de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$ . Le principe d'incertitude de Heisenberg dit que, pour un état normé  $|\phi\rangle$  :

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (22)$$

**Preuve :**

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

Définissons

$$\begin{aligned}\hat{x}_0 &\equiv \hat{x} - \langle \phi | \hat{x} | \phi \rangle \hat{I} \\ &= \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle \hat{I} \\ \hat{p}_0 &\equiv \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle \hat{I}\end{aligned}$$

Nous avons aussi  $[\hat{x}_0, \hat{p}_0] = i\hbar$ . De plus,  $\hat{x}_0$  et  $\hat{p}_0$  sont hermitiques. Considérons l'état

$$(\hat{x}_0 + i\lambda\hat{p}_0)|\phi\rangle \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Sa norme au carré doit être positive

$$\langle \phi | (\hat{x}_0 - i\lambda\hat{p}_0)(\hat{x}_0 + i\lambda\hat{p}_0) | \phi \rangle \geq 0$$

Mais

$$\begin{aligned}&\langle \phi | (\hat{x}_0 - i\lambda\hat{p}_0)(\hat{x}_0 + i\lambda\hat{p}_0) | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{x}_0^2 | \phi \rangle + \lambda^2 \langle \phi | \hat{p}_0^2 | \phi \rangle - i\lambda \langle \phi | \hat{p}_0 \hat{x}_0 | \phi \rangle + i\lambda \langle \phi | \hat{x}_0 \hat{p}_0 | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{x}_0^2 | \phi \rangle + \lambda^2 \langle \phi | \hat{p}_0^2 | \phi \rangle + i\lambda \langle \phi | [\hat{x}_0, \hat{p}_0] | \phi \rangle \\ &= \lambda^2 \langle \phi | \hat{p}_0^2 | \phi \rangle - \lambda\hbar + \langle \phi | \hat{x}_0^2 | \phi \rangle \geq 0\end{aligned}$$

C'est un polynôme en  $\lambda$ . Pour qu'il soit toujours positif il faut que son discriminant soit négatif.

$$\begin{aligned}\hbar^2 - 4\langle \phi | \hat{x}_0^2 | \phi \rangle \langle \phi | \hat{p}_0^2 | \phi \rangle &\leq 0 \\ \Rightarrow \langle \hat{x}_0^2 \rangle \langle \hat{p}_0^2 \rangle &\geq \frac{\hbar^2}{4}\end{aligned}$$

mais

$$\langle \hat{x}_0^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = (\Delta x)^2$$

et

$$\langle \hat{p}_0^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = (\Delta p)^2$$

d'où

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation, démontrée pour  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$ , est en effet vraie pour toute paire d'opérateurs hermitiques  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  « conjugués », c'est-à-dire tels que

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \text{cte}$$

Elle nous dit qu'il est impossible de connaître avec une précision arbitraire la position  $x$  et l'impulsion  $p$  d'une particule. Mais  $x$  exprime la trajectoire - caractère de particule - et  $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$  la longueur d'onde - caractère d'onde.

Le principe de Heisenberg est donc une conséquence directe du principe de complémentarité quantique de Bohr.

## 4 L'oscillateur harmonique

Dans ce paragraphe, nous nous proposons de déterminer les solutions stationnaires de l'oscillateur harmonique en une dimension. Il s'agit d'un des problèmes fondamentaux de la mécanique quantique, avec de profondes implications dans la théorie quantique des champs. Nous allons donc le résoudre par deux chemins différents : la solution directe de l'équation de Schrödinger, et l'introduction des opérateurs de « création » et d'« annihilation ».

### 4.1 Solution de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique est donnée par

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (23)$$

Il ne s'agit pas d'une équation linéaire standard car le coefficient de  $\psi$  dépend de  $x$ .

#### 4.1.1 Solution

Pour simplifier, on introduit la notation  $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ , et on pose

$$\begin{aligned} \varphi(q) &= \psi(x) \\ \frac{d\psi}{dx} &= \frac{d\varphi}{dq} \frac{dq}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\varphi}{dq} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\varphi}{dq^2} \end{aligned} \quad (24)$$

L'équation différentielle s'écrit

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\varphi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \frac{\hbar}{m\omega} \varphi(q) = E\varphi(q) \\ \Rightarrow &-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{d^2\varphi}{dq^2} + \frac{1}{2}\omega\hbar q^2 \varphi(q) = E\varphi(q) \\ \Rightarrow &-\frac{d^2\varphi}{dq^2} + q^2 \varphi(q) = \frac{2E}{\hbar\omega} \varphi(q) \end{aligned} \quad (25)$$

$$\text{soit } \frac{d^2\varphi}{dq^2} + (\lambda - q^2) \varphi(q) = 0$$

où on a posé  $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ . Lorsque  $q \rightarrow \infty$ , l'équation différentielle est approximativement donnée par

$$\begin{aligned}\frac{d^2\varphi}{dq^2} &\simeq q^2\varphi(q) \\ \varphi(q) &\propto e^{\pm\frac{1}{2}q^2}\end{aligned}\tag{26}$$

A ce stade, Schrödinger émet l'hypothèse que la solution doit être bornée et que seul le comportement asymptotique  $e^{-\frac{1}{2}q^2}$  est acceptable. Cherchons donc la solution sous la forme

$$\begin{aligned}\varphi(q) &= H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \\ \frac{d\varphi}{dq} &= \frac{dH}{dq} e^{-\frac{1}{2}q^2} + H(q) (-q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \\ \frac{d^2\varphi}{dq^2} &= \frac{d^2H}{dq^2} e^{-\frac{1}{2}q^2} + 2\frac{dH}{dq} (-q) e^{-\frac{1}{2}q^2} - H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} + q^2 H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2}\end{aligned}\tag{27}$$

L'équation différentielle en  $H$  s'écrit donc :

$$\frac{d^2H}{dq^2} - 2q\frac{dH}{dq} + (\lambda - 1)H = 0\tag{28}$$

Cherchons la solution sous la forme d'un développement en série :

$$H(q) = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j q^j\tag{29}$$

Il vient :

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dq} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) q^j \\ \frac{d^2H}{dq^2} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_{j+1} (j+1) j q^{j-1} = \sum_{j=0}^{+\infty} a_{j+2} (j+2) (j+1) q^j \\ q\frac{dH}{dq} &= \sum_{j=1}^{+\infty} a_j j q^j = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j j q^j \\ \Rightarrow \sum_{j=0}^{+\infty} [a_{j+2} (j+2) (j+1) - 2a_j j + (\lambda - 1) a_j] q^j &= 0 \\ \Rightarrow a_{j+2} &= a_j \frac{2j + (1 - \lambda)}{(j+2)(j+1)}\end{aligned}\tag{30}$$

Supposons  $2j + 1 - \lambda \neq 0 \forall j$ , et étudions le comportement asymptotique des solutions. Comme  $V(q) \propto q^2$  est pair, on peut chercher des solutions paires ou impaires.

Solutions paires :

$$\begin{aligned}
 H(q) &= \sum_j a_{2j} q^{2j} \\
 \text{Mais } a_{2j} &= a_{2j-2} \frac{4j - 3 - \lambda}{2j(2j-1)} \propto \frac{a_{2j-2}}{j} \quad \text{pour } j \text{ grand} \\
 \Rightarrow a_{2j} &\simeq \frac{1}{j!} \\
 \Rightarrow \sum_j a_{2j} q^{2j} &\simeq e^{q^2} \\
 \Rightarrow \varphi(q) &\propto e^{\frac{1}{2}q^2}
 \end{aligned} \tag{31}$$

D'après l'hypothèse selon laquelle les solutions doivent être bornées, cette solution doit être rejetée.

Solutions impaires :

$$\begin{aligned}
 H(q) &= \sum_j a_{2j+1} q^{2j+1} \\
 a_{2j+1} &= a_{2(j-1)+1} \frac{4j - 2 + 1 - \lambda}{(2j+1)(2j)} \propto \frac{a_{2j-1}}{j} \quad \text{pour } j \text{ impair} \\
 \Rightarrow a_{2j+1} &\simeq \frac{1}{j!} \\
 \Rightarrow \sum_j a_{2j+1} q^{2j+1} &\simeq qe^{q^2} \\
 \Rightarrow \varphi(q) &\propto qe^{\frac{1}{2}q^2}
 \end{aligned} \tag{32}$$

Cette solution doit aussi être rejetée.

Conclusion : il doit exister un entier  $n$  tel que  $2n + 1 - \lambda = 0$ , soit

$$\lambda = 2n + 1 \tag{33}$$

Dans ce cas, la relation de récurrence sur les coefficients s'écrit :

$$a_{j+2} = a_j \frac{2(j-n)}{(j+1)(j+2)} \tag{34}$$

Solutions paires :  $n$  pair,  $a_j = 0$  si  $j$  impair et  $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Solutions impaires :  $n$  impair,  $a_j = 0$  si  $j$  pair et  $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

Les solutions  $H(q)$  sont donc des polynômes.

#### 4.1.2 Récapitulation

Les énergies propres sont fixées par la condition  $\lambda = 2n + 1$ ,  $n = 0, 1, \dots$

$$\Rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (35)$$

Les fonctions propres associées sont des fonctions du type  $H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2}$  avec

$$H_n(q) = \begin{cases} a_0 + a_2q^2 + \dots + a_nq^n & \text{si } n \text{ pair} \\ a_1q + a_3q^3 + \dots + a_nq^n & \text{si } n \text{ impair} \end{cases} \quad (36)$$

avec  $a_{j+2} = a_j \frac{2(j-n)}{(j+1)(j+2)}$

Les polynômes  $H_n(q)$  sont appelés *polynômes de Hermite*.

Le fondamental du problème original a donc pour fonction d'onde

$$\psi_0(x) \propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (37)$$

Cette fonction est non dégénérée, de même que les états excités : pour  $n$  donné, on peut construire un et un seul polynôme de Hermite.

