Universite Chouaib Doukkali
Faculte des Sciences
El Jadida

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Ahmed Jellal[1]

Cours

Mecanique Quantique

Quantum Mechanics: A fundamental theory of matter and energy that explains facts, which previous physical theories were unable to account for. In particular the fact that energy is absorbed and released in small, discrete quantities (quanta), and that all matter displays both wavelike and particlelike properties, especially when viewed at atomic and subatomic scales. Quantum mechanics suggests that the behavior of matter and energy is inherently probabilistic and that the effect of the observer on the physical system being observed must be understood as a part of that system. Also called quantum physics, quantum theory.

[1]jellal.ucd@gmail.com

Contents

1 Rappels Et Complements 1

1.1 Introduction . . . 1

1.1.1 But et objets de la mécanique quantique . . . 1

1.1.2 Mécaniques classique et quantique . . . 1

1.1.3 Prérequis supposés . . . 1

1.1.4 Conseils . . . 2

1.1.5 Références . . . 2

1.2 Particule Quantique à une Dimension . . . 2

1.2.1 Introduction . . . 2

1.2.2 Espace des états . . . 2

1.2.3 Opérateurs différentiels . . . 5

1.2.4 Evolution d'un état quantique . . . 6

1.2.5 Bases . . . 7

1.2.6 Spectre d'un opérateur . . . 10

1.3 Théorie De La Symétrie . . . 15

1.3.1 Générateur $\hat{H}$ du translation dans le temps . . . 16

1.3.2 Groupe des translations des états quantiques en espace . . . 18

1.3.3 Groupe des translations en impulsion . . . 19

1.3.4 Générateurs en mécanique classique . . . 19

Chapitre 1

Rappels Et Complements

1.1 Introduction

1.1.1 But et objets de la mécanique quantique

Le rôle de la mécanique quantique est de décrire le comportement et donner les lois d'évolution des constituents microscopiques de la matière. Plus précisément, les phénomènes quantiques se manifestent pour des objets de petites tailles Δx et/ou de petites impulsions Δp, tels que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2} \tag{1.1}$$

avec $h = 6.62610^{-34}$Js est la constante de Plank.

1.1.2 Mécaniques classique et quantique

- En mécanique classique une particule est un objet ponctuel décrit par un point $(\vec{x}, \vec{p})$ dans l'espace de phase (position, impulsion).
- En mécanique quantique une particule est un objet étendu, décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$.
- Le rôle de la mécanique quantique est de donner les lois qui gouverne l'évolution de ces objets. Ce sont les équations de Hamilton (ou Newton) dans le cas classique et l'équation de Schrödinger ou bien équation de Heisenberg dans le cas quantique.

Mécanique	Classique	Quantique
Non relativiste	Mécanique de Newton (1687)	Mécanique quantique(1925)
Relativiste	Relativité restreinte (1905) Equations de Maxwell (1865)	Théorie quantique des champs ($\geq$1930)
Relativité Générale	Relativité générale (1916)	... ? théorie des cordes ?...

1.1.3 Prérequis supposés

- En mathématiques : Notion d'espace vectoriel et de transformée de Fourier, théorie des matrices.
- En physique : Mécanique analytique et Hamiltonienne.
- En mécanique quantique : Cours et TD de DEUG

1.1.4 Conseils

- Travailler le cours avec des livres.
- Préparer TD à l'avance.

1.1.5 Références

- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë, *Mécanique Quantique*
- Richard Feynmann, *Mécanique Quantique*
- Albert Messiah, *Mécanique Quantique*
- Jean-Luis Basvedant, *Mécanique Quantique*
- Edgard Elbaz, *Mécanique Quantique*

1.2 Particule Quantique à une Dimension

1.2.1 Introduction

Rappel concerant une particule en mouvement sur l'axe x :

- La particule quantique est isolée de son environnement, c'est à dire elle n'exerce aucune force sur le reste de la nature.
- Son envirenement exerce sur elle une certaine force
$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \tag{1.2}$$
avec $V(x)$ est l'énergie potentielle.
- Particule quantique est considérée comme une onde (un objet étendu et non ponctuel).

  Exemples :

  ✓ Atome vibrant au coeur d'un matériau ou dans une molécule soumis aux forces des atomes voisins.

  ✓ Electron libre se déplaçant dans un fil conducteur.

1.2.2 Espace des états

1.2.2.1 Espace vectoriel des fonctions d'onde

Définition :

Une fonction d'onde est un outil mathématique à valeur complexe qui permet de décrire l'état spatial d'une particule. Pour un espace d'une dimension paramétré par la position $x \in \mathbb{R}$, une fonction d'onde est
$$\psi : x \longrightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}. \tag{1.3}$$

L'ensemble des fonctions d'ondes noté $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel complexe. En effet, si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$, alors
$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H} : \qquad \text{Somme} \tag{1.4}$$
$$\phi = \lambda\psi_1 \in \mathcal{H} : \qquad \text{Produit} \tag{1.5}$$

NB : $\mathcal{H}$ est un espace vectoriel de dimension infnie car ψ est détérminée par les valeurs de $\psi(x)$ prises en une infinité de valeurs différentes de x.

Notation de Dirac :
Eqs. (1.4) et (1.5) deviennent

$$| \varphi\rangle =| \psi_1\rangle+ | \psi_2\rangle \tag{1.6}$$
$$| \phi\rangle = \lambda \mid \psi_1\rangle. \tag{1.7}$$

Rien est nouveau dans cette notation juste question de simplification.

Complément :

- Un groupe est un ensemble G munit d'une loi interne notée $(\cdot)$: $(G, G) \longrightarrow G$, dont les élements vérifiant
  - ✓ Associative $\forall a, b, c \in G, \qquad a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$
  - ✓ Identité $\mathbb{I}$: $\forall g \in G, \qquad \mathbb{I} \cdot g = g \cdot \mathbb{I} = g$
  - ✓ Inverse : $\forall g \in G\ \exists g^{-1} \in G, \qquad g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = \mathbb{I}$
- Group commutatif : $\forall g, h \in G, \qquad g \cdot h = h \cdot g$
- Espace vectoriel complexe E est un ensemble munit d'une loi interne notée $+$ tel que $(E, +)$ est un group commutatif et munit d'une loi externe notée $(\cdot)$: $(\mathbb{C}, E) \longrightarrow E$ qui est distributive par rapport à la lois $+$: $\lambda \cdot (\nu + \omega) = \lambda \cdot \nu + \lambda \cdot \omega$.
- Espace vectoriel réel si la loi externe est : $(\mathbb{R}, E) \longrightarrow E$.
- Espace vectoriel sur $\mathbb{K}$ est un ensemble non vide E munit d'une loi interne

$$E \times E \longrightarrow E, \qquad (x, y) \longrightarrow x + y \tag{1.8}$$

  et une loi externe

$$(\mathbb{K}, E) \equiv \mathbb{K} \times E \longrightarrow E, \qquad (\alpha, y) \longrightarrow \alpha x \tag{1.9}$$

  tels que :

  - ✓ (E,+) est un groupe commutatif (abélien)
  - ✓ $\forall x, y \in \mathbb{E}$, $\forall \alpha,\ \beta \in \mathbb{K}$

$$\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y \tag{1.10}$$
$$(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x \tag{1.11}$$
$$(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x) \tag{1.12}$$
$$\mathbb{I}x = x \tag{1.13}$$

Exemples :

Ondes planes :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}\right) \tag{1.14}$$
$$\equiv \mid p\rangle : \text{notation de Dirac} \tag{1.15}$$

avec l'impulsion $p \in \mathbb{R}$.

