

UNIVERSITÉ DE CERGY-PONTOISE

MÉMOIRE DE MASTER 1 DE MATHÉMATIQUES

Mécanique quantique



Loïc RENAUT
Année 2016-2017

Maître de stage :
LAURENT BRUNEAU
Maître de conférences à l'UCP

24 Avril - 13 Juin 2017

Table des matières

Introduction	1
1 Mécanique Newtonienne	5
1.1 Mouvement dans \mathbb{R}	5
1.2 Étude des deux modèles classiques	7
1.2.1 Particule libre	8
1.2.2 Oscillateur harmonique	10
1.3 Conservation de l'énergie	12
1.4 Mécanique Hamiltonienne	14
2 Mécanique quantique	21
2.1 Comportement probabiliste de la matière	22
2.2 Opérateurs pour les grandeurs physiques	25
2.2.1 L'opérateur de position	30
2.2.2 L'opérateur d'impulsion	30
2.2.3 L'opérateur Hamiltonien	31
2.3 Évolution temporelle en mécanique quantique	32
2.4 Résolution de l'équation de Schrödinger	35
2.4.1 Équation linéaire aux dérivées partielles	35
2.4.2 Résolution à l'aide de l'exponentielle	36
2.5 Équation de Schrödinger indépendante du temps	38
2.6 Étude des deux modèles quantiques	38
2.6.1 Particule libre	38
2.6.2 Oscillateur harmonique	44

Conclusion	57
Bibliographie	59
Table des figures	61

Introduction

Le but de ce mémoire est d'étudier les concepts de base et le formalisme mathématique de la mécanique quantique.

Pour cela, on va dans un premier temps étudier la mécanique Newtonienne. C'est la théorie qui était admise jusqu'au début du XX^e siècle pour décrire le mouvement des objets de toutes tailles, mais il s'est avéré qu'elle avait des limites. Ainsi, au début du XX^e siècle, deux nouvelles théories ont vu le jour pour palier aux manquements de la théorie Newtonienne : la mécanique quantique qui est la théorie que l'on étudie dans ce mémoire, c'est la physique des objets à l'échelle atomique et subatomique, et la relativité restreinte qui est la physique des objets à très grande échelle. Dans un second temps, on étudiera la mécanique quantique et on tâchera d'observer les similitudes qu'il subsiste entre les deux théories ainsi que les différences.

Le principe fondateur de la théorie quantique est la *dualité onde-corpuscule*. Ce principe énonce que les objets qui composent la matière (les électrons, les photons...) ont dans certaines situations un comportement qui est typique d'un corpuscule et dans d'autres situations un comportement qui est typique d'une onde. Mais ce ne sont ni des ondes, ni des corpuscules, c'est quelque chose d'autre. C'est une des différences fondamentales entre les deux théories. En effet, en mécanique Newtonienne, les objets sont vus comme étant uniquement des corpuscules.

Pour dire à quel point ce principe a été une révolution intellectuelle, rappelons qu'au XVII^e siècle, il y a eu un énorme débat concernant la lumière (les photons étaient alors inconnus). Deux camps s'opposaient, l'un mené par Isaac Newton qui pensait que la lumière était formée d'un ensemble de corpuscules et l'autre mené par Christiaan Huygens qui pensait que la lumière était une onde. L'influence de Newton était telle que son opinion était admise par la majorité des scientifiques de l'époque. Personne n'avait alors pensé que la lumière ne puisse être en fait ni un corpuscule, ni une onde. Ils n'avaient d'ailleurs pas encore les outils mathématiques nécessaires pour y parvenir.

La mécanique quantique a vu le jour bien plus tard, quelques années après la résolution du problème du corps noir par Max Planck en 1900. L'histoire considère cet événement comme étant à l'origine de la théorie quantique. Elle est arrivée dans sa forme plus ou moins complète entre 1925 et 1926, notamment grâce aux contributions de Werner Heisenberg, de Max Born, d'Erwin Schrödinger et de bien d'autres encore.

La rédaction de ce mémoire a nécessité l'utilisation de deux types de documents. Ceux traitant sur le formalisme de la mécanique quantique : [1], [2], [3], [4], [5], et ceux traitant sur la vulgarisation des concepts de la mécanique quantique : [6], [7], [8], [9], [10]. En effet, afin de comprendre parfaitement la mécanique quantique, il est nécessaire de comprendre à la fois son formalisme (les structures mathématiques utilisées), mais aussi comment ce formalisme a été créé à partir des expériences qui ont été réalisées.

On rappelle qu'en mécanique Newtonienne, le mouvement des objets est gouverné par la deuxième loi de Newton. Sous sa forme la plus concise, son expression est la suivante :

$$F = ma,$$

où F est la force qui est soumise sur l'objet, m est la masse de l'objet et a est l'accélération de l'objet.