## 4.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Les polynômes de Hermite représentent donc les solutions propres du problème de l'oscillateur harmonique en mécanique quantique. D'un point de vue strictement mathématique, il est utile de rappeler la relation de récurrence qui relie les polynômes de Hermite de degré différent

$$\begin{aligned} H_{n+1}(q) &= 2qH_n(q) - 2nH_{n-1}(q), \\ \frac{dH_n(q)}{dq} &= 2nH_{n-1}(q). \end{aligned} \quad (38)$$

Le polynôme de degré  $n+1$  s'obtient donc à partir du polynôme de degré  $n$  en lui appliquant l'opérateur  $2q - \frac{d}{dq}$ . Cet opérateur est une somme de l'opérateur de multiplication par la position et de l'opérateur différentiel, qui sont à leur

tour reliés aux opérateurs de position  $\hat{x}$  et de quantité de mouvement  $\hat{p}$  respectivement. C'est à partir de cette remarque qu'il est possible de développer la méthode alternative de solution du problème que nous allons proposer par la suite. L'importance de cette méthode ne sera pas immédiatement claire : elle a l'avantage d'introduire un formalisme opératoire, dit de la « seconde quantification », qui est indispensable dans la théorie quantique des champs.

La méthode est simplement basée sur la règle de commutation de Heisenberg  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ . Nous allons montrer que cette règle conduit effectivement au spectre  $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  pour l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique  $\hat{H}$ . Notre point de départ est donc

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\ [\hat{x}, \hat{p}] &= i\hbar\end{aligned}\tag{39}$$

La remarque sur les relations de récurrence entre polynômes de Hermite nous suggère d'introduire les combinaisons linéaires suivantes des opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  :

$$\begin{aligned}\hat{a} &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} \\ \hat{a}^\dagger &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} = \text{conjugué hermitique de } \hat{a}\end{aligned}\tag{40}$$

Ces relations s'inversent en :

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\end{aligned}\tag{41}$$

Calculons le commutateur de  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ . D'après leurs expressions, il vient :

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = -i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] + i\frac{1}{2\hbar}[\hat{p}, \hat{x}]\tag{42}$$

$$\Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Par ailleurs, l'hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{m\omega\hbar}{2} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 \frac{1}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left[ -(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 + (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \right] \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left[ -(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger) + (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) \right] \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) \\
\Rightarrow \hat{H} &= \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{43}$$

Étudions désormais le spectre de l'opérateur  $N = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ .

1. Les valeurs propres de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  sont positives ou nulles.

Supposons en effet que  $\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ , avec  $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$ . On a :

$$\lambda = \langle\varphi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi\rangle = \|\hat{a}|\varphi\rangle\|^2 \geq 0 \tag{44}$$

2. Si  $|\varphi_\lambda\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  de valeur propre  $\lambda$ , alors  $\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  de valeur propre  $\lambda - 1$ .

Démonstration :

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle &= \lambda|\varphi_\lambda\rangle \text{ par hypothèse.} \\
(\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle &= (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle - \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= \hat{a}\lambda|\varphi_\lambda\rangle - \hat{a}|\varphi_\lambda\rangle \\
&= (\lambda - 1)\hat{a}|\varphi_\lambda\rangle.
\end{aligned} \tag{45}$$

Conséquences : Partant d'un vecteur propre  $|\varphi_\lambda\rangle$  de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  de valeur propre  $\lambda > 0$ , on engendre des vecteurs propres de valeurs propres  $\lambda - 1, \lambda - 2, \dots$  par applications successives de  $\hat{a}$ . Deux cas de figure sont à distinguer.

$\lambda \notin \mathbb{N}$  Pour  $\nu$  suffisamment grand,  $\lambda - \nu < 0$ . On engendre un vecteur propre de valeur propre négative par application de  $\hat{a}^\nu$ . Mais on a démontré que les valeurs propres de  $N$  sont positives. Cette possibilité doit être écartée.

$\lambda \in \mathbb{N}$  Considérons un vecteur propre  $|\varphi_n\rangle$  de valeur propre  $n \in \mathbb{N}$ . L'application successive de  $\hat{a}$  engendre des vecteurs de valeurs propres  $n - 1,$

$n - 2, \dots$  jusqu'à l'opérateur  $\hat{a}^n$  pour lequel

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^n |\varphi_n\rangle) &= (n - n) |\varphi_n\rangle = 0 \\ \text{Mais } \langle \varphi | N | \varphi \rangle = 0 &\Rightarrow \|\hat{a}|\varphi\rangle\|^2 = 0 \end{aligned} \quad (46)$$

$$\Rightarrow \hat{a}^{n+1} |\varphi_n\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^p |\varphi_n\rangle = 0 \quad \text{si } p \geq n + 1$$

On n'engendre pas de vecteur propre de valeur propre négative si  $n$  est entier.

Conclusion : Les valeurs propres possibles de  $N$  sont les **entiers positifs** et donc les valeurs propres possibles de  $\hat{H}$  sont  $\hbar\omega (n + \frac{1}{2})$ . Nous retrouvons donc le même spectre que celui obtenu de la solution de l'équation de Schrödinger. L'opérateur  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  est appelé l'opérateur *nombre*, et il est souvent noté  $\hat{N}$ .

Essayons de construire explicitement les vecteurs propres, et étudions si ce spectre est dégénéré.

Partant d'un état  $|\varphi_n\rangle$  de valeur propre  $n$ , on arrive à un vecteur propre  $\hat{a}^n |\varphi_n\rangle$  satisfaisant  $\hat{a} (\hat{a}^n |\varphi_n\rangle) = 0$ . Sans hypothèse supplémentaire sur  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$ , il est impossible de décider s'il y a un seul état satisfaisant  $\hat{a}|\varphi\rangle = 0$ . Nous verrons que dans le cadre de l'approche de Schrödinger, le fondamental est non dégénéré. Supposons donc qu'il n'y ait qu'un seul vecteur satisfaisant  $\hat{a}|\varphi\rangle = 0$ , et notons-le  $|\varphi_0\rangle$ .

Étape suivante : Les autres états sont-ils dégénérés ? Démontrons que non par récurrence.

Hypothèse : La valeur propre  $n$  est non dégénérée. Soient  $|\varphi_{n+1}\rangle$  et  $|\psi_{n+1}\rangle$  deux vecteurs propres de valeurs propres  $n + 1$ . Comme  $\hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle$  et  $\hat{a}|\psi_{n+1}\rangle$  sont vecteurs propres de  $N$  de valeur propre  $n$ , et que par hypothèse  $n$  est non dégénéré, il existe  $\lambda$  tel que :

$$\begin{aligned} \hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda \hat{a}|\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\ \hat{a}^\dagger \hat{a}|\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda \hat{a}^\dagger \hat{a}|\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\ (n + 1) |\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda (n + 1) |\psi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow \\ |\varphi_{n+1}\rangle &= \lambda |\psi_{n+1}\rangle \\ \Rightarrow \quad n + 1 &\text{ est non dégénérée.} \end{aligned} \quad (47)$$

Dernière étape : Comment construire les vecteurs propres de valeur propre  $n$  quelconque ?

Proposition : si  $|\varphi\rangle$  est vecteur propre de  $N$  de valeur propre  $n$ ,  $\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle$  est vecteur propre de  $N$  de valeur propre  $n + 1$ .

Démonstration :

$$\begin{aligned}
 N|\varphi\rangle &= n|\varphi\rangle, \quad \text{par hypothèse} \\
 N\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle &= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle \\
 &= \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|\varphi\rangle \\
 &= \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a})|\varphi\rangle + \hat{a}^\dagger|\varphi\rangle \\
 &= \hat{a}^\dagger n|\varphi\rangle + \hat{a}^\dagger|\varphi\rangle \\
 &= (n + 1)\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle
 \end{aligned} \tag{48}$$

Conséquence :  $(\hat{a}^\dagger)^n|\varphi_0\rangle$  est vecteur propre de  $N$  de valeur propre  $n$ .

Normalisation : Supposons  $|\varphi_n\rangle$  normalisé.

$$\begin{aligned}
 \|\hat{a}^\dagger\varphi_n\|^2 &= \langle\varphi_n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|\varphi_n\rangle = (n + 1)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle \\
 \Rightarrow \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n + 1}}|\varphi_n\rangle &\text{ est normalisé} \\
 \Rightarrow |\varphi_{n+1}\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n + 1}}|\varphi_n\rangle
 \end{aligned} \tag{49}$$

Ainsi,

$$|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle \tag{50}$$

Finalement, pour aller d'un état à l'autre, on a :

$$\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n + 1}|\varphi_{n+1}\rangle \tag{51}$$

Pour circuler dans l'autre sens, on remarque que :

$$\|\hat{a}|\varphi_n\rangle\|^2 = \langle\varphi_n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi_n\rangle = n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = n \tag{52}$$

$$\Rightarrow \hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$$

$\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$  sont souvent appelés *opérateurs de création et d'annihilation*.

#### 4.2.1 Récapitulation

Les valeurs propres de l'oscillateur harmonique sont données par

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N} \tag{53}$$

Elles ne sont pas dégénérées. L'état fondamental  $|\varphi_0\rangle$  satisfait :

$$\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (54)$$

Le vecteur propre de valeur propre  $E_n$  est donné par

$$|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle \quad (55)$$

Les vecteurs propres sont reliés entre eux par :

$$\hat{a}^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \quad \text{et} \quad \hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \quad (56)$$

Remarque : C'est la solution *complète* du problème<sup>4</sup>. La valeur moyenne de n'importe quelle observable dans n'importe quel état s'obtient en exprimant l'observable à l'aide des  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  et en utilisant la règle de commutation  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ .

Exemple : Essayons de calculer la valeur moyenne de  $\hat{x}^2$  dans le fondamental ( $\langle\varphi_0|\hat{x}^2|\varphi_0\rangle$ ) :

$$\begin{aligned} \hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \\ (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 &= (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger = (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \\ \langle\varphi_0|(\hat{a}^\dagger)^2|\varphi_0\rangle &= \langle\varphi_0|\hat{a}^\dagger|\varphi_1\rangle = \sqrt{2}\langle\varphi_0|\varphi_2\rangle = 0 \\ \langle\varphi_0|\hat{a}^2|\varphi_0\rangle &= \langle\varphi_0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0 \\ \Rightarrow \langle\varphi_0|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2|\varphi_0\rangle &= \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1 \\ \Rightarrow \langle\hat{x}^2\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \end{aligned} \quad (57)$$

On voit donc que  $\langle\hat{x}^2\rangle \neq 0$  dans l'état de plus basse énergie. Ce résultat est en contradiction manifeste avec le cas classique, où  $x = 0$  (et donc  $x^2 = 0$ ) dans le fondamental. Dans l'état de plus basse énergie, on dit qu'il y a des *fluctuations quantiques* appelées dans ce cas *fluctuations de point zéro*.

---

4. A part la non-dégénérescence des états propres

## 5 Formulation générale de la mécanique quantique

Le progrès qui a eu lieu entre 1900 et 1926 dans la compréhension des phénomènes quantiques, notamment avec les théories de Schrödinger et de Heisenberg, a conduit à une formulation générale de la théorie. Cette formulation réunit, dans une structure conceptuellement cohérente, une méthode mathématique, une interprétation physique complète et une vue philosophique. Pour cela, la théorie repose sur un certain nombre de postulats. Comme nous le verrons, ces postulats contiennent la généralisation formelle des idées et des méthodes que nous avons étudiées jusqu'ici d'un point de vue empirique et historique.

### 5.1 Les postulats de la mécanique quantique

#### 5.1.1 Postulat I : état d'un système

L'état d'un système physique est représenté par un vecteur dans un espace vectoriel linéaire de dimension infinie (espace de Hilbert).

#### Commentaires

1. A cause du principe d'incertitude de Heisenberg, qui découle du principe de complémentarité, il est impossible de définir, comme dans la mécanique classique, l'état d'un système par sa trajectoire dans l'espace des phases (en spécifiant donc les coordonnées et les impulsions à chaque instant du temps).
2. Puisque l'espace des états est un espace vectoriel linéaire, ce postulat implique très naturellement le principe de superposition : *une combinaison linéaire de deux états possibles du système est aussi un état possible du système*. De plus, par hypothèse, seulement la « direction » du vecteur compte pour la définition de l'état physique. Si nous multiplions un vecteur par un nombre complexe arbitraire non nul, cela ne nous conduit pas à un état physique différent. Pour simplifier la définition des probabilités d'une mesure (voir postulat sur la mesure ci-dessous), nous allons toujours supposer que les états sont normés à 1 :  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Le vecteur d'état est ainsi défini à moins d'un facteur complexe de module unitaire.
3. L'espace de Hilbert des états est un espace « abstrait ». Il ne représente pas l'espace des phases d'une ou de toutes les particules d'un système.

4. Un changement d'état physique d'un système correspond à un changement du vecteur d'état dans l'espace de Hilbert. Il s'ensuit que l'évolution temporelle d'un système est régie par des équations du mouvement qui décrivent le changement dans le temps du vecteur d'état.

### 5.1.2 Postulat II : quantités observables

Chaque quantité physique « observable » (qui peut être obtenue comme résultat d'un processus de mesure), est représentée par un opérateur linéaire hermitique (c.-à.-d. auto-adjoint) agissant dans l'espace de Hilbert des états.

#### Commentaires

1. La linéarité des opérateurs observables est nécessaire pour assurer le principe de superposition.
2. Les opérateurs observables doivent être hermitiques pour avoir des valeurs propres réelles. Ce fait sert à assurer que le résultat d'une observation physique (la mesure d'une quantité) soit toujours un nombre réel. Pour mieux comprendre ce commentaire il faut introduire le troisième postulat qui définit le processus de mesure.

### 5.1.3 Postulat III : probabilité et processus de mesure

Lorsqu'on effectue une mesure d'une quantité physique représentée par un opérateur hermitique  $\hat{A}$ , sur un système physique représenté par un vecteur  $|\psi\rangle$ , les seules valeurs possibles fournies par la mesure sont toutes les valeurs propres de  $\hat{A}$ . La théorie ne permet pas, en général, de prévoir avec certitude la valeur qui sera fournie par la mesure. Elle établit seulement l'espérance (valeur moyenne, ou « expectation value » en anglais) du résultat de la mesure. Cette espérance est donnée par

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (58)$$

Si  $|\psi\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{A}$ , par exemple  $|\psi\rangle = |a_n\rangle$  avec valeur propre  $a_n$  de  $\hat{A}$ , alors la mesure de l'observable  $|A\rangle$  donnera **avec certitude** la valeur  $a_n$ . Ceci est consistant avec l'espérance définie par l'équation (58) :  $\langle A \rangle = \langle a_n | \hat{A} | a_n \rangle = a_n \langle a_n | a_n \rangle = a_n$ .

Si par contre  $|\psi\rangle$  n'est pas état propre de  $A$ , alors la mesure peut donner des résultats différents, choisis parmi les valeurs propres de  $\hat{A}$ . La moyenne du résultat de la mesure (au sens statistique : imaginons qu'elle soit répétée plusieurs fois sur des répliques identiques du système), appelée « espérance » de  $\hat{A}$ , et est donnée par

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \\ &\equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (\text{notation})\end{aligned}$$

### Commentaires

1. Ce postulat établit le contenu physique principal de la théorie, puisque il relie le formalisme mathématique aux résultats du processus de mesure.
2. Ce postulat est le plus problématique d'un point de vue conceptuel, puisque il remet apparemment en question l'idée du déterminisme, c'est-à-dire la possibilité de prévoir le comportement d'un système. Plusieurs physiciens, parmi lesquels Einstein (« Gott würfelt nicht ») ont eu des difficultés à l'accepter.
3. Si  $|\psi\rangle$  est un état arbitraire du système, nous pouvons l'écrire sous forme d'une expansion sur la base complète des vecteurs propres de  $\hat{A}$ ,  $\{|a_n\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \psi \rangle. \quad (59)$$

Dans ce cas général, l'espérance de la mesure de  $\hat{A}$  est donnée (en appliquant les règles du produit scalaire) par

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \sum_n \sum_m \langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \hat{A} | a_m \rangle \langle a_m | \psi \rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle \psi | a_n \rangle a_m \langle a_n | a_m \rangle \langle a_m | \psi \rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle \psi | a_n \rangle a_m \langle a_m | \psi \rangle \delta_{nm} \\ &= \sum_m a_m |\langle a_m | \psi \rangle|^2\end{aligned} \quad (60)$$

Ce résultat doit être interprété comme une valeur moyenne au sens statistique. Le résultat de la mesure est une des valeurs propres  $a_m$ , avec probabilité  $|\langle a_m | \psi \rangle|^2$ . En d'autres mots, supposons d'avoir  $N$  répliques identiques d'un système dans un état  $|\psi\rangle$  et d'effectuer la même mesure de  $\hat{A}$  sur chacun des ces systèmes. L'interprétation correcte du concept de probabilité est que chaque mesure donnera une parmi les valeurs propres  $a_n$ . Pour  $N$  suffisamment grand, nous pourrions en principe calculer la distribution statistique des résultats des  $N$  mesures. Cette

distribution serait exactement donnée par  $|\langle a_m|\psi\rangle|^2$ . Dans ce sens, la théorie de la mécanique quantique est parfaitement déterministe, puisque elle définit tous les résultats possibles d'une mesure et en donne avec précision les différentes probabilités. A titre d'exemple, considérons l'opérateur de la position  $\hat{x}$ . Nous pouvons définir formellement ses états propres  $|x\rangle$ , tels que  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ .<sup>5</sup> Il s'ensuit que la probabilité de mesurer la valeur  $x$  de la position du système est donnée par  $|\langle x|\psi\rangle|^2$ . Mais cette probabilité est donnée, dans le cadre de la théorie de Schrödinger, par le module au carré  $|\psi(x)|^2$  de la fonction d'onde  $\psi(x)$ . La formulation générale de la mécanique quantique permet donc d'identifier la fonction d'onde d'un état  $|\psi\rangle$ , évaluée à la position  $x$ , comme étant la projection de l'état  $|\psi\rangle$  sur l'état propre  $|x\rangle$  de la position :

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (61)$$

4. Il est très important de remarquer que la nature de cette distribution de probabilité définie par les  $|\langle a_m|\psi\rangle|^2$  est fondamentalement différente de la notion de probabilité en physique statistique classique. En physique statistique, la notion de probabilité est introduite pour pouvoir décrire un système composé d'un très grand nombre de particules. Elle constitue une simplification par rapport à la connaissance exacte des trajectoire dans l'espace des phases de toutes les particules, qui reste en principe possible. En mécanique quantique, même pour une seule particule, la connaissance précise de toutes les quantités physiques est impossible, et le concept de probabilité est une caractéristique intrinsèque de la nature. C'est dans cette remarque que nous retrouvons la différence profonde entre la physique classique et la physique quantique.
5. Nous pourrions nous poser la question, si le concept de probabilité est vraiment nécessaire. Il est évident que le concept de probabilité est indispensable pour expliquer le principe d'incertitude de Heisenberg et, plus en général, le principe de complémentarité de Bohr. Le concept de probabilité permet donc au moins d'établir un théorie conséquente, qui contient les idées de complémentarité et qui permet une interprétation des expériences de pensée telles que l'expérience de Young.

Une question beaucoup plus profonde est celle concernant les *variables cachées* : le fait que la même mesure, effectuée sur des répliques iden-

---

5. Puisque les valeurs possibles de la variable  $x$  sont tous les nombres réels, l'ensemble des états propres de  $\hat{x}$  est non dénombrable, ce qui implique une difficulté mathématique dans la définition des propriétés d'orthonormalité et de complétude. Le problème est résolu à l'aide de la théorie des distributions, notamment avec l'introduction de la distribution  $\delta$  de Dirac.

tiques d'un système dans un état  $|\psi\rangle$ , donne des résultats différents, découle-t-il d'une caractéristique intrinsèque de la nature ? Ou bien exprime-t-il seulement une limitation du processus de mesure ? Dans cette deuxième hypothèse, l'incertitude du résultat serait due à certaines variables physiques dont nous ne connaissons pas l'existence (variables cachées). Ces variables pourraient avoir des valeurs différentes pour les différentes répliques du système, ce qui entraînerait les différents résultats des mesures. La probabilité ne serait donc pas une propriété intrinsèque du système, mais plutôt une conséquence de la connaissance incomplète que nous avons du système.