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

$$\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)}{2\sigma^2}\right) \tag{1.16}$$
$$\equiv \mid x_0, p_0, \sigma\rangle : \text{notation de Dirac.} \tag{1.17}$$

1.2.2.2 Produit scalaire

Le produit scalaire de deux fonctions d'ondes $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est le nombre complexe noté $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$:

$$\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}_1(x)\psi_2(x)dx \tag{1.18}$$

avec $\overline{\psi}_1(x)$ est le nombre complexe conjugué de $\psi_1(x)$.

Propriétés :

$$|\langle\psi \mid \varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi \mid \varphi\rangle\langle\varphi \mid \psi\rangle \ : \qquad \text{Inégalité de Schwartz} \tag{1.19}$$

$$\| \psi + \varphi \| \leq \| \psi \| + \| \varphi \| : \qquad \text{Inégalité triangulaire} \tag{1.20}$$

avec $\| \psi \|$ est la norme de la fonction ψ.

Par définition, un produit scalaire $\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ sur un espace vectoriel $\mathcal{H}$ doit vérifer les propriétés suivantes :

1. $\langle\psi_2 \mid \psi_1\rangle = \overline{\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle}$: Complexe conjugué.
2. $\langle\psi_1 \mid \lambda\psi + \mu\varphi\rangle = \lambda\langle\psi_2 \mid \psi\rangle + \mu\langle\psi_1 \mid \varphi\rangle$: Linéarité à droite
3. $\langle\psi \mid \psi\rangle \geq 0$ avec égalité si et seulement si $\mid \psi\rangle = 0$

ψ_1 et ψ_2 sont orthogonales si $\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = 0$.

En géométrie Euclidienne: $\| \psi \|^2 = \langle\psi \mid \psi\rangle$ définit la norme au carré de la fonction ψ :

$$\| \psi \|^2 = \langle\psi \mid \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 > 0 \tag{1.21}$$

Remarques :

- Il y a des fonctions dont la norme est infinie comme par exemple l'onde plane :

$$\langle\psi_p|\psi_p\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{h} dx = \infty.$$

- Le sous espace des fonctions pour lesquelles la norme est finie est appelé espace de Hilbert des fonctions d'ondes (espace des fonctions de carré sommable) noté $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

Propriétés :

Pour $\lambda \in \mathbb{C}$, on a

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\langle\psi_2|\psi_1\rangle} \tag{1.22}$$

$$\langle\lambda\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\lambda}\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle \tag{1.23}$$

$$\langle\psi_1 + \psi_2|\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_3\rangle + \langle\psi_2|\psi_3\rangle \tag{1.24}$$

Exemples :

- $\mathcal{H} = L^2([0, L])$: espace des fonctions de carré sommable $\psi(x)$ décrivant une particule confinnée dans le segmant $x \in [0, L]$.
- $\mathcal{H} = L^2(S^1)$: espace des fonctions de carré sommable périodiques $\psi(\theta)$, où θ est la position angulaire sur un fil circulaire où la particule est confinée.

1.2.2.3 Espace dual

L'opération notée $\langle\phi|$:

$$\langle\phi| : \mathcal{H} \to \mathbb{C}, \qquad |\psi\rangle \to \langle\phi|\psi\rangle \tag{1.25}$$

alors $\langle\phi|$ est dite forme linéaire sur $\mathcal{H}$ car

$$\langle\phi|\lambda\psi_1 + \mu\psi_2\rangle = \lambda\,\langle\phi|\psi_1\rangle + \mu\,\langle\phi|\psi_2\rangle \tag{1.26}$$

ou aussi appelé un vecteur dual. L'espace des vecteurs duaux noté $\mathcal{H}^*$ est dit espace dual. Le vecteur dual $\langle\phi|$ est aussi appelé bra selon la notation de Dirac.

Conclusion : à partir d'un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, on peut construire un vecteur dual $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$. Par exemple, on peut avoir

$$|\phi\rangle = \lambda\,\langle\psi_1| + \mu\,|\psi_2\rangle \tag{1.27}$$

$$\Longrightarrow \langle\phi| = \overline{\lambda}\,\langle\psi_1| + \overline{\mu}\,\langle\psi_2|\,. \tag{1.28}$$

1.2.3 Opérateurs différentiels

1.2.3.1 Définitions

Un opérateur transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur). C'est donc une opération dans l'espace des fonctions d'ondes $\mathcal{H}$.

- Opérateur de position $\hat{x}$:

$$|\phi\rangle = \hat{x}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \phi(x) = x\psi(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.29}$$

- Opérateur d'impulssion $\hat{p}$:

$$|\phi\rangle = \hat{p}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \phi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}, \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.30}$$

- Opérateur Hamiltonien $\hat{H}$:

$$|\phi\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{1.31}$$

$$\Longrightarrow \phi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.32}$$

1.2.3.2 Opérateurs linéaires

Définition :
$\hat{T}$ est un opérateur linéaire si $\forall\,|\psi_1\rangle\,, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ et $\forall\lambda \in \mathbb{C}$, on a

$$\hat{T}(\lambda\,|\psi_1\rangle) = \lambda(\hat{T}\,|\psi_1\rangle) \tag{1.33}$$

$$\hat{T}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{T}\,|\psi_1\rangle + \hat{T}\,|\psi_2\rangle \tag{1.34}$$

Exemples : $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$
Remarques :

- L'ensemble des opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel, noté $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.
- Si $\hat{T}_1$ et $\hat{T}_2$ sont deux opérateurs linéaires alors $\hat{T}_1\hat{T}_2$ (la composition) est aussi linéaire.

1.2.3.3 Opérateurs adjoints et autoadjoints

Dans la suite on note $\hat{T}\left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H}$ par $\left|\hat{T}\psi\right\rangle$, qui signifie la même chose.