En mécanique quantique en revanche, le mouvement des objets est gouverné par l'équation de Schrödinger, qui sous une de ses formes les plus concises est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi,$$

où ψ est la *fonction d'onde*, \hbar est la *constante de Planck normalisée* et \hat{H} l'*opérateur Hamiltonien*.

Afin de mieux comprendre les notions que l'on va aborder, on étudiera deux exemples. Ce sont deux modèles théoriques, ils permettent d'étudier plus facilement la théorie quantique. Ces deux modèles peuvent être étudiés à la fois en mécanique Newtonienne et en mécanique quantique, et donc, ils nous permettront de voir les différences entre les deux théories. Le premier modèle est celui de la *particule libre*, c'est-à-dire un objet qui n'est soumis à aucune force. Le second modèle est celui de l'*oscillateur harmonique*, il s'agit d'une masse qui oscille.

Il est à noter que l'on s'intéressera uniquement à la résolution des problèmes dans \mathbb{R} , ceci afin de ne pas rendre trop complexe les calculs, le but étant de comprendre le formalisme et les principes de base de la mécanique quantique le plus facilement possible.

Le mémoire est divisé en deux parties :

1. La première partie sera consacrée à l'étude de la mécanique Newtonienne. On va rappeler les notions de bases de la mécanique Newtonienne, elles nous permettront de mieux comprendre les similitudes et les différences avec la mécanique quantique. On va se pencher sur l'étude et la résolution de la version classique de nos deux exemples. On va s'intéresser également au formalisme développé par Hamilton, il va nous permettre de voir certains points communs avec le formalisme de la mécanique quantique, en effet, son formalisme a facilité l'élaboration du formalisme de la mécanique quantique.
2. La deuxième partie sera consacrée à l'étude de la mécanique quantique, on y introduira les notions de bases. On étudiera la fonction d'onde et les axiomes à la base de la mécanique quantique. On s'intéressera à l'étude et à la résolution de nos deux exemples mais cette fois-ci dans leur version quantique. Enfin, on s'intéressera à la *réduction du paquet d'onde*.

Chapitre 1

Mécanique Newtonienne

Sommaire

1.1	Mouvement dans \mathbb{R}	5
1.2	Étude des deux modèles classiques	7
1.2.1	Particule libre	8
1.2.2	Oscillateur harmonique	10
1.3	Conservation de l'énergie	12
1.4	Mécanique Hamiltonienne	14

Pour rappel, la mécanique Newtonienne (parfois aussi appelée *mécanique classique*) est une théorie physique qui décrit le mouvement des objets. Il s'agit donc d'étudier le déplacement d'un objet par rapport à un point de l'espace qui est fixe à un moment donné.

1.1 Mouvement dans \mathbb{R}

On va introduire les notions de base de la mécanique Newtonienne.

On va s'intéresser à un point important : le formalisme de la mécanique Newtonienne. Le formalisme est crucial dans une théorie physique car c'est la façon dont on va utiliser les objets mathématiques pour décrire les propriétés et le comportement des objets réels.

En mécanique Newtonienne, on représente les grandeurs physiques telles que la position d'un objet, sa vitesse ou encore son accélération par des fonctions du type « $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ », où $n \in \mathbb{N}$ peut varier d'une grandeur physique à l'autre.

Ainsi, on va noter

$$x(t),$$

la *position* dans l'espace d'un objet à l'instant t ,

$$v(t) = \dot{x}(t),$$

la *vitesse* d'un objet à l'instant t et

$$a(t) = \dot{v}(t) = \ddot{x}(t),$$

l'*accélération* d'un objet à l'instant t ,

$$\text{où } \dot{x}(t) = \frac{dx}{dt} \quad \text{et} \quad \ddot{x}(t) = \frac{d^2x}{dt^2}.$$

Comme on l'a dit, la mécanique Newtonienne permet de décrire le mouvement d'un ou plusieurs objets (le mouvement d'une balle que l'on lance par exemple). Pour étudier le mouvement, il faut utiliser la deuxième loi de Newton. Comme on s'est placés dans \mathbb{R} , il faut voir le mouvement de l'objet comme étant rectiligne, c'est à dire que l'objet se déplace en ligne droite.

On va supposer qu'une force F agit sur l'objet et on va supposer aussi que cette force varie en fonction de la position de l'objet seulement (la force peut également dépendre de la vitesse de l'objet, c'est le cas lorsqu'il y a des frottements, mais cela ne nous intéressera pas).

Sous ces hypothèses, la deuxième loi de Newton est donnée par

$$F(x(t)) = ma(t) = m\ddot{x}(t), \tag{1.1}$$

où m est la masse de l'objet (elle est supposée positive).