Par analogie, nous pouvons penser à la théorie statistique classique d'un gaz composé d'un grand nombre de molécules. Dans ce cas, les variables cachées seraient les trajectoires dans l'espace des phases de chaque molécule. Leur connaissance serait en principe possible, et les équations du mouvement de toutes les molécules (avec leurs interactions mutuelles) constitueraient une description totalement déterministe. Toutefois, étant donné la complexité d'un tel ensemble d'équations, nous acceptons plutôt une description statistique du système, qui est beaucoup plus simplifiée et nous donne accès à des valeurs moyennes des quantités physiques d'intérêt.

Le problème des variables cachées a été étudié par plusieurs scientifiques. La question des variables cachées était tout de même considérée comme une question purement philosophique, jusqu'en 1964. En cette année, John S. Bell a démontré son fameux théorème. Le théorème affirme que « Il est impossible de concevoir une théorie faisant intervenir des variables cachées, qui reproduise de manière complète les prévisions de la mécanique quantique ». Ensemble avec son théorème, Bell donne une méthode opérationnelle – basée sur une inégalité entre certains résultats de la mesure – pour établir si un système physique peut être décrit par une théorie faisant intervenir des variables cachées. A présent, cette méthode a été appliquée à des centaines d'expériences physiques, et a toujours confirmé la validité de la mécanique quantique. Nous pouvons donc affirmer que le théorème de Bell a été, après le principe de complémentarité de Bohr, la deuxième petite révolution conceptuelle apportée par la mécanique quantique.

#### 5.1.4 Postulat IV : relations de commutation canoniques

Les opérateurs hermitiques de la coordonnée  $\hat{x}$  et de la quantité de mouvement  $\hat{p}$  (quantités conjuguées au sens de la mécanique analytique) obéissent

à la règle de commutation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\hat{I}. \quad (62)$$

### Commentaires

1. C'est le postulat qui introduit la constante de Planck  $\hbar$ .
2. Ensemble avec le postulat III sur la probabilité, donne lieu au principe d'incertitude de Heisenberg et donc au plus général principe de complémentarité de Bohr, comme nous l'avons vu. C'est ces deux postulats qui sont à la base de la différence profonde avec la mécanique classique.
3. On peut voir les postulats I et II comme les fondements de la structure mathématique de la mécanique quantique. Les postulats III et IV, par contre, donnent à cette structure une interprétation physique.

#### 5.1.5 Postulat V : équation de Schrödinger

L'évolution d'un système physique décrit par un état  $|\varphi(t)\rangle$ , au cours du temps  $t$ , est régie par l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}, t)|\varphi(t)\rangle, \quad (63)$$

ou, au sens de l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde  $\varphi(x, t) = \langle x|\varphi(t)\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x, t) = H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\varphi(x, t). \quad (64)$$

### Commentaires

1. Cette équation de Schrödinger est du premier ordre dans le temps  $t$  mais du deuxième ordre dans la coordonnée  $x$ . Elle n'est donc pas invariante par transformations de Lorentz. La mécanique quantique dans sa forme présente, n'est pas donc valable dans la limite relativiste. Des extensions possibles dans ce sens sont l'équation de Klein-Gordon et l'équation de Dirac.
2. L'équation de Schrödinger détermine la fonction d'onde  $\varphi(x, t)$ , et donc la distribution de probabilité  $|\varphi(x, t)|^2$ , de manière complète au cours du temps, une fois donnée une condition initiale. Dans ce sens, la mécanique quantique est une théorie complètement déterministe. C'est seulement la nature qui ne permet pas de connaître le résultat d'une mesure avec certitude.

3. Considérons un système dont l'Hamiltonien  $\hat{H}$  ne dépend pas explicitement du temps. Si nous faisons l'hypothèse qu'un état soit caractérisé par une évolution de type stationnaire au cours du temps,

$$\varphi(x, t) = \varphi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad (65)$$

alors l'équation de Schrödinger dépendante du temps implique l'équation de Schrödinger aux valeurs propres

$$H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x). \quad (66)$$

## 5.2 Le processus de mesure

Le Postulat III relie la structure mathématique de la mécanique quantique au processus de mesure. Il dit que, pour un système dans un état  $|\psi\rangle$ , la probabilité de mesurer la valeur propre  $a_n$  de l'opérateur  $\hat{A}$ , qui représente une quantité observable, est

$$|\langle a_n | \psi \rangle|^2 \quad (67)$$

et que la valeur moyenne de ce processus de mesure, au sens statistique, est

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (68)$$

Il est très important de souligner l'interprétation statistique de ce postulat. Pour bien comprendre les deux résultats (67) et (68), nous devons imaginer d'avoir préparé un ensemble statistique composé d'un grand nombre de répliques identiques du système dans l'état  $|\psi\rangle$ , et d'effectuer la mesure une fois sur chacun de ces systèmes. Le Postulat III affirme que l'analyse statistique des différents résultats obtenus, donnera une distribution de probabilité (67) et une valeur moyenne (68).

Une question est toutefois légitime. Qu'arrive-t-il si on effectue une mesure de  $\hat{A}$  plusieurs fois à la suite sur le même système ? La réponse que nous allons donner à cette question, doit être considérée comme une extension du Postulat III. En particulier, elle est en accord avec l'immense nombre de vérifications expérimentales de la mécanique quantique. Supposons d'effectuer la mesure une première fois et d'obtenir le résultat  $a_n$ . Le processus de mesure va induire un changement d'état du système. Le nouvel état, après la mesure, est l'état propre  $|a_n\rangle$  correspondant à la valeur propre  $a_n$  de  $\hat{A}$ . Si la valeur propre  $a_n$  est dégénérée et si l'on note  $|a_n^{(1)}\rangle, \dots, |a_n^{(r)}\rangle$  les vecteurs propres associés, la probabilité de trouver  $a_n$  est donnée par

$$\sum_{i=1}^r |\langle a_n^{(i)} | \psi \rangle|^2 \quad (69)$$

et juste après la mesure, le système est dans l'état  $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^r \langle a_n^{(i)} | \psi \rangle | a_n^{(i)} \rangle$  avec  $N = \left( \sum_{i=1}^r \left| \langle a_n^{(i)} | \psi \rangle \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$  pour que l'état soit normalisé. Une deuxième mesure de  $\hat{A}$  sur le nouvel état du *même* système nous donnera donc de nouveau la même valeur  $a_n$ .

Il faut donc accepter le fait qu'un processus de mesure en mécanique quantique modifie l'état du système sur lequel la mesure est effectuée. Cela est une conséquence naturelle du fait que l'outil de mesure (par exemple les photons utilisés pour détecter le passage des électrons dans l'expérience de pensée de Young) est aussi un système régi par les lois de la mécanique quantique, qui interagit avec le système qui est mesuré. Ce fait n'est pas en contradiction avec la version généralisée du principe de complémentarité quantique que nous avons discuté dans le premier chapitre. Dans le cas de l'expérience de Young avec des dédoubleur, par exemple, nous avons vu que le principe est vérifié indépendamment du fait d'effectuer la mesure. La complémentarité quantique ne doit donc pas être attribuée à l'action de la mesure sur le système. Toutefois, il faut accepter que, si une mesure est effectuée, alors l'état du système sera modifié par conséquent.

Il est intéressant d'élargir cette discussion au cas où on mesure deux quantités observables distinctes, représentées par les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Deux cas sont possibles.

Premièrement, le cas où les deux observables commutent :  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Dans ce cas, d'après l'algèbre linéaire il est possible de trouver une base orthonormée  $\{|a_n, b_m\rangle\}$  de l'espace de Hilbert, qui soit simultanément base de vecteurs propres de  $\hat{A}$  et de  $\hat{B}$ , avec valeurs propres  $a_n$  et  $b_m$  respectivement. Imaginons d'effectuer une mesure de  $\hat{A}$  sur un état  $|\psi\rangle$ , et d'obtenir la valeur  $a_n$ . Maintenant le nouvel état du système est l'état propre de  $\hat{A}$  donné par<sup>6</sup>

$$|\psi'\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} \langle a_n, b_m | \psi \rangle | a_n, b_m \rangle. \quad (70)$$

Effectuons maintenant une mesure de  $\hat{B}$  et supposons d'obtenir la valeur  $b_m$ . Maintenant le nouvel état du système est aussi un état propre de  $\hat{B}$ . Si  $b_m$  est aussi non dégénérée, le nouvel état sera  $|a_n, b_m\rangle$ . Il est clair que maintenant une nouvelle mesure de  $\hat{A}$  sur le même système dans son nouvel état, nous donnera toujours la valeur  $a_n$ . De même, des nouvelles mesures de  $\hat{B}$  nous donnerons toujours la valeur  $b_m$ .