Définition 1 :

$\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ est un opérateur linéaire, l'opérateur adjoint de $\hat{T}$ est l'opérateur linéaire, noté $\hat{T}^\dagger$, vérifiant

$$\left\langle \phi \middle| \hat{T}^\dagger \psi \right\rangle = \left\langle \hat{T}\phi \middle| \psi \right\rangle, \qquad \forall \left|\phi\right\rangle, \left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.35}$$

Propriétés :

$$\left(\hat{T}^\dagger\right)^\dagger = \hat{T} \tag{1.36}$$

$$\left(\hat{T}_1\hat{T}_2\right)^\dagger = \hat{T}_2{}^\dagger\hat{T}_1{}^\dagger \tag{1.37}$$

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_2\right)^\dagger = \hat{T}_1{}^\dagger + \hat{T}_2{}^\dagger \tag{1.38}$$

$$\left(\hat{T}^n\right)^\dagger = \left(\hat{T}^\dagger\right)^n, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{1.39}$$

Définition 2 :

$\hat{T}$ est autoadjoint ou hermitique si $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$, c'est à dire

$$\left\langle \phi \middle| \hat{T}\psi \right\rangle = \left\langle \hat{T}\phi \middle| \psi \right\rangle \tag{1.40}$$

Exemples :

$\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$ sont des opérateurs autoadjoints. En effet $\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$ on a :

Pour $\hat{x}$:

$$\left\langle \phi \middle| x^\dagger \psi \right\rangle = \langle \hat{x}\phi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{x\phi}\psi dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi} x\psi dx = \langle \phi|\hat{x}\psi\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad x^\dagger = \hat{x} \tag{1.41}$$

Pour $\hat{p}$:

$$\left\langle \phi \middle| \hat{p}^\dagger \psi \right\rangle = \langle \hat{p}\phi|\psi\rangle = \int \overline{-i\hbar\frac{d\phi}{dx}}\psi dx = -i\hbar \int \overline{\phi}\frac{d\psi}{dx}dx = \langle \phi|\hat{p}\psi\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{p}^\dagger = \hat{p} \tag{1.42}$$

où on a utilisé la formule d'intégration par partie à savoir

$$i\hbar\left[\overline{\phi}\psi\right]_{-\infty}^{+\infty} = i\hbar\int \overline{\frac{d\phi}{dx}}\psi dx + i\hbar\int \overline{\phi}\frac{d\psi}{dx}dx = 0 \tag{1.43}$$

Pour $\hat{H}$:

$$\hat{H}^\dagger = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)^\dagger = \left(\frac{p^2}{2m}\right)^\dagger + (V(x))^\dagger = \hat{H} \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{H}^\dagger = \hat{H}. \tag{1.44}$$

1.2.4 Evolution d'un état quantique

La particule évoluant au cours du temps t est décrite par l'équation de Schrödinger. Cette équation donne la loi d'évolution du vecteur $\left|\psi(t)\right\rangle$ dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$i\hbar\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle \tag{1.45}$$

ou en terme de fonction d'onde

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t), \qquad \forall x,t \tag{1.46}$$

avec $\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$.

Remarques :

- On utiluse la dérivée droite $\frac{d}{dt}$ s'il s'agit d'une seule variable comme dans Eq. (1.45) et la dérivée partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ s'il y a plusieurs variable comme dans Eq. (1.46).
- Eq. (1.45) donne la modification instantanée de l'onde à un instant précis. Pour cela $\hat{H}$ est dit générateur de l'évolution temporelle.
- Equivalence de Eq. (1.45) en mécanique classique sont les équations du mouvement de Hamilton.
- Eq. (1.45) est linéaire car $\begin{cases} |\phi_1(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + |\psi_2(t)\rangle \\ |\phi_2(t)\rangle = \lambda\,|\psi(t)\rangle \end{cases}$
- La fonction d'onde conserve sa norme au cours du temps $\parallel \psi \parallel^2 = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \text{cte}$.

En effet, d'après Eq. (1.45) on a

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle = \left\langle\frac{d\psi}{dt}\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\middle|\frac{d\psi}{dt}\right\rangle = \left\langle -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\psi\middle|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\middle| -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\psi\right\rangle = 0$$

car $\hat{H}$ est Hermitien ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$).

Exercice : montrer que le produit scalaire est conservé $\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle = \text{cte}$.

NB : En général, il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger sauf pour quelques cas particuliers.

1.2.5 Bases

1.2.5.1 Base orthonormée

Définition :

L'ensemble des vecteurs $\{|V_i\rangle \in \mathcal{H},\ i = 1, 2, \cdots\}$ forme une base orthonormée (b.o.n.) de l'espace $\mathcal{H}$, si

$$\langle V_i|V_j\rangle = \delta_{ij}, \qquad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

et pour tout $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ doit se décomposer sur cette base

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1,2,\cdots} \phi_i\,|V_i\rangle\,, \qquad \phi_i \in \mathbb{C} \tag{1.47}$$

où les composentes ϕ_i sont donneés par le produit scalaire

$$\phi_i = \langle V_i|\phi\rangle\,. \tag{1.48}$$

En effet,

$$\langle V_i|\phi\rangle = \sum_j \phi_j\,\langle V_i|V_j\rangle = \sum_j \phi_j\delta_{ij} = \phi_i. \tag{1.49}$$

Remarques :

- Dimension $\mathcal{H} = \infty$ (infinie) si l'ensemble $\{|V_i\rangle, i = 1, 2, \cdots\}$ est infinie.
- Dimension $\mathcal{H} = N < \infty$ si l'ensemble $\{|V_i\rangle, i = 1, 2, \cdots, N\}$ est finie.

Exemples :

- $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ de dimension infinie ∞.
- Espace de Hilbert de spin 1/2 est de dimension finie $N = 2$ (voir plus loin).

D'après Eqs. (1.47) et (1.48), la norme de $|\phi\rangle$ est

$$\langle\phi|\phi\rangle = \sum_i \mid \phi_i \mid^2 \tag{1.50}$$

car

$$\langle\phi|\phi\rangle = \left(\sum_i \overline{\phi}_i \langle V_i|\right)\left(\sum_j \phi_j |V_j\rangle\right) = \sum_{ij} \overline{\phi}_i \phi_j \langle V_i|V_j\rangle = \sum_i \overline{\phi}_i \phi_i = \sum_i \mid \phi_i \mid^2 . \tag{1.51}$$

On peut représenter le vecteur $|\phi\rangle$ par le tableau de composantes complexes (ou vecteur colonne) par rapport à la base $|Vi\rangle$:

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

Remarque : Si on choisit une autre basse, $|\phi\rangle$ aura d'autres composantes.