(1.1) est une *équation différentielle du deuxième ordre*. Pour pouvoir la résoudre, la théorie nous impose d'avoir des conditions initiales pour assurer l'unicité de la solution. On a donc besoin de la position et de la vitesse de l'objet à un certain instant $t_0 \in \mathbb{R}$, voici donc le système que l'on souhaite résoudre :

$$\begin{cases} F(x(t)) = m\ddot{x}(t), \\ x(t_0) = x_0, \\ v(t_0) = \dot{x}(t_0) = v_0, \end{cases} \tag{1.2}$$

où $x_0, v_0 \in \mathbb{R}$.

Supposons que F soit une fonction C^2 , la théorie nous dit qu'il existe une unique solution locale à (1.1), pour chaque couple de conditions initiales

$(x_0, v_0) \in \mathbb{R}^2$. La solution n'est pas forcément globale car comme l'équation est en général une équation non linéaire, on ne peut pas toujours espérer trouver une solution définie pour tout t , cela dépend de F .

Une fois les conditions initiales données, on sait qu'il existe une solution $x(t)$ qui est unique et il ne reste plus qu'à la trouver en résolvant l'équation avec les méthodes usuelles de résolution des équations différentielles.

Définition 1. *Une solution $x(t)$ de la seconde loi de Newton est appelée trajectoire.*

La notion de trajectoire est fondamentale en mécanique Newtonienne, elle permet de pouvoir connaître la position d'un objet à chaque instant lors de son mouvement. On a également accès à la vitesse de l'objet à chaque instant puisque $v(t) = \dot{x}(t)$.

Voici les deux points fondamentaux à comprendre concernant la mécanique classique :

1. On peut connaître simultanément la position et la vitesse de l'objet à n'importe quel instant (ceux où $x(t)$ est bien définie).
2. On peut prédire la position ou la vitesse de l'objet à n'importe quel instant si on connaît les conditions initiales et la force qui agit sur l'objet.

On verra qu'en mécanique quantique, les choses ne se passent plus du tout de la même façon. On ne peut pas connaître simultanément la position et la vitesse d'un objet (une particule). On ne peut pas non plus prédire la valeur de la position ou de la vitesse de l'objet car comme nous le verrons, la matière a un comportement probabiliste.

Avec cette première sous-partie, on a tous les outils nécessaires pour étudier le mouvement d'une particule libre et d'un oscillateur harmonique. Les sous-parties qui suivent sont là pour permettre de mieux voir les analogies entre la mécanique Newtonienne et la mécanique quantique.

1.2 Étude des deux modèles classiques

On va résoudre nos deux exemples afin de trouver leur trajectoire.

Les deux exemples que nous allons étudier sont décrits par un système qui a la forme suivante :

$$(E) \begin{cases} m\ddot{x}(t) &= F(x(t)), \\ \dot{x}(t_0) &= v_0, \\ x(t_0) &= x_0, \end{cases}$$

où $x_0, v_0 \in \mathbb{R}$ sont fixés et t_0 est quelconque.

L'équation de ce système est une *équation différentielle autonome*. On a donc le résultat suivant :

Proposition 1. *Si $x(t)$ est une solution de (E). Alors $\tilde{x}(t) = x(t + t_0)$ est la solution de*

$$(E') \begin{cases} m\ddot{x}(t) &= f(x(t)), \\ \dot{x}(0) &= v_0, \\ x(0) &= x_0, \end{cases}$$

où x_0, v_0 sont tels que définis dans (E).

Remarque 1. *Ainsi, on peut se ramener à la résolution du problème pour $t_0 = 0$ seulement. On pourra par la suite (si nécessaire), se ramener à un t_0 quelconque grâce à cette proposition.*

Démonstration.

D'une part,

$$\tilde{x}(0) = x(t_0) = x_0.$$

D'autre part,

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} = \frac{dx}{dt}(t + t_0) \Rightarrow \frac{d\tilde{x}}{dt}(0) = \frac{dx}{dt}(t_0) = v_0.$$

Finalement,

$$m \frac{d^2\tilde{x}}{dt^2} = m \frac{d^2x}{dt^2}(t + t_0) = f(x(t + t_0)) = f(\tilde{x}(t)).$$

□

1.2.1 Particule libre

La particule libre est le premier modèle auquel on va s'intéresser, c'est aussi le plus simple que l'on puisse étudier en mécanique classique. Une particule libre est un objet (théorique) de masse m qui n'est soumis à aucune force ($F \equiv 0$). À titre d'exemple, une situation de la vie réelle qui s'en rapproche le plus est un objet qui se déplace de façon rectiligne dans le vide de l'espace,

mais pour que l'on soit vraiment dans le cadre de la particule libre, il faudrait que l'objet ne soit soumis à aucune force d'attraction.

La particule libre est décrit par le système suivant :

$$(E_1) \begin{cases} m\ddot{x}(t) = 0, \\ \dot{x}(0) = v_0, \\ x(0) = x_0, \end{cases}$$

où $x_0, v_0 \in \mathbb{R}$.

C'est une équation différentielle du second ordre qui est assez simple à résoudre.