Le deuxième cas est représenté par deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  dont le commutateur n'est pas zéro, comme par exemple la coordonnée spatiale  $\hat{x}$  et la

---

6. Pour simplifier, nous allons supposer que la valeur propre  $a_n$  est non dégénérée. La généralisation au cas dégénéré est immédiate.

quantité de mouvement  $\hat{p}_x$ . D'après l'algèbre linéaire, nous savons qu'il n'est maintenant plus possible de trouver une base d'états propres simultanément de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Supposons que la mesure de  $\hat{A}$  sur un état initial  $|\psi\rangle$  donne la valeur propre  $a_n$  de  $\hat{A}$ . Le nouvel état du système sera maintenant  $|a_n\rangle$ . Si nous effectuons maintenant une mesure de  $\hat{B}$ , avec résultat  $b_m$ , l'état du système après la mesure sera un état propre de  $\hat{B}$ ,  $|b_m\rangle$ . Cet état n'est pas en général un état propre de  $\hat{A}$ . Il s'ensuit qu'une nouvelle mesure de  $\hat{A}$  peut de nouveau donner une valeur quelconque parmi les valeurs propres  $a_j$  de  $\hat{A}$ , pas nécessairement la valeur  $a_n$  mesurée auparavant. La mesure de  $\hat{B}$  a donc annulé l'effet de la précédente mesure de  $\hat{A}$ , qui était d'avoir mis le système dans un état propre de  $\hat{A}$ . La deuxième mesure de  $\hat{A}$  va donc conduire le système dans un autre état propre  $|a_j\rangle$ . Une mesure successive de  $\hat{B}$  donnera en général une valeur propre  $b_j$  différente du précédent résultat, et le nouvel état sera  $|b_j\rangle$ , et ainsi de suite. La non-commutativité des opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  est à l'origine de ce résultat singulier du processus de mesure, qui est la manifestation directe du principe d'incertitude de Heisenberg. On ne peut pas connaître simultanément avec certitude la valeur des deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  et, en effet, si nous essayons d'effectuer les deux mesures plusieurs fois sur le même système, nous obtenons des résultats variables, dont la distribution de probabilité est donnée par la loi établie par le Postulat III.

Cette impossibilité de mesurer les deux quantités simultanément avec précision arbitraire se traduit par la *relation d'incertitude généralisée* :

$$\Delta\hat{A}_{|\psi\rangle}\Delta\hat{B}_{|\psi\rangle} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|, \quad (71)$$

où nous avons utilisé la notation  $\Delta\hat{O}_{|\psi\rangle}$  pour indiquer l'écart type de l'observable  $\hat{O}$  calculé sur l'état  $|\psi\rangle$ . Nous rappelons que cet écart type est défini comme

$$\Delta\hat{O}_{|\psi\rangle} = \sqrt{\langle \psi | \hat{O}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle^2} \quad (72)$$

**Démonstration** : On remarque d'abord que, pour chaque paire d'opérateurs  $\hat{A}, \hat{B}$  hermitiques,  $\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle$  est imaginaire pur. En effet,

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] \\ \Rightarrow \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger | \psi \rangle &= \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle^* = -\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \end{aligned} \quad (73)$$

On définit les opérateurs hermitiques

$$\begin{aligned}\hat{A}_0 &= \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \hat{I} \\ \hat{B}_0 &= \hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle \hat{I}\end{aligned}\tag{74}$$

qui satisfont

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - 2\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2 = \Delta \hat{A}_{|\psi}^2 \\ [\hat{A}_0, \hat{B}_0] &= [\hat{A}, \hat{B}] \\ \hat{A}_0^\dagger &= \hat{A}_0\end{aligned}\tag{75}$$

et on considère

$$\begin{aligned}f(\lambda) &= \left\| \left( \hat{A}_0 - i\lambda \hat{B}_0 \right) |\varphi\rangle \right\|^2 \geq 0 \quad (\forall \lambda) \\ \text{Mais } f(\lambda) &= \langle \psi | \left( \hat{A}_0 + i\lambda \hat{B}_0 \right) \left( \hat{A}_0 - i\lambda \hat{B}_0 \right) | \psi \rangle \\ \text{soit } f(\lambda) &= \langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \hat{B}_0^2 | \psi \rangle - i\lambda \langle \psi | \hat{A}_0 \hat{B}_0 | \psi \rangle + i\lambda \langle \psi | \hat{B}_0 \hat{A}_0 | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \hat{B}_0^2 | \psi \rangle + \lambda \underbrace{\left( -i\langle \psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \psi \rangle \right)}_{\in \mathbb{R}}\end{aligned}\tag{76}$$

Pour que ce polynôme du second degré soit positif  $\forall \lambda$ , il faut qu'il n'ait pas de racine réelle (parabole au-dessus de l'axe  $\lambda$ ), donc que son discriminant soit négatif :

$$\begin{aligned}\Delta &= \left( -i\langle \psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \psi \rangle \right)^2 - 4\langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}_0^2 | \psi \rangle \leq 0 \\ \Rightarrow & \left( \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2 \right) \left( \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle^2 \right) \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \\ \Rightarrow & \Delta \hat{A}_{|\psi} \Delta \hat{B}_{|\psi} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|\end{aligned}\tag{77}$$

Il est donc impossible de mesurer simultanément est avec une précision arbitraire deux observables qui ne commutent pas. En particulier, pour  $\hat{A} = \hat{x}$  et  $\hat{B} = \hat{p}_x$ , ce résultat coïncide avec le principe d'incertitude de Heisenberg pour la position et la quantité de mouvement (22).

### 5.3 Espaces de Hilbert et opérateurs

Nous avons vu qu'un état d'un système est décrit par un vecteur dans un espace de Hilbert de dimension infinie. Nous allons maintenant faire un rappel des propriétés d'un espace de Hilbert et des opérateurs linéaires agissant sur cet espace.

Un espace de Hilbert est un espace vectoriel sur le corps des nombres complexes, muni d'un produit scalaire défini positif.

Propriétés du produit scalaire :

1.  $(\chi, \phi)$  linéaire par rapport à  $\phi$
2.  $(\chi, \phi)$  antilinéaire par rapport à  $\chi$

$$(\alpha\chi_1 + \beta\chi_2, \phi) = \alpha^*(\chi_1, \phi) + \beta^*(\chi_2, \phi)$$

3.  $(\chi, \phi) = (\phi, \chi)^*$

Un vecteur dans  $\mathcal{H}$  de dimension  $N$  est représenté par ses composantes complexes sur une base orthonormée  $\{\phi_n\}$  :

$$\phi = \sum_{n=1}^N a_n \phi_n$$

Nous indiquons cela par un "vecteur colonne"

$$\phi = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

Le produit scalaire entre  $\phi$  et  $\chi = \sum_n b_n \phi_n$  est donné par :

$$(\chi, \phi) = \sum_{n=1}^N b_n^* a_n$$

Introduisons un opérateur linéaire sur  $\mathcal{H}$ .

$$\begin{aligned} \hat{A} &: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \\ \hat{A}(\alpha\phi + \beta\chi) &= \alpha\hat{A}\phi + \beta\hat{A}\chi \end{aligned}$$

Sur une base  $\{\phi_n\}$ , si  $\eta = \sum_n a_n \phi_n$ , alors

$$\xi \equiv \hat{A}\eta = \sum_{n=1}^N a_n \hat{A}\phi_n$$

Pour exprimer  $\xi$  dans la base  $\{\phi_n\}$  :

$$\xi = \sum_{n=1}^N b_n \phi_n$$

les  $b_n$  s'obtiennent à l'aide d'une projection sur les vecteurs de base :

$$\begin{aligned} b_m &= (\phi_m, \xi) \\ &= \sum_{n=1}^N (\phi_m, a_n \hat{A}\phi_n) \\ &= \sum_{n=1}^N (\phi_m, \hat{A}\phi_n) a_n \equiv \sum_{n=1}^N A_{mn} a_n \end{aligned}$$

L'action de l'opérateur  $\hat{A}$  coïncide donc avec l'application de la matrice  $A_{mn} = (\phi_m, \hat{A}\phi_n)$  au vecteur colonne

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

Pour chaque opérateur  $\hat{A}$ , nous pouvons définir un opérateur conjugué hermitique (adjoint)  $\hat{A}^\dagger$ , de la manière suivante :

$$\forall \chi, \phi, \quad (\chi, \hat{A}^\dagger \phi) \equiv (A\chi, \phi)$$

Par la propriété du produit scalaire,  $(\hat{A}\chi, \phi) = (\phi, \hat{A}\chi)^*$ . En particulier,  $(\phi_m, \hat{A}^\dagger \phi_n) = (\phi_n, \hat{A}\phi_m)^*$ . Donc la matrice de  $\hat{A}^\dagger$  est donnée par la matrice de  $\hat{A}$  transposée et conjuguée :

$$(\hat{A}^\dagger)_{mn} = (\hat{A})_{mn}^*$$

Un opérateur "hermitique" ou "auto-adjoint" est un opérateur pour lequel  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ . Cela implique

$$\begin{aligned} (\hat{A})_{mn} &= (\hat{A})_{mn}^* \text{ et en particulier} \\ (\hat{A})_{nn} &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

**Théorème** Si  $\hat{A}$  est un opérateur hermitique, alors

1. Toutes ses valeurs propres  $a_n$  sont réelles
2. Si  $\xi_m$  et  $\xi_n$  sont vecteurs propres associés aux valeurs propres  $a_m \neq a_n$ , alors  $(\xi_m, \xi_n) = 0$
3.  $\hat{A}$  est diagonalisable : il existe une base orthonormée  $\{\xi_n\}$  de  $\mathcal{H}$  où les  $\xi_n$  sont vecteurs propres de  $\hat{A}$ .

Nous savons qu'il est possible d'utiliser un formalisme, dit des "vecteurs ligne", pour indiquer les produits scalaires dans une base  $\{\phi_n\}$  donnée. En particulier, si  $\phi$  et  $\xi$  sont des vecteurs de  $\mathcal{H}$  avec

$$\phi = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \quad \xi = \begin{pmatrix} b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_N \end{pmatrix}$$

Le produit scalaire est écrit avec le symbole

$$\begin{aligned} (\xi, \phi) &= \sum_{n=1}^N b_n^* a_n \\ &= (b_1^*, \dots, b_N^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \end{aligned}$$

L'objet  $(b_1^*, \dots, b_N^*)$  doit être pensé comme un vecteur d'un espace différent de  $\mathcal{H}$ , que nous appelons  $\mathcal{H}'$ . Avec ce formalisme, le produit scalaire peut être compris comme un produit de deux "matrices"  $1 \times N$  et  $N \times 1$  respectivement.

L'idée de "vecteur ligne" est très intuitive. Par contre, nous aurions pu introduire la même idée, à l'aide d'un langage un peu plus formel.