Exemple :

Considérons une particule confinée sur un cercle S^1 dont l'espace de Hilbert (espace des fonctions de carré sommable) est

$$\mathcal{H} = L^2\left(S^1\right).$$

Si le fil est de circonférence L, et x est la position le long du fil, alors $\mathcal{H}$ est l'espace des fonctions périodiques vérifiant la condition :

$$\phi(x + L) = \phi(x).$$

On montre que l'ensemble des fonctions

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}}, \qquad k \in \mathbb{Z} \tag{1.52}$$

forme une b.o.n. de $\mathcal{H} = L^2(S^1)$. En effet,

- L'orthogonalité :

$$\langle V_k|V_l\rangle = \int_0^L V_k^*(x) V_l(x) dx = \frac{1}{L}\int_0^L e^{i(l-k)\frac{2\pi x}{L}} dx$$

avec $\langle V_k|V_l\rangle = \begin{cases} 0, & \text{si } k \neq l \\ 1, & \text{si } k = l \end{cases}$

- D'après le théorème des séries de Fourier, toute fonction périodique $\phi(x)$ de carré sommable peut se décomposer sous la forme :

$$\phi(x) = \sum_k \frac{\phi_k}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}} = \sum_k \phi_k V_k(x).$$

Remarque : $\{|V_k\rangle\}$ est appelé base de Fourier de $\mathcal{H} = L^2(S^1)$.

1.2.5.2 Relation de fermeture

Suivant Eq. (1.47) et Eq. (1.48), on a

$$|\phi\rangle = \sum_i (\langle V_i|\phi\rangle)\,|V_i\rangle$$

On peut également écrire

$$|\phi\rangle = \sum_i |V_i\rangle\,(\langle V_i|\phi\rangle) = \left(\sum_i |V_i\rangle\,\langle V_i|\right)|\phi\rangle$$

ce qui implique

$$\sum_i |V_i\rangle\,\langle V_i| = \mathbb{I}. \tag{1.53}$$

Cette relation laisse le vecteur $|\phi\rangle$ inchangé et peut être considérée comme l'opérateur identité, elle est dite relation de fermeture.

Remarques :

- Eq. (1.53) peut se comprendre comme suit. Posons

  $$\hat{P}_i = |V_i\rangle\,\langle V_i| \Longrightarrow \hat{P}_i\,|\phi\rangle = |V_i\rangle\,\langle V_i|\phi\rangle = (\langle V_i|\phi\rangle)\,|V_i\rangle$$

  on voit que $\hat{P}_i$ est un opérateur qui transforme $|\phi\rangle$ en $\hat{P}_i\,|\phi\rangle$, c'est-à-dire $|\phi\rangle$ a une projetction orthogonale sur le vecteur de base $|V_i\rangle$.

- Un projecteur orthogonal vérifiant les proprietés suiavantes :

  $$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i, \qquad \hat{P}_i^\dagger = \hat{P}_i$$

- $\sum_i \hat{P}_i = \mathbb{I}$

1.2.5.3 Expression d'un opérateur dans une base

En général, les éléments de matrice d'un opérateur $\hat{O}$ dans une $\{|V_i\rangle\}$ sont :

$$O_{ij} = \langle V_i|\,\hat{O}\,|V_j\rangle\,, \qquad i,j = 1,2,\cdots$$

avec O_{ij} sont les élements d'une matrice O. Si $\hat{O}\,|\psi\rangle = |\phi\rangle$, alors les composantes ϕ_i de $|\phi\rangle$ s'obtiennent à partir des composantes ψ_i de $|\psi\rangle$ par

$$\phi_i = \sum_j O_{ij}\psi_j.$$

En effet,

$$\phi_i = \langle V_i|\phi\rangle = \langle V_i|\,\hat{O}\,|\psi\rangle = \langle V_i|\,\hat{O}\sum_j |V_j\rangle\,\langle V_j|\psi\rangle = \sum_j \langle V_i|\,\hat{O}\,|V_j\rangle\,\langle V_j|\psi\rangle = \sum_j O_{ij}\psi_j.$$

1.2.5.4 Changement de base

Soient $\{|V_i\rangle\}$ et $\{|W_i\rangle\}$ sont deux b.o.n. différentes de $\mathcal{H}$. Si $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ un vecteur tel que ses composantes sur les deux bases sont

$$\begin{aligned} \phi_i &= \langle V_i|\phi\rangle \\ \widetilde{\phi}_i &= \langle W_i|\phi\rangle \end{aligned} \tag{1.54}$$

alors ϕ_i et $\widetilde{\phi}_i$ sont reliées par

$$\phi_i = \langle V_i|\,\mathbb{I}\,|\phi\rangle = \langle V_i|\sum_j |W_j\rangle\langle W_j|\phi\rangle = \sum_j \langle V_i|W_j\rangle\,\widetilde{\phi}_j = \sum_j O_{ij}\widetilde{\phi}_j$$

où O_{ij} sont les éléments de matrice de la "matrice de changement de base", qui est une matrice unitaire.

1.2.6 Spectre d'un opérateur

1.2.6.1 Définition et propriété

Définition :

Pour tout opérateur linéaire $\hat{T}$, on dit que la fonction $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ est un vecteur propre de l'opérateur $\hat{T}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$ est sa valeur propre, si

$$\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\,|\phi\rangle$$

L'ensemble de ces vecteurs propres et valeurs propres forment le spectre de $\hat{T}$.

Propriétés :

- Si $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$, alors la valeur propre λ est reélle ($\lambda \in \mathbb{R}$).
  Démonstration :

$$\overline{\lambda}\,\langle\phi|\phi\rangle = \langle\lambda\phi|\phi\rangle = \left\langle\hat{T}\phi\middle|\phi\right\rangle = \left\langle\phi\middle|\hat{T}^\dagger\phi\right\rangle = \lambda\,\langle\phi|\phi\rangle \Longrightarrow \overline{\lambda} = \lambda.$$

- Si $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$, $\hat{T}\,|\phi_1\rangle = \lambda_1\,|\phi_1\rangle$ et $\hat{T}\,|\phi_2\rangle = \lambda_2\,|\phi_2\rangle$, avec $\lambda_1 \neq \lambda_2$, alors

$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0.$$

  Démonstration :

$$\langle\phi_2|\,\hat{T}\,|\phi_1\rangle = \lambda_1\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle = \lambda_2\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle \Longrightarrow (\lambda_1 - \lambda_2)\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0 \Longrightarrow \langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0.$$

Remarques :

- Si $\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\,|\phi\rangle$ alors $\left|\phi'\right\rangle = \mu\,|\phi\rangle$ ($\mu \in \mathbb{C}$) est aussi un vecteur propre de $\hat{T}$. En effet,

$$\hat{T}\left|\phi'\right\rangle = \hat{T}(\mu\,|\phi\rangle) = \mu\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\mu\,|\phi\rangle = \lambda\left|\phi'\right\rangle.$$

- La somme de deux vecteurs propres n'est pas un vecteur propre :

$$\hat{T}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = \lambda_1\,|\phi_1\rangle + \lambda_2\,|\phi_2\rangle$$

  sauf si $\lambda_1 = \lambda_2$.