On a

$$m\ddot{x}(t) = 0 \Leftrightarrow \dot{x}(t) = K, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Or

$$\dot{x}(0) = v_0 \Leftrightarrow \dot{x}(t) = v_0, \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

On a alors

$$\dot{x}(t) = v_0 \Leftrightarrow x(t) = v_0 t + K', \quad K' \in \mathbb{R}.$$

Or

$$x(0) = x_0 \Leftrightarrow x(t) = v_0 t + x_0, \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Finalement, la solution de (E_1) est

$$S = \left\{ x(t) = v_0 t + x_0, t \in \mathbb{R} \right\},$$

qui n'est autre que l'ensemble des points composant la trajectoire de l'objet.

Remarque 2. *On a donc*

$$\begin{cases} x(t) = v_0 t + x_0 \\ v(t) = \dot{x}(t) = v_0. \end{cases}$$

Voici un exemple d'une trajectoire avec un couple de conditions initiales particulier :

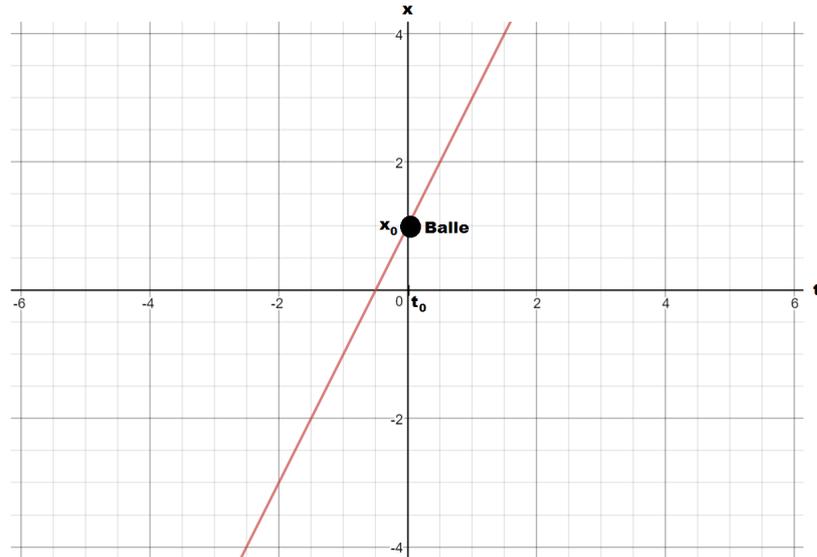


FIGURE 1.1 – Exemple de la trajectoire d’une particule libre ($x_0 = 1$, et $v_0 = 2$).

1.2.2 Oscillateur harmonique

L’oscillateur harmonique dit classique est le second modèle auquel on va s’intéresser. Un oscillateur harmonique correspond à un système qui oscille avec une amplitude constante, par exemple un poids attaché à un ressort, la force étant proportionnelle à la distance du poids par rapport à son point d’équilibre. Dans ce modèle, la force est donnée par la *loi de Hooke* :

$$F(x) = -kx,$$

où k est une constante positive, appelée *constante de raideur*.

L’oscillateur harmonique est décrit par le système suivant :

$$(E_2) \begin{cases} m\ddot{x}(t) &= -kx(t), \\ \dot{x}(0) &= v_0, \\ x(0) &= x_0, \end{cases}$$

où $k > 0$ et $x_0, v_0 \in \mathbb{R}$ sont fixés.

C’est une équation différentielle du second ordre qui est aussi assez simple à résoudre, la solution générale de cette équation est de la forme :

$$x(t) = a \cos(\omega t) + b \sin(\omega t),$$

où $\omega = \sqrt{k/m}$ est la *fréquence* de l'objet.

Les conditions initiales permettent de trouver la solution.

On a

$$x(0) = a \Rightarrow a = x_0.$$

De plus

$$\dot{x}(t) = -x_0\omega \sin(\omega t) + b\omega \cos(\omega t),$$

$$\dot{x}(0) = b\omega \Rightarrow b\omega = v_0 \Rightarrow b = \frac{v_0}{\omega}.$$

La solution de (E_2) est donc

$$S = \left\{ x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t), t \in \mathbb{R} \right\}.$$

Voici un exemple d'une trajectoire avec un couple de conditions initiales particulier :