Définissons la fonction linéaire  $P_\xi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$  de la manière suivante :

$$P_\xi(\phi) \equiv (\xi, \phi)$$

Nous comprenons immédiatement que, pour remplir toutes les propriétés du produit scalaire,  $P_\xi$  est une fonction linéaire. Il est possible de montrer que

l'ensemble des fonctions  $\{P_\xi, \xi \in \mathcal{H}\}$  forme un espace vectoriel qui a exactement les mêmes propriétés que  $\mathcal{H}'$ , espace des vecteurs ligne. En d'autres termes, si  $\xi, \phi \in \mathcal{H}$  et

$$\xi = \sum_n b_n \phi_n \quad \phi = \sum_n a_n \phi_n$$

alors

$$P_\xi \longleftrightarrow (b_1^* \ , \dots, \ b_N^*)$$

puisque

$$P_\xi(\phi) \equiv \sum_n b_n^* a_n \equiv (b_1^* \ , \dots, \ b_N^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

L'espace  $\mathcal{H}'$  s'appelle "espace dual". Sa définition en termes de "fonctions"  $P_\xi$  est utile à la généralisation en dimension infinie. Toutefois, pour bien comprendre sa signification, il ne faut pas oublier sa correspondance avec la notion de vecteur ligne.

Pour finir, remarquons que si  $\phi = \alpha\xi + \beta\eta \in \mathcal{H}$  alors  $P_\phi = \alpha^* P_\xi + \beta^* P_\eta \in \mathcal{H}'$ , c'est-à-dire que l'espace dual  $\mathcal{H}'$  est antilinéaire. Cette propriété découle immédiatement des propriétés du produit scalaire.

Nous avons vu qu'en mécanique quantique il est nécessaire d'introduire un espace vectoriel des états de dimension infinie.

Pour s'en rendre compte, nous pouvons par exemple écrire, à titre d'exercice, les matrices correspondant aux opérateurs de création  $\hat{a}^\dagger$  et de destruction  $\hat{a}$  de l'oscillateur harmonique, limitées au sous-espace généré par la base d'états propres de l'Hamiltonien  $\{|\phi_j\rangle, j = 1, 2, \dots, N\}$ . Nous voyons facilement que, restreintes à cette base, les matrices  $N \times N$  de  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$  sont telles que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 0$$

Mais une conséquence directe du principe d'incertitude de Heisenberg est que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

ce qui est possible seulement en dimension infinie.

Un espace de Hilbert de dimension infinie est dit "séparable" s'il possède une base dénombrable

$$\xi \in \mathcal{H} \quad \xi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n \quad \phi_n \in \mathcal{H} \quad (\phi_n, \phi_m) = \delta_{n,m}$$

Un théorème important nous dit que tous les espaces séparables sont isomorphes. On peut donc se restreindre à la dimension des propriétés d'un seul espace  $\mathcal{H}$ .

Considérons l'espace dit  $\ell^{(2)}$ . C'est la généralisation naturelle de l'espace de dimension finie que nous avons vu. En particulier, les vecteurs sont définis par des suites

$$\phi = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad a_j \in \mathbb{C}$$

qui correspondent à l'idée de vecteur colonne. La normalisation demande que

$$\|\phi\|^2 \equiv (\phi, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 < +\infty$$

L'espace  $\mathcal{H} = \ell^{(2)}$  est donc formée par toutes les suites  $a_j$  à carré sommable. On peut vérifier que cette définition correspond à un espace vectoriel (en particulier, l'inégalité de Schwarz garantit que  $|(\phi, \xi)|^2 \leq \|\phi\|^2 \cdot \|\xi\|^2 < \infty$ ).

Dans le cadre de cette extension à dimension infinie, il est possible de définir de la même manière l'espace dual  $\mathcal{H}'$ , également de dimension infinie et avec les mêmes propriétés qu'en dimension finie.

D'autres exemples d'espace de Hilbert séparables utilisés souvent en mécanique quantique sont  $L^2[a, b]$  et  $L^2(\mathbb{R})$ .  $L^2[a, b]$  est l'espace des fonctions  $f(x) : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$  telles que  $(f, g) \equiv \left| \int_a^b dx f^*(x)g(x) \right| < +\infty$  (Par l'inégalité de Schwarz, cela équivaut à  $(f, f) = \|f\|^2 < +\infty$ ).

Nous savons par l'analyse de Fourier qu'il est possible d'introduire la base orthonormée

$$\{\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2i\pi nx}{b-a}} \quad n = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, +\infty\}$$

C'est la série de Fourier pour les fonctions  $\phi(x)$  à carré sommable

$$\phi(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{c_n}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2i\pi nx}{b-a}}$$

avec

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{b-a}} \int_a^b dx \phi(x) e^{-\frac{2i\pi nx}{b-a}} = (\phi_n, \phi)$$

$L^2(\mathbb{R})$  est la généralisation pour les fonctions à carré sommable  $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  et aussi séparable. Par exemple, nous pouvons choisir les  $\phi_n(x)$  solution de l'oscillateur harmonique.  $L^2(\mathbb{R})$  est l'espace des fonctions d'onde selon la théorie de Schrödinger. Grâce à la notion d'espace de Hilbert, l'isomorphisme entre  $L^2(\mathbb{R})$  et  $\ell^{(2)}$  constitue le lien entre les fonctions d'onde et l'espace des états abstrait introduit avec le postulat I.

**Notation :** En mécanique quantique, un vecteur de  $\mathcal{H}$  est indiqué avec le symbole

$$|\phi\rangle$$

qu'on appelle "ket".

Un vecteur de  $\mathcal{H}'$  s'indique avec le symbole

$$\langle\xi|$$

qu'on appelle "bra".

De cette manière, le produit scalaire est indiqué par un "bracket" :

$$\langle\xi|\phi\rangle$$

Avec cette notation, les symboles des vecteurs de  $\mathcal{H}$  et  $\mathcal{H}'$  coïncident avec le symbole utilisé pour le produit scalaire. Le produit scalaire entre  $\xi$  et  $\hat{A}\phi$  s'indique par  $\langle\xi|\hat{A}\phi\rangle$ . Si  $\hat{A}$  est hermitique, on utilise la notation  $\langle\xi|\hat{A}|\phi\rangle$ .

Cette notation est la plus commune en mécanique quantique. Elle n'est pas ambiguë puisque  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ . On peut donc penser que  $\hat{A}$  agit "à droite" ou "à gauche" indifféremment.

Considérons  $|\eta\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\eta\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad (\text{"ket" vecteur colonne})$$

$$\hat{A}|\eta\rangle = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdot & \cdot & A_{1n} & \cdot & \cdot \\ A_{21} & \cdot & & & & \\ \cdot & \cdot & & & & \\ A_{n1} & & & \cdot & & \\ \cdot & & & & \cdot & \\ \cdot & & & & & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_n A_{1n}a_n \\ \sum_n A_{2n}a_n \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \equiv |\xi\rangle$$

Le “bra” correspondant à  $|\xi\rangle$  est

$$\begin{aligned} & (\sum_n A_{1n}^* a_n^*, \dots, \sum_n A_{jn}^* a_n^*, \dots) = \langle \xi | \\ &= (\sum_n a_n^* (\hat{A}^\dagger)_{n1}, \dots, \sum_n a_n^* (\hat{A}^\dagger)_{nj}, \dots) \\ &= (a_1^*, \dots, a_n^*, \dots) \begin{pmatrix} (\hat{A}^\dagger)_{11} & (\hat{A}^\dagger)_{12} & \dots & \dots \\ (\hat{A}^\dagger)_{21} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Cet objet peut être indiqué par

$$\langle \eta | \hat{A}^\dagger$$

où il est entendu que  $\hat{A}^\dagger$  “agit à gauche”.

**Exemple :** Etats cohérents  $|z\rangle$

Si  $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$  alors le “vecteur ligne” (ou “bra”) correspondant est  $\langle z|\hat{a}^\dagger$  mais, par l’antilinearité de l’espace dual des “bra”, il faut que le “bra” correspondant à  $z|z\rangle$  soit  $z^*\langle z|$ . Il s’ensuit que

$$\langle z|\hat{a}^\dagger = z^*\langle z|$$

La notation des “bra” et “ket” nous permet de définir un nouvel objet, étant donnés deux vecteurs  $|\phi\rangle$  et  $|\xi\rangle$  de  $\mathcal{H}$  :

$$|\phi\rangle\langle\xi|$$

Cet objet est un opérateur. Pour mieux comprendre, nous pouvons utiliser de nouveau la notion de vecteur ligne et colonne. Si

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\xi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

alors

$$|\phi\rangle\langle\xi| = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} (b_1^* \quad \dots \quad b_n^* \quad \dots)$$

C'est le produit entre deux matrices

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} (b_1^* \quad \cdot \quad \cdot \quad b_n^* \quad \cdot \quad \cdot) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_2 b_1^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

Appliquons cet opérateur à un vecteur

$$|\eta\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} |\phi\rangle\langle\xi| \cdot |\eta\rangle &= \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_2 b_1^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_1 \sum_n b_n^* c_n^* \\ a_2 \sum_n b_n^* c_n^* \\ \cdot \\ a_m \sum_n b_n^* c_n^* \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \sum_n b_n^* c_n \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_m \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \underbrace{|\phi\rangle}_{\in \mathcal{H}} \times \underbrace{\langle\xi|\eta\rangle}_{\in \mathbb{C}} \end{aligned}$$

C'est le vecteur  $|\phi\rangle$  multiplié par le produit scalaire entre  $|\xi\rangle$  et  $|\eta\rangle$ . On peut vérifier que c'est un opérateur linéaire. Nous comprenons maintenant l'efficacité de la notation de Dirac des "bra" et "ket".

En particulier,  $|\phi\rangle\langle\phi|$  est le projecteur sur le vecteur  $|\phi\rangle$ .

Nous pouvons maintenant introduire, pour une base orthonormée  $\{|\phi_n\rangle\}$ , la relation de fermeture

$$\hat{I} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \quad \text{opérateur identité en } \mathcal{H},$$

dont la preuve est immédiate.