1.2.6.2 Spectre de l'opérateur $\hat{x}$

On a $\langle x|\phi\rangle = \phi(x)$ et $\hat{x}\phi(x) = x\phi(x) \Longleftrightarrow \langle x|\,\hat{x}\,|\phi\rangle = x\,\langle x|\phi\rangle$, donc

$$\begin{cases} \langle x|\,\hat{x} = x\,\langle x| \\ \hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle \end{cases} \tag{1.55}$$

avec $|x\rangle$ le est vecteur propre de l'opérateur $\hat{x}$ associé à la valeur propre x.

Conclusion : Le spectre de l'opérateur $\hat{x}$ est formé par les valeurs propres $x \in \mathbb{R}$, et les états $|x\rangle$ correspondants. On dit que $\hat{x}$ a un spectre continu (car toutes les valeurs de x sont permises, formant un ensemble continu).

Relation de fermeture en position :
$\forall\,|\psi_1\rangle\,,|\psi_2\rangle$, on a

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \overline{\psi_1}(x)\psi_2(x)dx = \int \langle\psi_1|x\rangle\,\langle x|\psi_2\rangle\,dx \tag{1.56}$$

donc

$$\int |x\rangle\,\langle x|\,dx = \mathbb{I} \tag{1.57}$$

c'est la relation de fermeture dans la base position.

Remarques :

- $\phi(x)$ est la composante du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $\{|x\rangle\}$.
- On a

$$\langle x|\phi\rangle = \int \left\langle x\middle|x'\right\rangle \left\langle x'\middle|\phi\right\rangle dx'$$

$$\Longrightarrow$$

$$\phi(x) = \int \delta(x'-x)\phi(x')dx$$

donc

$$\left\langle x\middle|x'\right\rangle = \delta(x'-x)$$

1.2.6.3 Spectre de l'opérateur $\hat{p}$

Pour déterminer les vecteurs propres et valeurs propres il faut résoudre :

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

avec $\phi_p(x) = \langle x|\phi_p\rangle$. Cela donne

$$-i\hbar\frac{d\phi_p(x)}{dx} = p\phi_p(x) \Longrightarrow \phi_p(x) = ce^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

soit $c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$. Le spectre de $\hat{p}$ est constitué par les valeurs propres $p \in \mathbb{R}$ associées aux vecteurs propres noté $|p\rangle$ donnés par les fonctions

$$\phi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \qquad p \in \mathbb{R}$$

Chaque fonction est dite onde plane.

Remarques :

- Le spectre de $\hat{p}$ est continue
- La norme $\langle p|p\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar}dx = \infty$
- $\{|x\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$ sont des vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

1.2.6.4 Transformée de Fourier et relation de fermeture en impulsion

Les composantes du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $\{|p\rangle\}$ sont

$$\langle p|\phi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\phi\rangle \, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \phi(x) dx = \widetilde{\phi}(p)$$

avec $\langle p|\phi\rangle$ est la fonction transformée de Fourier $\widetilde{\phi}(p)$ de la fonction d'onde $\phi(p)$. On dit que $\{|p\rangle\}$ est la basse de Fourier et $\widetilde{\phi}(p)$ est la représentation en impulsion. La relation de Fourier inverse :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{ipx}{\hbar}} \widetilde{\phi}(p) dp$$

qui peut s'écrire en notation de Dirac comme

$$\langle x|\phi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\phi\rangle \, dp$$

ça implique la relation de fermeture dans la base d'impulsion

$$\int |p\rangle \langle p| \, dp = \mathbb{I}. \tag{1.58}$$

On peut écrire la norme de $|\phi\rangle$ soit comme

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|x\rangle \langle x|\phi\rangle \, dx = \int |\phi(x)|^2 dx$$

ou bien

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|p\rangle \langle p|\phi\rangle \, dp = \int |\widetilde{\phi}(p)|^2 dp$$

ce qui conduit à la relation de Parceval

$$\int |\widetilde{\phi}(p)|^2 dp = \int |\phi(x)|^2 dx.$$

L'action de l'opérateur $\hat{p}$:

$$\langle p| \, \hat{p} \, |\phi\rangle = p \, \langle p|\phi\rangle$$

on trouve

$$(\hat{p}\widetilde{\phi})(p) = p\widetilde{\phi}(p).$$

Donc on voit que $\hat{p}$ agit comme une dérivation dans la base de position et comme une multiplication dans la base d'impulsion.

1.2.6.5 Spectre de l'opérateur $\hat{H}$

En général, le Hamiltonien H décrivant une particule dans un espace à une dimension est donné par

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{1.59}$$

Supposons que $|\phi_E\rangle \in \mathcal{H}$ (non nulle) satisfait à l'équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) :

$$\hat{H} \, |\phi_E\rangle = E \, |\phi_E\rangle \tag{1.60}$$

où E est l'énergie associée à l'état $|\phi_E\rangle$.

Onde stationnaire : Au cours du temps, l'onde $|\phi(t)\rangle$ évolue comme suit

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}|\phi(t)\rangle = -i\frac{E}{\hbar}|\phi(t)\rangle .$$

Puisque E est une quantité constante, donc la solution est

$$|\phi(t)\rangle = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}|\phi(0)\rangle \tag{1.61}$$

c'est-à-dire

$$\phi(x,t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\phi(x,0) \tag{1.62}$$

NB : $|\phi(x,t)|$ est constant au cours du temps, seule sa phase change. On dit alors que $|\phi(t)\rangle$ est une onde stationnaire ou un état stationnaire.

Remarques :

- Les ondes sur une corde vibrante sont stationnaires (solutions de $\partial_t^2\phi - c^2\partial_x^2\phi = 0$).
- Les ondes stationnaires (vecteurs propres de $\hat{H}$) sont des solutions particulières.
- Les ondes stationnaires sont importantes pour les raisons suivantes :
  1. Au niveau mathématique, les vecteurs propres de $\hat{H}$ forment une base de l'espace total $\mathcal{H}$.
  2. A température (presque) nulle, un système non isolé se met dans son état de plus basse énergie, qui est l'onde stationnaire de plus basse énergie (état fondamental). A température plus élevée, on montre en physique statistique (loi de Boltzmann) que le système est dans une répartition statistique d'ondes stationnaires de diffiérentes énergies.
  3. Dans les expériences de la spectroscopie (sonder la matière par le rayonnement), on impose une force stationnaire au système (par exemple une onde monochromatique laser sur une molécule), pour la transister vers un état d'énergie spécifique.
- Pour l'opérateur de Schrödinger Eq. (1.59), les vecteurs propres peuvent être choisis comme étant des fonctions réelles $\phi(x)$, car l'équation différentielle est une équation réelle.