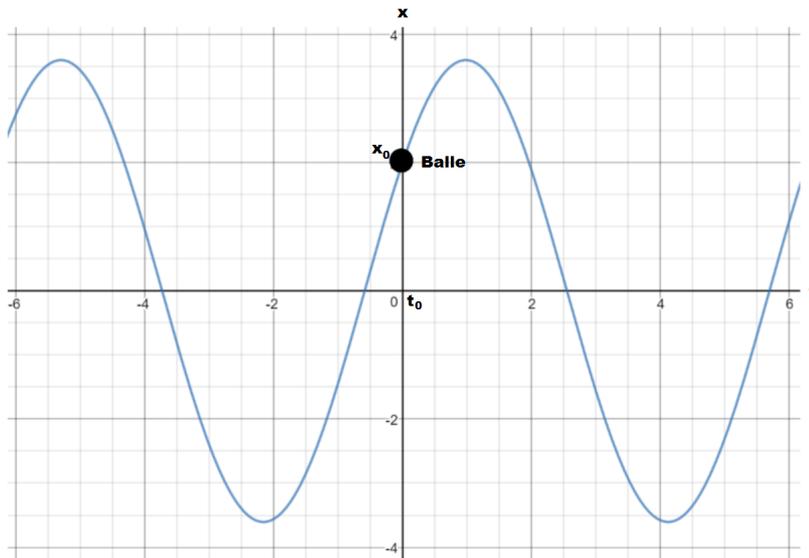


FIGURE 1.2 – Exemple de la trajectoire d'un oscillateur harmonique ($x_0 = 2$ et $v_0 = 3$).

Il est à noter que conformément à la courbe de la figure ci-dessus, comme aucune force de frottement n'est prise en compte, l'oscillation du poids est perpétuelle (le système ne perd pas d'énergie).

1.3 Conservation de l'énergie

On a vu que pour trouver la trajectoire d'un objet, il fallait résoudre l'équation (1.1), mais ce n'est pas toujours faisable. On va introduire une notion qui va permettre de simplifier la résolution du problème : la *conservation de l'énergie*.

Pour cela, on doit d'abord définir l'*énergie cinétique* et l'*énergie potentielle* :

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2, \quad (1.3)$$

$$E_p = V(x) = - \int F(x) dx. \quad (1.4)$$

Remarque 3.

1. L'énergie potentielle est définie à une constante près.
2. On a $F(x) = -\frac{dV}{dx}$.

L'*énergie totale* du système aussi appelée *énergie mécanique* est définie par :

$$E(x, v) = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + V(x). \quad (1.5)$$

L'énergie totale est très utile car elle est invariante au cours du temps, c'est à dire que sa valeur est constante le long d'une trajectoire.

Ce qui veut dire que si $x(t)$ est une solution de (1.1), alors la quantité $E(x(t), \dot{x}(t))$ est constante au cours du temps. Ceci se montre facilement en différenciant :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E(x(t), \dot{x}(t)) &= \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}m(\dot{x}(t))^2 + V(x(t)) \right) \\ &= m\dot{x}(t)\ddot{x}(t) + \dot{x}(t)\frac{dV}{dx} \\ &= \dot{x}(t)(m\ddot{x}(t) - F(x(t))) \\ &= 0 \end{aligned}$$

où dans la dernière égalité, on a utilisé le fait que $x(t)$ est solution de (1.1) dans le membre de droite.

On appelle les quantités invariantes au cours du temps des *quantités conservées* ou *constantes du mouvement*. Voyons maintenant comment la conservation de l'énergie nous aide à résoudre l'équation de la deuxième loi de Newton.

On va commencer par réécrire l'équation du second ordre (1.1) en deux équations différentielles du premier ordre, simplement en introduisant une nouvelle variable v , qui est la vitesse de l'objet. On obtient ce nouveau système à résoudre :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = v(t), \\ \frac{dv}{dt} = \frac{1}{m}F(x(t)). \end{cases} \quad (1.6)$$

On voit bien que si $(x(t), v(t))$ est solution de (1.6) alors $x(t)$ est solution de (1.1). Pour une particule dans \mathbb{R} , on appelle l'ensemble des paires possibles de la forme (x, v) (i.e. \mathbb{R}^2 tout entier) l'espace des phases.

Les conditions initiales appropriées pour résoudre (1.6) sont :

$$\begin{cases} x(0) = x_0, \\ v(0) = v_0, \end{cases} \quad (1.7)$$

où x_0, v_0 sont tels que définit dans (1.2).

L'espace des phases et le fait que l'énergie totale soit invariante au cours du temps vont nous permettre de simplifier la résolution de (1.1). Mais juste avant de voir comment, on a besoin de définir ce qu'est une *courbe de niveau*.

Définition 2. Une courbe de niveau pour l'énergie totale $E(x, v)$ est l'ensemble défini par :

$$C_{E(x_0, v_0)} = \left\{ (x, v) \in \mathbb{R}^2 \mid E(x, v) = E(x_0, v_0) \right\},$$

où $(x_0, v_0) \in \mathbb{R}^2$ est un couple de conditions initiales.

Ce que nous dit la conservation de l'énergie, c'est qu'une trajectoire doit rester sur une seule courbe de niveau. Il nous reste à voir comment une courbe de niveau est paramétrée en fonction du temps.