De même, un opérateur  $\hat{A}$  peut s'écrire comme

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn} |\phi_m\rangle \langle \phi_n|$$

où  $A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle$  sont les éléments de matrice que nous avons introduit avant. En effet

$$\begin{aligned} & \langle \phi_i | \left( \sum_{m,n} A_{mn} |\phi_m\rangle \langle \phi_n| \right) | \phi_j \rangle \\ &= \sum_{m,n} A_{mn} \langle \phi_i | \phi_m \rangle \langle \phi_n | \phi_j \rangle \\ &= \sum_{m,n} A_{mn} \delta_{im} \delta_{nj} = A_{ij} \end{aligned}$$

Cette écriture s'appelle "représentation" de  $\hat{A}$  sur une base  $\{\phi_n\}$ .

Supposons maintenant  $\hat{A}$  hermitique. Nous sommes dans un espace  $\mathcal{H}$  de dimension infinie. Il n'est donc plus certain que  $\hat{A}$  soit diagonalisable. Supposons qu'il le soit, donc qu'il existe une base  $\{|\phi_n\rangle\}$  orthonormée de vecteurs propres de  $\hat{A}$  :

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$$

Les valeurs propres peuvent aussi être dégénérées. Par exemple  $a_n = a_{n+1}$ . Il suffit de choisir la base de manière à ce que  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$ . Dans le sous-espace  $\{|\phi_n\rangle, |\phi_{n+1}\rangle\}$ , nous pouvons introduire une rotation arbitraire (transformation unitaire), tout en laissant la base orthonormée.

Dans cette base, la représentation devient

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

puisque  $A_{mn} = \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle = a_n \delta_{nm}$

Cette expression s'appelle "représentation spectrale" de  $\hat{A}$ , puisqu'elle est définie sur la base des vecteurs propres de  $\hat{A}$  auxquels correspondent les valeurs propres, c'est-à-dire le spectre des quantités mesurables

## 5.4 Ensembles complets d'observables qui commutent

Nous avons vu que, pour deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  qui commutent, c'est-à-dire  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ , il est possible de trouver une base orthonormée

qui diagonalise simultanément  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Ce fait est vrai pour un nombre quelconque d'observables  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ , pourvu qu'ils commutent tous entre eux. La base  $\{|\phi_n\rangle\}$  est telle que

$$\begin{aligned}\hat{A}|\phi\rangle &= a|\phi\rangle \\ \hat{B}|\phi\rangle &= b|\phi\rangle \quad \dots\dots\end{aligned}$$

une fonction arbitraire de  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$  sera telle que

$$f(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots)|\phi\rangle = f(a, b, c, \dots)|\phi\rangle$$

où  $f(a, b, c, \dots)$  est la fonction calculée sur les nombres réels  $a, b, c, \dots$

**Définition :** Si  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  sont des observables qui commutent mutuellement, indépendantes les unes des autres (c'est-à-dire qu'aucune n'est une fonction des autres), et s'il n'existe pas d'autres observables indépendantes qui commutent avec  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$  alors on dit que  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$  forment un ensemble **complet** d'observables qui commutent (autrement dit observables compatibles). Pour un tel ensemble, considérons la base  $\{|\phi_n\rangle\}$  de vecteurs propres communs à tous les opérateurs.

Si  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  est complet, alors cette base est unique. C'est-à-dire qu'il n'y a pas deux vecteurs  $|\phi_m\rangle$  et  $|\phi_n\rangle$  tels que

$$\begin{aligned}\hat{A}|\phi_m\rangle &= a_m|\phi_m\rangle, \quad \hat{B}|\phi_m\rangle = b_m|\phi_m\rangle\dots \\ \hat{A}|\phi_n\rangle &= a_n|\phi_n\rangle, \quad \hat{B}|\phi_n\rangle = b_n|\phi_n\rangle\dots\end{aligned}$$

et  $\{a_m, b_m, c_m\dots\} = \{a_n, b_n, c_n\dots\}$

Si ces deux vecteurs existaient, alors une transformation unitaire dans le sous-espace  $\{|\phi_m\rangle, |\phi_n\rangle\}$  donnerait encore une base de vecteurs propres de l'ensemble d'opérateurs.

L'ensemble des observables  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$  est dit "ensemble complet d'observables qui commutent (ou compatibles)" (ECOC).

Nous allons maintenant prouver que la base est unique. Faisons-le pour deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  pour simplicité. La généralisation au cas avec plusieurs opérateurs est immédiate.

Supposons que à  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  soient deux observables qui forment un ECOC. Cela veut dire qu'il n'existe pas d'autre opérateur  $\hat{W}$ , indépendant de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  (qui ne s'exprime pas comme  $\hat{W} = f(\hat{A}, \hat{B})$ ) tel que  $[\hat{W}, \hat{A}] = 0$  et  $[\hat{W}, \hat{B}] = 0$ .

Supposons maintenant  $|\phi_m\rangle$  et  $|\phi_n\rangle$  états propres de  $\hat{A}$  et de  $\hat{B}$  linéairement indépendant (sans perte de généralité nous pouvons les considérer orthogo-

naux :  $\langle \phi_m | \phi_n \rangle$ ) dégénérés pour les deux opérateurs, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\hat{A}|\phi_n\rangle &= a_n|\phi_n\rangle \\ \hat{A}|\phi_m\rangle &= a_m|\phi_m\rangle \\ \hat{B}|\phi_n\rangle &= b_n|\phi_n\rangle \\ \hat{B}|\phi_m\rangle &= b_m|\phi_m\rangle\end{aligned}$$

et  $a_n = a_m$ ,  $b_n = b_m$ .

Dans la base des états propres  $|\phi_j\rangle$  de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  :

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \sum_j a_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \\ \hat{B} &= \sum_j b_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|\end{aligned}$$

Restreint au sous-espace de dimension 2 généré par  $|\phi_m\rangle$  et  $|\phi_n\rangle$ ,  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont des opérateurs constants :

$$\begin{aligned}\hat{A} &= a_n \hat{I} \\ \hat{B} &= b_n \hat{I}\end{aligned} \quad (\text{dans le sous-espace } \{|\phi_m\rangle, |\phi_n\rangle\})$$

Dans ce sous-espace nous pouvons construire l'opérateur

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |\phi_m\rangle \langle \phi_n| + |\phi_n\rangle \langle \phi_m|$$

Cet opérateur est hermitique, et commute avec  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  puisque  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont constants.

Mais  $\hat{W}$  ne peut pas s'exprimer comme fonction de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  puisque dans ce sous-espace

$$f(\hat{A}, \hat{B}) = f(a_n, b_n) \hat{I} \neq \hat{W}$$

Nous avons atteint une contradiction, puisque par hypothèse  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  forment un ECOC.

## 5.5 Représentations des états

Le concept de ECOC est très important en mécanique quantique. L'unicité de la base  $\{|\phi_n\rangle\}$  nous permet de représenter un élément de la base par

l'ensemble  $\{a_n, b_n, c_n, \dots\}$ . des valeurs propres de  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ , puisqu'à chaque  $|\phi_n\rangle$  correspond un ensemble de valeurs propres  $\{a_n, b_n, c_n, \dots\}$  différent.

Considérons maintenant un état  $|\phi\rangle$  quelconque. Nous avons déjà vu que l'amplitude de probabilité de mesurer sur cet état les valeurs  $\{a_n, b_n, c_n, \dots\}$  est donnée par  $|\langle\phi_n|\phi\rangle|^2$ , puisque  $|\phi_n\rangle$  est l'état propre correspondant à cet ensemble de valeurs propres de  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ .

Nous pouvons donc indiquer cette amplitude par

$$\langle\phi_n|\phi\rangle \equiv f(a_n, b_n, c_n, \dots) \quad (78)$$

où nous avons introduit une fonction  $f(a, b, c, \dots)$  qui est définie seulement si ses arguments  $a, b, c, \dots$  prennent des valeurs parmi les valeurs propres  $\{a_n, b_n, c_n, \dots\}$ . En général  $f(a, b, c, \dots)$  pourrait être définie sur un ensemble discret de valeurs de ses arguments.

Grâce à l'unicité de la base générée par un ECOOC, l'expression (78) nous dit que  $f$  est une fonction complètement définie. Elle peut donc être utilisée pour représenter l'état  $|\phi\rangle$ . On dit que  $|\phi\rangle$  est donné par  $f(a, b, c, \dots)$  dans la représentation des observables  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ .

Prenons un exemple que nous connaissons déjà : considérons l'opérateur de position  $\hat{x}$ .  $\hat{x}$  forme un ECOOC à lui seul. En effet, par exemple  $\hat{p}$  ne commute pas avec  $\hat{x}$  puisque  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ . En plus, toutes les quantités physiques d'une particule (sans spin) peuvent s'exprimer comme fonctions de  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  (par exemple le moment cinétique orbital).

Donc la base des états propres  $|x\rangle$  tels que

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

est unique. Nous pouvons donc représenter  $|\phi\rangle$  par

$$f(x) = \langle x|\phi\rangle$$

où  $f(x)$  est une fonction définie sur tout le spectre de  $\hat{x}$ , c'est-à-dire tous les nombres réels. Mais nous avons déjà défini la fonction d'onde de Schrödinger ainsi.

Le concept de représentation sur une base d'états propres d'un ECOOC est donc la généralisation, à un ensemble d'observables complet, de la notion de fonction d'onde relativement à l'observable position  $\hat{x}$ . Un changement de représentation correspond donc simplement à un changement (unitaire) de base de l'espace de Hilbert des états, pour passer d'une base d'états propres d'un ECOOC à une base d'états propres d'un autre ECOOC distinct du premier. Nous verrons par la suite un exemple, relativement au passage entre représentations des positions et des impulsions.

## Spectre continu

Nous allons maintenant généraliser les idées d'états propres d'une observable et de représentation spectrale d'une observable, au cas où le spectre (l'ensemble) des valeurs propres est continu. Nous utiliserons comme exemple l'opérateur de position, mais une généralisation à une observable quelconque est immédiate.