Exemple 1 : Particule libre sur l'axe x
Si $V(x) = 0$ alors $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, on a les resultas suivants :

- Les fonctions propres sont les ondes planes $|\phi_E\rangle = |p\rangle$ car $\hat{H}|\phi_E\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|p\rangle$ et donc $E = \frac{p^2}{2m} \geqslant 0$.
- Le spectre est continu, toutes les énergies sont permises, la particule peut partir à l'infini.
- Pour une valeur donnée de E, il y a deux fonctions propres différentes associées $\begin{cases} |p\rangle \\ |-p\rangle \end{cases}$, avec $p = \sqrt{2mE}$. Donc E est 2 fois dégénérée.
- La relation de fermeture : $\int_{\mathbb{R}} |p\rangle\langle p|\, dp = \mathbb{I}$.
- Physiquement $|p\rangle$ correspond à une onde d'énergie E se déplaçant vers la droite, tandis que $|-p\rangle$ vers la gauche.

Exemple 2 : Particule libre sur un cercle

L'espace des fonctions périodiques est $\mathcal{H} = L^2(S^1)$. Pour une particule libre décrite par le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, les fonctions d'onde sont $V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}}$. On a

$$\langle x| \hat{p} |V_k\rangle = -i\hbar \frac{dV_k(x)}{dx} = \frac{2\pi\hbar k}{L} V_k(x) = \frac{\hbar k}{L} V_k(x) = p_k \langle x|V_k\rangle$$

ce qui implique que les valeurs propres de l'impulsion sont discrètes :

$$p_k = \frac{\hbar k}{L}, \qquad k \in \mathbb{Z}$$

et l'énergie est solution de $\hat{H} |V_k\rangle = E_k |V_k\rangle$, donc

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

qui est discrete et deux fois dégénérée (sauf si $k = 0$). La relation de fermeture pour la base $\{|V_k\rangle\}$ est

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}} |V_k\rangle \langle V_k| = \mathbb{I}.$$

Remarque : En général, le spectre de $\hat{H}$ peut avoir une partie discrète et une autre continue.

1.2.6.6 Valeurs moyennes et variance de l'observable

Notons le spectre de l'observable $\hat{A}$ par

$$\hat{A} |\psi_a\rangle = A_a |\psi_a\rangle \tag{1.63}$$

où a est un indice discret ou continu. Dans la base de $\hat{A}$, un vecteur $|\psi\rangle$ quelconque se décompose comme

$$|\phi\rangle = \sum_a \phi_a |\psi_a\rangle, \qquad \phi_a = \langle\psi_a|\phi\rangle. \tag{1.64}$$

On pose la quantité

$$P_a = \frac{|\langle\psi_a|\phi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{|\phi_a|^2}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{1.65}$$

où P_a s'interprète comme la probabilité d'observer la valeur A_a dans le cadre d'une mesure.

Définition :

La valeur moyenne de $\hat{A}$:

$$\langle A\rangle = \sum_a P_a A_a \tag{1.66}$$

La variance :

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \tag{1.67}$$

$$= \sum_a P_a (A_a - \langle A\rangle)^2 \tag{1.68}$$

ΔA est l'écart type ou encore l'incertitude sur la valeur de A.

Proposition :
Les relations en haut peuvent s'écrire comme suit

$$\langle A\rangle = \frac{\left\langle \phi\hat{A}\middle|\phi\right\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{1.69}$$

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \tag{1.70}$$

$$= \frac{\left\langle \phi\hat{A}^2\middle|\phi\right\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} - \left(\frac{\left\langle \phi\hat{A}\middle|\phi\right\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\right)^2 \tag{1.71}$$

Démonstration :

- $$\begin{aligned}\frac{\langle\phi|\,\hat{A}\,|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} &= \frac{\sum_a \langle\psi_a|\,\overline{\phi}_a\hat{A}\sum_{a'}\phi_{a'}\,|\psi_{a'}\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\\ &= \frac{\sum_{a,a'}\langle\psi_a|\psi_{a'}\rangle\,A_{a'}\phi_a\phi_{a'}}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{A_a\phi_a\phi_a}{\langle\phi|\phi\rangle}\\ &= \sum_a A_a\frac{|\phi_a|^2}{\langle\phi|\phi\rangle}\\ &= \sum_a A_aP_a = \langle A\rangle\end{aligned}$$

- $$(\Delta A)^2 = \langle(A-\langle A\rangle)^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

1.2.6.7 Relation d'incertitude et relations de commutation

Soit $|\psi\rangle$ un état quantique, supposons que $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont deux opérateurs hérmitiques.
Définition :
Le commutateur de deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ est l'opérateur

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{1.72}$$

Exemple : $\hat{q}$, $\hat{p} \longrightarrow [\hat{q},\hat{p}] = i\hbar\mathbb{I}$.
Plus généralement, l'incertitude de l'état $|\phi\rangle$ de $\hat{A},\hat{B}$ est

$$\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|, \qquad \forall\,|\phi\rangle\in\mathcal{H} \tag{1.73}$$

avec $\hat{A}\,|\phi\rangle = A\,|\phi\rangle$ et $\hat{B}\,|\phi\rangle = B\,|\phi\rangle$. En particulier pour $\hat{A}=\hat{q}$ et $\hat{B}=\hat{p}$, Eq. (1.73) devient l'inégalité de Heisenberg ou bien relation d'incertitude.

1.3 Théorie De La Symétrie

Dans cette section, on va étudier l'aspect algébrique de la particule quantique sans spin isolé, évoluent sur un axe x. En particulier on montre l'utilité de la théorie des groupes à travers la résolution du spectre de l'oscillateur Harmonique, voir chapitre 2.

1.3.1 Générateur $\hat{H}$ du translation dans le temps

1.3.1.1 Opérateur d'évolution

Rappellons que l'équation d'évolution de Schrödinger donne la modification instantanée $\frac{d|\psi\rangle}{dt}$ de l'état quantique. Étant donné un état initial $|\psi(0)\rangle$ à l'instant $t = 0$, nous allons voir qu'il est possible d'avoir l'expression de l'état $|\psi(t)\rangle$ à un instant t donné.

Proposition : supposons que $\hat{H}$ ne dépend pas du temps. L'évolution temporelle d'un état $|\psi(t)\rangle$ est

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle \tag{1.74}$$

où $\hat{U}(t)$ est appelé propagateur ou opérateur d'évolution ou encore opérateur de translation sur la durée t, tel que

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)^n \tag{1.75}$$

L'équation (1.74) satisfait l'équation de Schrödinger. En effet

$$\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = \frac{d\hat{U}(t)}{dt}\,|\psi(0)\rangle = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle \tag{1.76}$$

ce qui donne

$$i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \tag{1.77}$$

1.3.1.2 Opérateur unitaire

Un opérateur linéaire $\hat{O}$ est unitaire s'il conserve la norme de tous les vecteurs, c'est-à-dire

$$\forall\,|\psi\rangle\,, \qquad |\phi\rangle = \hat{O}\,|\psi\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{1.78}$$

Propositions :

1. L'équivalent de (1.78) en géométrie euclidienne sont les transformations orthogonales (par exemples les rotations) qui conservent le produit scalaire euclidien.