Grâce à l'espace des phases et à (1.5), on se ramène à la résolution de cette équation au lieu de l'équation (1.1) :

$$\frac{m}{2}(\dot{x}(t))^2 + V(x(t)) = E_0, \quad (1.8)$$

où E_0 est la valeur de l'énergie totale à l'instant t_0 .

On peut réécrire l'équation (1.8) de la façon suivante :

$$\dot{x}(t) = \pm \sqrt{\frac{2(E_0 - V(x(t)))}{m}}. \quad (1.9)$$

On voit donc que la conservation de l'énergie nous a permis de passer d'une équation différentielle du second ordre à une équation différentielle du premier ordre. C'est une équation différentielle du premier ordre à variables séparables et donc on peut la résoudre plus ou moins explicitement.

Remarque 4. *L'équation (1.9) nous donne une information supplémentaire concernant le système. L'intérieur de la racine doit forcément être positif, on a supposé m positif, on doit donc avoir*

$$E_0 - V(x(t)) \geq 0, \quad \forall t \in \mathbb{R}. \quad (1.10)$$

1.4 Mécanique Hamiltonienne

La mécanique Hamiltonienne a été introduite en 1833 par William Rowan Hamilton, c'est une reformulation de la mécanique Newtonnienne. Elle permet de mieux comprendre le phénomène des quantités conservées. Son formalisme est assez similaire à celui de la mécanique quantique et ce n'est pas un hasard car c'est la mécanique Hamiltonienne qui a facilité l'élaboration de la mécanique quantique. C'est pour cette raison que nous l'étudions au préalable. On va notamment s'intéresser au *crochet de Poisson* qui est très similaire aux *commutateurs* que l'on étudiera en mécanique quantique.

On rappelle à nouveau qu'en mécanique Newtonnienne l'énergie mécanique est donnée par (1.5).

En mécanique Hamiltonienne, on ne voit plus l'énergie mécanique comme une fonction qui dépend de la position et de la vitesse de l'objet mais plutôt comme une fonction qui dépend de sa position et de son impulsion. On doit donc introduire une nouvelle variable

$$p = mv,$$

appelé *impulsion*, ou *quantité de mouvement*.

On va introduire cette nouvelle variable dans (1.5), on obtient ainsi cette nouvelle expression pour la fonction d'énergie totale :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1.11)$$

Le E majuscule est maintenant remplacé par un H majuscule et on dénomme à présent cette quantité comme étant le *Hamiltonien* du système.

On peut maintenant réécrire (1.6) à l'aide de (1.11), ce qui donne :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt}(t) = \frac{\partial H}{\partial p}(x(t), p(t)), \\ \frac{dp}{dt}(t) = -\frac{\partial H}{\partial x}(x(t), p(t)). \end{cases} \quad (1.12)$$

On appelle les équations de ce système les équations du mouvement de Hamilton, dites *équations canoniques de Hamilton*. On peut les réécrire comme suit :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx} = F. \end{cases} \quad (1.13)$$

On va à présent définir le crochet de Poisson, il va nous permettre de voir en quoi le formalisme de Hamilton est utile pour l'étude des quantités conservées.

Définition 3. Soient f et g deux fonctions C^1 sur \mathbb{R}^2 . On définit le crochet de Poisson de f et g , noté $\{f, g\}$, comme étant la fonction $\{f, g\} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ donnée par

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x}.$$

Le crochet de Poisson possède certaines propriétés :

Proposition 2. Pour toutes fonctions f , g et h C^1 de \mathbb{R}^2 on a :

1. $\{f, g + ch\} = \{f, g\} + c\{f, h\}$, $\forall c \in \mathbb{R}$.
2. $\{g, f\} = -\{f, g\}$.
3. $\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}$.
4. De plus si f , g , et h sont C^2 , on a

$$\{f, \{g, h\}\} = \{\{f, g\}, h\} + \{g, \{f, h\}\}.$$

Cette propriété est appelée l'identité de Jacobi.

Démonstration.

1. Soit $c \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}
 \{f, g + ch\} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial(g + ch)}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial(g + ch)}{\partial x} \\
 &= \frac{\partial f}{\partial x} \left[\frac{\partial g}{\partial p} + c \frac{\partial h}{\partial p} \right] - \frac{\partial f}{\partial p} \left[\frac{\partial g}{\partial x} + c \frac{\partial h}{\partial x} \right] \\
 &= \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \right] + c \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} \right] \\
 &= \{f, g\} + c\{f, h\}
 \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
 \{g, f\} &= \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial x} \\
 &= - \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \right] \\
 &= -\{f, g\}
 \end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned}
 \{f, gh\} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial(gh)}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial(gh)}{\partial x} \\
 &= \frac{\partial f}{\partial x} \left[h \frac{\partial g}{\partial p} + g \frac{\partial h}{\partial p} \right] - \frac{\partial f}{\partial p} \left[h \frac{\partial g}{\partial x} + g \frac{\partial h}{\partial x} \right] \\
 &= h \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \right] + g \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} \right] \\
 &= \{f, g\}h + g\{f, h\}
 \end{aligned}$$