Cherchons un état propre  $|\phi_{x_0}\rangle$  de  $\hat{x}$ , c'est-à-dire tel que

$$\hat{x}|\phi_{x_0}\rangle = x_0|\phi_{x_0}\rangle$$

Nous savons comment  $\hat{x}$  agit sur les fonctions d'onde, c'est-à-dire dans la représentation de la position. Pour une fonction d'onde quelconque  $\phi(x)$  nous avons

$$\hat{x}\phi(x) = x\phi(x)$$

Considérons maintenant l'état  $|\phi_{x_0}\rangle$ . Sa fonction d'onde est donnée par  $\phi_{x_0}(x)$ .

Par la définition d'état propre nous avons

$$\hat{x}\phi_{x_0}(x) = x_0\phi_{x_0}(x)$$

et par la définition d'opérateur de position

$$\hat{x}\phi_{x_0}(x) = x\phi_{x_0}(x)$$

d'où

$$(x - x_0)\phi_{x_0}(x) = 0$$

Donc

$$\phi_{x_0}(x) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases} \quad (79)$$

La valeur infinie est nécessaire puisque toute valeur finie donnerait lieu à une norme nulle pour le vecteur  $|\phi_{x_0}\rangle$ .

La fonction (79) n'est pas une fonction  $L^2(\mathbb{R})$ . Il faut donc introduire une extension de  $L^2(\mathbb{R})$  pour inclure ces nouvelles fonctions d'onde. L'orthogonalité entre  $|\phi_{x_0}\rangle$  et  $|\phi_{x_1}\rangle$  ( $x_0 \neq x_1$ ) est déjà assurée : il suffit d'écrire le produit scalaire dans la représentation des positions :

$$\langle \phi_{x_0} | \phi_{x_1} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_{x_0}^*(x) \phi_{x_1}(x) = 0 \quad \text{d'après (79)}$$

Pourtant,  $\langle \phi_{x_0} | \phi_{x_0} \rangle$  n'est pas défini. Pour comprendre la nature des  $|\phi_{x_0}\rangle$ , considérons un état  $|\phi\rangle$  quelconque. Sa fonction d'onde est donnée par

$$\phi(x) = \langle \phi_x | \phi \rangle$$

Ecrivons ce produit scalaire en représentation des positions

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \langle \phi_x | \phi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \phi_x^*(x') \phi(x') \quad \text{pour } \phi(x) \text{ quelconque}\end{aligned}$$

Nous connaissons déjà un objet mathématique qui a cette propriété. C'est la fonction "delta" de Dirac

$$\phi_x(x') = \delta(x - x')$$

Dans cette expression on reconnaît la représentation des positions de  $|\phi_x\rangle$ , c'est-à-dire,

$$\phi_x(x') = \langle \phi_{x'} | \phi_x \rangle = \delta(x - x')$$

Nous avons donc trouvé la relation d'orthonormalité généralisée, pour les états  $|\phi_x\rangle$ . Il faut accepter que ces états ne sont pas normés à 1. On peut vérifier facilement que, grâce aux propriétés de la "delta" de Dirac, la notion de probabilité est toujours valable.

Une relation de complétude pour la base  $\{|\phi_x\rangle\}$  est aussi valable :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_x\rangle \langle \phi_x| = \hat{I}$$

Vérifions-la :

$$\begin{aligned}|\phi\rangle &= \int dx' |\phi_{x'}\rangle \langle x' | \phi \rangle \\ &= \int dx' |\phi_{x'}\rangle \phi(x')\end{aligned}$$

En représentation des positions

$$\begin{aligned}\phi(x) \equiv \langle \phi_x | \phi \rangle &= \langle \phi_x | \int dx' |\phi_{x'}\rangle \phi(x') \\ &= \int dx' \langle \phi_x | \phi_{x'} \rangle \phi(x') \\ &= \int dx' \delta(x - x') \phi(x') \\ &= \phi(x)\end{aligned}$$

Pour conclure, il faut toujours se souvenir du parallèle entre le cas d'une observable avec valeurs propres discrètes et celui avec valeurs propres continues :

	Spectre discret	Spectre continu
Normal	$\langle a_m   a_n \rangle = \delta_{mn}$	$\langle \phi_x   \phi_{x'} \rangle = \delta(x - x')$
Complétude	$\sum_n  a_n\rangle \langle a_n  = \hat{I}$	$\int_{-\infty}^{\infty} dx  \phi_x\rangle \langle \phi_x  = \hat{I}$

## Représentation des impulsions

L'opérateur quantité de mouvement  $\hat{p}$  forme aussi un ECOC à lui seul. On peut donc trouver une base d'états propres de  $\hat{p}$ ,  $\{|\phi_p\rangle\}$  telle que

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

Dans la représentation des positions, pour une fonction d'onde quelconque, nous avons

$$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)$$

Or, pour  $|\phi_p\rangle$  nous avons

$$\phi_p(x) = \langle\phi_x|\phi_p\rangle$$

et

$$\begin{aligned}\hat{p}\phi_p(x) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi_p(x) \quad (\text{définition de } \hat{p}) \\ \hat{p}\phi_p(x) &= p\phi_p(x) \quad (\text{définition d'état propre})\end{aligned}$$

ce qui implique

$$\frac{\partial}{\partial x}\phi_p(x) = i\frac{p}{\hbar}\phi_p(x)$$

La solution de cette équation est

$$\phi_p(x) = \frac{1}{N}e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

où nous avons introduit une constante de normalisation  $N$ . Calculons la normalisation

$$\begin{aligned}\langle\phi_{p_0}|\phi_{p_1}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_{p_0}^*(x)\phi_{p_1}(x) \quad \text{en représentation des positions} \\ &= \frac{1}{|N|^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\frac{p_1-p_0}{\hbar}x} \\ &= \frac{2\pi}{|N|^2} \delta\left(\frac{p_1-p_0}{\hbar}\right) \quad (\text{voir série 2})\end{aligned}$$

Ces états propres sont caractérisés par la relation d'orthogonalité donnée par la fonction "delta" de Dirac, comme pour les états  $|\phi_x\rangle$ .

Vérifions la relation de complétude

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi_p\rangle\langle\phi_p| = \hat{I}$$

Il faut donc que, pour  $|\phi\rangle$  quelconque,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |\phi_p\rangle \langle \phi_p | \phi \rangle = |\phi\rangle$$

En représentation des positions

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle \phi_x | \phi_p \rangle \langle \phi_p | \phi \rangle &= \langle \phi_x | \phi \rangle \\ \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{e^{i\frac{p}{\hbar}x}}{N} \tilde{\phi}(p) &= \phi(x) \end{aligned} \quad (80)$$

Où nous avons indiqué la représentation des impulsions des  $|\phi\rangle$  avec  $\tilde{\phi}(p)$ . D'après (80) on voit que  $\phi(x)$  et  $\tilde{\phi}(p)$  sont liés par la transformée de Fourier. En représentation des impulsions, par contre,

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(p) \equiv \langle \phi_p | \phi \rangle &\stackrel{\text{complétude}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle \phi_p | \phi_{p'} \rangle \langle \phi_{p'} | \phi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{2\pi}{|N|^2} \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \tilde{\phi}(p') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{2\pi\hbar}{|N|^2} \delta(p'-p) \tilde{\phi}(p') \\ &= \frac{2\pi\hbar}{|N|^2} \tilde{\phi}(p) \end{aligned}$$

Il faut donc que  $|N|^2 = 2\pi\hbar$  et  $N = \sqrt{2\pi\hbar}$  (avec une phase complexe arbitraire que nous avons choisie = 0).

On a donc

$$\langle \phi_x | \phi_p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

Comment agit  $\hat{x}$  sur  $\tilde{\phi}(p)$ ? Calculons-le en représentation des impulsions :

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_p | \hat{x} | \phi \rangle &= \langle \phi_p | \hat{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\phi_{x'}\rangle \langle \phi_{x'} | \phi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' \langle \phi_p | \phi_{x'} \rangle \langle \phi_{x'} | \phi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px'}{\hbar}} \phi(x') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px'}{\hbar}} \right) \phi(x') \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px'}{\hbar}} \phi(x') \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle \phi_p | \phi \rangle \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\phi}(p) = \hat{x} \tilde{\phi}(p)
 \end{aligned}$$

Pour éliminer la constante  $\hbar$  des calculs, on définit souvent

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

où  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  est le “vecteur d’onde” lié à la longueur d’onde de de Broglie  $\lambda$ . Ainsi, les expressions ci-dessus sont toutes valables, en posant  $\hbar \rightarrow 1$ .

Par exemple :

$$\langle \phi_x | \phi_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

où  $\hat{k}|\phi_k\rangle = k|\phi_k\rangle$  etc...

## Résumé des représentations de $\hat{x}$ et $\hat{p}$

Représentation de $\hat{x}$	Représentation de $\hat{p}$
$\hat{x} \phi_x\rangle = x \phi_x\rangle$	$\hat{p} \phi_p\rangle = p \phi_p\rangle$
$\langle\phi_x \phi_{x'}\rangle = \delta(x - x')$	$\langle\phi_p \phi_{p'}\rangle = \delta\left(\frac{p - p'}{\hbar}\right)$
$\langle\phi_x \phi\rangle \equiv \phi(x)$	$\langle\phi_p \phi\rangle \equiv \tilde{\phi}(p)$
$\int_{-\infty}^{\infty} dx  \phi_x\rangle\langle\phi_x  = \hat{I}$	$\int_{-\infty}^{\infty} dp  \phi_p\rangle\langle\phi_p  = \hat{I}$
$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)$	$\hat{x}\tilde{\phi}(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\phi}(p)$
$\hat{x}\phi(x) = x\phi(x)$	$\hat{p}\tilde{\phi}(p) = p\tilde{\phi}(p)$
$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\phi}(p)$	$\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{px}{\hbar}} \phi(x)$
$\langle\phi_x \phi_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$	

Equation de Schrödinger (particule libre)

$$i\hbar\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,t)$$

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\phi}(p,t)}{\partial t} = -\frac{p^2}{2m}\tilde{\phi}(p,t)$$

Equation de Schrödinger (oscillateur harmonique)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\phi(x) = E\phi(x)$$

$$\frac{p^2}{2m}\tilde{\phi}(p) - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2\tilde{\phi}(p)}{\partial p^2} = E\tilde{\phi}(p)$$