2. $\hat{O}$ est unitaire si le produit scalaire hermitien est conservée par l'action de $\hat{O}$:

$$\forall\,|\psi\rangle\,,|\phi\rangle : \qquad \langle\phi|\psi\rangle = \left\langle\hat{O}\phi\middle|\hat{O}\psi\right\rangle \tag{1.79}$$

3. Un opérateur linéaire $\hat{O}$ est unitaire si est seulement si

$$\hat{O}^\dagger\hat{O} = \hat{\mathbb{I}} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \hat{O}^\dagger = \hat{O}^{-1}. \tag{1.80}$$

   En effet, d'après (1.79) on a

$$\langle\phi|\psi\rangle = \left\langle\hat{O}\phi\middle|\hat{O}\psi\right\rangle = \langle\phi|\,\hat{O}^\dagger\hat{O}\,|\psi\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{O}^\dagger\hat{O} = \hat{\mathbb{I}}.$$

4. D'après l'équation (1.75), $\hat{U}(t)$ est un opérateur unitaire :

$$\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t). \tag{1.81}$$

En effet,

$$\hat{U}^\dagger(t) = \left[\exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)\right]^\dagger = \exp\left(i\frac{\hat{H}^\dagger t}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \hat{U}(-t)$$

donc on trouve

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(-t)\hat{U}(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \hat{\mathbb{I}}.$$

1.3.1.3 Groupe d'évolution des états quantiques dans le temps

Les propagateurs $\hat{U}(t)$ dépendent du variable continu $t \in \mathbb{R}$. Par conséquent ils constituent un ensemble d'opérateurs unitaires vérifant les 3 propriétés suivantes :

$$\text{Loi de composition :} \qquad \hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2) \tag{1.82}$$

$$\text{Élément neutre :} \qquad \hat{U}(0) = \hat{\mathbb{I}} \tag{1.83}$$

$$\text{Inverse :} \qquad \left(\hat{U}(t)\right)^{-1} = \hat{U}(-t) \tag{1.84}$$

Donc ils forment un groupe dit groupe de Lie de dimension 1, car les opérateurs unitaires dépendent seulement d'une variable continue t. Ce groupe est appelé aussi groupe d'évolution dans le temps. On dit que $\hat{U}(t)$ est un élément du groupe et que $\hat{H}$ est son générateur. Ils sont reliés par

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\hat{U}(t) \tag{1.85}$$

Remarques :

- $\hat{H}$ est interprété ici comme un générateur d'évolution et dans l'opérateur de mesure comme une observable possible de la grandeur énergie. Ce double aspect est valable pour tout opérateur auto-adjoint $\hat{H}$.
- Développement limité : lorsque $t \simeq 0$, $\hat{U}(t)$ se comporte comme

$$\hat{U}(t) = \hat{\mathbb{I}} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}t + \theta(t) \tag{1.86}$$

dans ce cas $\hat{U}(t)$ est dit une transformation infinitésimale.

1.3.1.4 Relation d'incertitude temps-énergie

La relation $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ se déduit directement des postulats et de la relation de commutation des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ c'est donc une propriété intrinséque de tout système. Il n'en est plus de même pour la relation $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ car le temps n'est pas un opérateur mais un paramètre qui a une valeur bien définie dans les équations : bien qu'on puisse le mesurer, ce n'est pas une OBSERVABLE. Les interprétations de cette relations sont multiples. On se limite ici à quelques remarques.

Etats stationnaires : Ce sont les états propres de l'énergie dont l'évolution se ramène à un simple facteur de phase global

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\hat{E}t}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle\,. \tag{1.87}$$

Si le système est préparé dans un tel état, la valeur moyenne $\langle A\rangle$ de toute observable $\hat{A}$ ne change pas au cours du temps. Un système isolé dont l'énergie est bien définie ($\Delta E = 0$) n'évolue pas. Autrement dit, si $|\psi\rangle$ est état propre de $\hat{H}$, alors c'est un état stationnaire car il vérifie

$$|\langle\psi(t)\psi(0)\rangle| = 1 \tag{1.88}$$

et donc $\Delta E = 0$.

Evolution d'un système : Le système n'a pas d'énergie bien définie (son état ψ est par exemple une superposition de plusieurs états propres de l'énergie. D'aprés la relation générale pour toute observable $\hat{A}$, on a

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi[\hat{A},\hat{H}]\psi\rangle\right|. \tag{1.89}$$

Soit $V = \frac{d\langle A\rangle}{dt}$ la vitesse d'évolution de $\langle A\rangle$. Le théorème d'Ehrenfest implique

$$V = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi[\hat{A},\hat{H}]\psi\rangle. \tag{1.90}$$

Considérons $\Delta t = \frac{\Delta A}{|V|}$ comme étant le temps d'évolution de la grandeur $\hat{A}$ avec le module $|V| = \frac{1}{\hbar}\left|\langle\psi[\hat{A},\hat{H}]\psi\rangle\right|$. On remplace dans (1.89) pour trouver

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{1.91}$$

1.3.2 Groupe des translations des états quantiques en espace

Soit $\psi(x)$ une fonction d'onde et $\psi_\lambda(x) = \psi(x-\lambda)$ est la même fonction translatée de $\lambda \in \mathbb{R}$ en espace, dans la direction x. L'opérateur de translation $\hat{T}_\lambda$ qui effectue cette transformation est défini par

$$\hat{T}_\lambda\psi(x) = \psi(x-\lambda) = \psi_\lambda(x), \qquad \lambda \in \mathbb{R}. \tag{1.92}$$

Exercice : Vérifier que les opérateur $\hat{T}_\lambda$ forment un groupe à un paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$ d'opérateur unitaire, appelé groupe des translation des états quantiques en x.