4. On pose $G = \{\{f, g\}, h\} + \{g, \{f, h\}\}$

On a

$$G = \frac{\partial(\{f, g\})}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial(\{f, g\})}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial(\{f, h\})}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial(\{f, h\})}{\partial x} \quad (1.14)$$

On calcule séparément chaque terme

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\{f, g\})}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x} \right) \frac{\partial h}{\partial p} \\
 &= \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial g}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^2 g}{\partial x \partial p} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial p} \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right] \frac{\partial h}{\partial p}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial(\{f, g\})}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial p \partial x} \frac{\partial g}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^2 g}{\partial p^2} - \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial^2 g}{\partial p \partial x} \right] \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$\frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial(\{f, h\})}{\partial p} = \frac{\partial g}{\partial x} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial p \partial x} \frac{\partial h}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^2 h}{\partial p^2} - \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \frac{\partial h}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial^2 h}{\partial p \partial x} \right]$$

$$\frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial(\{f, h\})}{\partial x} = \frac{\partial g}{\partial p} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial h}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^2 h}{\partial x \partial p} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial p} \frac{\partial h}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right]$$

En injectant dans (1.14), un certain nombre de termes se simplifient entre eux et cela donne :

$$\begin{aligned} G &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial(\{g, h\})}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial(\{g, h\})}{\partial x} \\ &= \{f, \{g, h\}\} \end{aligned}$$

□

Dans la suite, quand on parlera de la fonction de position x et de la fonction d'impulsion p , on considérera les fonctions suivantes de l'espace des phases :

$$x(x, p) = x, \quad (1.15)$$

$$p(x, p) = p. \quad (1.16)$$

Proposition 3. *Les fonctions de position x et d'impulsion p de l'espace des phases satisfont les relations suivantes :*

$$\{x, x\} = 0, \quad (1.17)$$

$$\{p, p\} = 0, \quad (1.18)$$

$$\{x, p\} = 1. \quad (1.19)$$

Démonstration.

$$\begin{aligned} \{x, x\} &= \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial x}{\partial x} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{p, p\} &= \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{x, p\} &= \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} \\ &= 1\end{aligned}$$

□

Dans la proposition qui suit, on va voir en quoi le crochet de Poisson est utile.

Proposition 4. *Si $(x(t), p(t))$ est une solution des équations de Hamilton (1.12), alors pour toute fonction C^2 f de \mathbb{R}^2 , on a*

$$\frac{d}{dt}f(x(t), p(t)) = \{f, H\}(x(t), p(t)).$$

On écrit plus généralement cette égalité sous la forme réduite suivante

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}. \quad (1.20)$$

Démonstration.

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \\ &= \{f, H\}\end{aligned}$$

où entre la première et la deuxième égalité on a utilisé (1.12). □

La proposition 4 nous donne donc un moyen d'exprimer l'évolution temporelle des quantités physiques en général.

On peut donc réécrire (1.12) grâce au crochet de Poisson :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \{x, H\}, \\ \frac{dp}{dt} = \{p, H\}. \end{cases} \quad (1.21)$$

Corollaire 1. *Soit f une fonction C^2 de \mathbb{R}^2 . On dit que f est une quantité conservée si $f(x(t), p(t))$ est indépendante du temps pour chaque solution $(x(t), p(t))$ des équations de Hamilton. Alors, f est une quantité conservée si et seulement si*

$$\{f, H\} = 0.$$

Remarque 5. *En particulier, cela confirme à nouveau que l'hamiltonien H (qui est l'énergie totale du système) est une constante du mouvement puisque $\{H, H\} = 0$.*

Ce résultat nous donne donc un moyen de trouver les constantes du mouvement grâce au crochet de Poisson.

Chapitre 2

Mécanique quantique

Sommaire

2.1	Comportement probabiliste de la matière	22
2.2	Opérateurs pour les grandeurs physiques	25
2.2.1	L'opérateur de position	30
2.2.2	L'opérateur d'impulsion	30
2.2.3	L'opérateur Hamiltonien	31
2.3	Évolution temporelle en mécanique quantique . .	32
2.4	Résolution de l'équation de Schrödinger	35
2.4.1	Équation linéaire aux dérivées partielles	35
2.4.2	Résolution à l'aide de l'exponentielle	36
2.5	Équation de Schrödinger indépendante du temps	38
2.6	Étude des deux modèles quantiques	38
2.6.1	Particule libre	38
2.6.2	Oscillateur harmonique	44

Dans cette partie, on va d'abord commencer par étudier le comportement probabiliste de la matière. Avec la dualité onde-corpuscule, ces deux principes sont à l'origine du formalisme de la mécanique quantique et bien les comprendre facilite la compréhension du formalisme. On s'intéressera ensuite à la représentation des grandeurs physiques par des opérateurs sur un espace de Hilbert. On verra également comment l'évolution temporelle est gouvernée par l'équation de Schrödinger et on présentera deux méthodes qui permettent de la résoudre. Enfin, on étudiera la version quantique de la particule libre et de l'oscillateur harmonique et on tâchera de voir les différences avec leur version classique.