Solution : Par anologie au cas temporel, on peut avoir la correspondance

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{p} \tag{1.93}$$

$$U(t) \longrightarrow \hat{T}_\lambda \tag{1.94}$$

Donc le générateur de groupe de translation des états quantiques en x est l'opérateur auto-adjoint impulsion

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{1.95}$$

Autrement dit

$$|\psi_\lambda\rangle = \hat{T}_\lambda|\psi_0\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{d|\psi_\lambda\rangle}{d\lambda} = -i\frac{\hat{p}}{\hbar}|\psi_\lambda\rangle. \tag{1.96}$$

Par conséquent on obtient

$$\hat{T}_\lambda = \exp\left(-i\frac{\hat{p}\lambda}{\hbar}\right) \tag{1.97}$$

On a $\psi_\lambda(x) = \psi(x-\lambda)$ donc

$$\langle x|\frac{d}{d\lambda}|\psi_\lambda\rangle = \frac{d\psi_\lambda(x)}{d\lambda} = \frac{d\psi(x-\lambda)}{d\lambda} = -\frac{d\psi(x-\lambda)}{dx} \tag{1.98}$$

$\Longrightarrow$

$$-\frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} = \langle x| \frac{d}{d\lambda} |\psi_\lambda\rangle = \langle x| - \frac{i\hat{p}}{\hbar} |\psi_\lambda\rangle \tag{1.99}$$

$\Longrightarrow$

$$\frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} = \langle x| \frac{i\hat{p}}{\hbar} |\psi_\lambda\rangle \tag{1.100}$$

$\Longrightarrow$

$$i\hbar\frac{d\psi_\lambda}{d\lambda} = \hat{p} |\psi_\lambda\rangle \tag{1.101}$$

qui est analogue à l'équation de Schrödinger. L'interprétation de l'impulsion comme générateur des translations spatiales est assez fondamentale. Elle est aussi valable en mécanique classique comme en mécanique quantique.

Exercice : Montrer les relations suivantes :

$$\langle x| \hat{T}_\lambda = \langle x - \lambda| \tag{1.102}$$

$$\hat{T}_\lambda |x\rangle = |x + \lambda\rangle . \tag{1.103}$$

1.3.3 Groupe des translations en impulsion

Soit $\hat{B}_\mu$ l'opérateur qui translate la fonction d'onde en représentation d'impulsion

$$\hat{B}_\mu\tilde{\psi}(x) = \tilde{\psi}_\mu(p) = \tilde{\psi}(p - \mu) \tag{1.104}$$

Comme $p = mv$ (en mécanique classique), l'opérateur $\hat{B}_\mu$ consiste à changer la vitesse par une constante. Cela s'appelle aussi un BOOST. Ce changement intervient lors d'un changement de référentiel Galiléen :

$$x^{'} = x + vt \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{dx^{'}}{dt} = \frac{dx}{dt} + v, \qquad v = \text{cte.} \tag{1.105}$$

Exercice : Montrer que $\hat{B}_\mu$ forment un groupe à un paramètre $\mu \in \mathbb{R}$ d'opérateurs unitaires et que l'opérateur position $(-\hat{x})$ est leur générateur, tels que

$$\hat{B}_\mu = \exp\left(-i\frac{(-\hat{x})\mu}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{(\hat{x})\mu}{\hbar}\right) \tag{1.106}$$

$$\frac{d\left|\tilde{\psi}_\mu\right\rangle}{d\mu} = \left(-i\frac{(-\hat{x})}{\hbar}\right)\left|\tilde{\psi}_\mu\right\rangle \tag{1.107}$$

1.3.4 Générateurs en mécanique classique

En mécanique classique de Hamilton la situation est la même. En effet, un état est un point (x, p) dans l'espace de phase.

- Evolution temporelle : Si le point $(x(t), p(t))$ évolue en temps, alors il satisfait l'équation d'évolution de Hamilton :

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{dp} \\ \dot{p} = \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{dx} \end{cases} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{dp} \\ -\frac{\partial H}{dx} \end{pmatrix} \tag{1.108}$$

  qui est l'analogue classique de l'équation de Schrödinger. Elle permet de dire que la fonction de Hamilton H est le générateur de l'évolution temporelle.

- Les translations en position :

$$(x_\lambda, p_\lambda) = (x_0 + \lambda, p_0) \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{dx_\lambda}{d\lambda} = 1, \qquad \frac{dp_\lambda}{d\lambda} = 0. \tag{1.109}$$

  En général on peut écrire

$$\frac{d}{d\lambda}\begin{pmatrix} x_\lambda \\ p_\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{dp} \\ -\frac{\partial G}{dx} \end{pmatrix} \tag{1.110}$$

  où le générateur est la fonction impulsion $G(x,p) = p$.

- Les translations en impulsion : Le générateur est la fonction $G(x,p) = -x$.

<u>Résume</u> :

- L'opérateur $(-\hat{x})$ est le générateur des translations des fonctions d'ondes en impulsion.
- L'opérateur $\hat{p}$ est le générateur d'évolution des fonctions d'ondes en espace.
- L'opérateur $\hat{H}$ est le générateur d'évolution des fonctions d'ondes en temps.

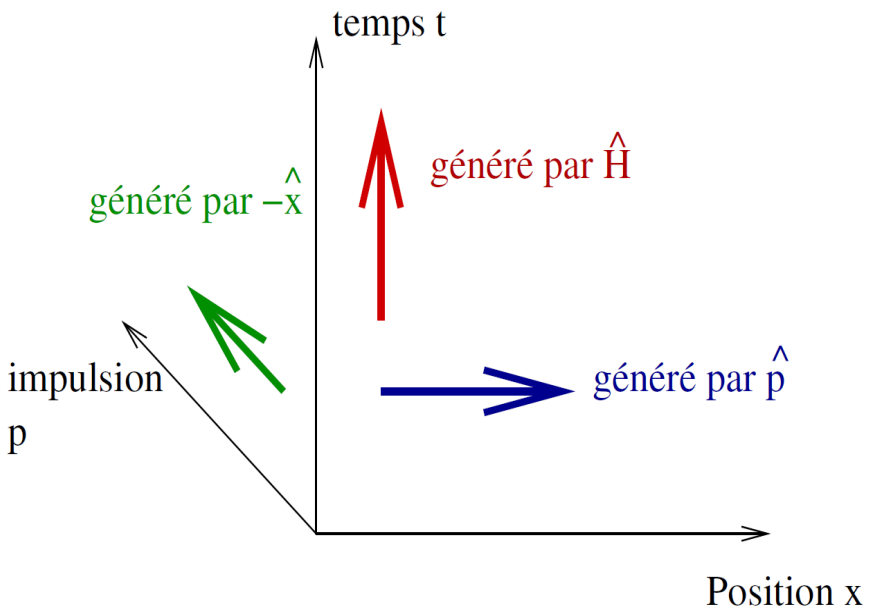

Fig 1.1: Résumé de l'action des générateurs des translations dans l'espace (de phase).

<u>NB</u> : Il y a une différence entre les translations dans l'espace de phase en mécanique classique et quantique. Ça est due à la non-commutativité $[\hat{q}, \hat{p}] \neq 0$ et par conséquent $[\hat{T}_\lambda, \hat{B}_\mu] \neq 0$ en général. Dans la suite, on verra que le groupe des translations quantiques dans l'espace de phase (groupe de Weyl-Heisenberg) est un groupe de Lie de dimension 3. En mécanique classique le groupe des translations dans l'espace de phase est un groupe de Lie commutatif de dimension 2.