2.1 Comportement probabiliste de la matière

La différence majeure entre la mécanique quantique et la mécanique Newtonienne est que en mécanique quantique on ne peut pas prédire le résultat de la mesure par un appareil de certaines grandeurs physiques (comme par exemple la position ou l'impulsion).

On peut seulement connaître la probabilité de mesurer une valeur particulière de la grandeur physique, et ce n'est pas dû à un manque de connaissances ni au fait que la théorie puisse être incomplète.

On va voir un exemple qui illustre bien ce comportement probabiliste. Nous allons nous intéresser à deux propriétés des électrons qui ont des résultats binaires lorsque l'on effectue une mesure. Pour ne pas rendre la compréhension de l'exemple trop difficile, nous appellerons ces deux propriétés de l'électron la *couleur* et la *dureté*. Les résultats possibles pour une mesure de la couleur d'un électron sont *blanc* ou *noir*, et les résultats possibles pour une mesure de la dureté sont *mou* ou *dur*.

L'expérience est simple, on prend un électron choisi au hasard et on souhaite effectuer une mesure sur l'une de ces deux propriétés. Pour cela on envoie l'électron dans une boîte qui représente l'appareil de mesure. La boîte possède deux sorties et en fonction de la sortie empruntée par l'électron on connaît le résultat de la mesure. Voici dans la figure ci-dessous les résultats obtenus lors de l'expérience.

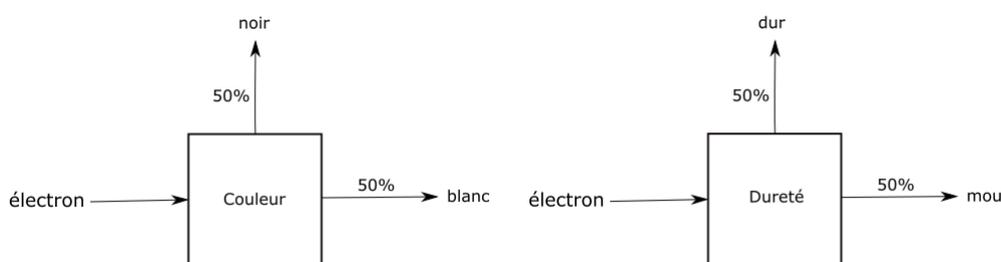


FIGURE 2.1 – Résultats de la mesure de la couleur/dureté d'un électron choisit aléatoirement.

On voit que lorsque l'on choisit un électron au hasard, on a une chance sur deux pour que celui-ci soit noir ou blanc et pareillement une chance sur deux pour que celui-ci soit dur ou mou.

On va faire évoluer un petit peu l'expérience, on va mesurer la couleur d'un électron choisit toujours de façon aléatoire et lorsque celui-ci est mesuré

comme étant blanc on l'envoie de nouveau dans une boîte qui mesure la couleur. Voici les résultats de cette expérience (les résultats sont identiques si l'on s'intéresse seulement à la dureté de l'électron).

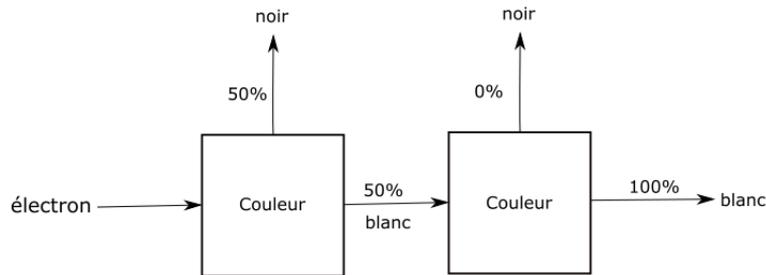


FIGURE 2.2 – Résultats de la mesure de la couleur lorsque l'électron a été mesuré blanc lors de la première mesure.

On voit donc qu'un électron qui a été mesuré comme étant blanc par la première boîte est de nouveau mesuré comme étant blanc par la deuxième boîte. Et ce comportement nous semble logique : si l'électron est blanc, alors c'est qu'il est blanc.

Mais maintenant, on va de nouveau faire évoluer l'expérience. Entre les deux mesures de la couleur faite dans l'expérience précédente, on va rajouter une boîte qui mesure la dureté de l'électron et seuls les électrons mesurés mous iront dans la troisième boîte qui mesure la couleur. Voici les résultats de cette expérience.

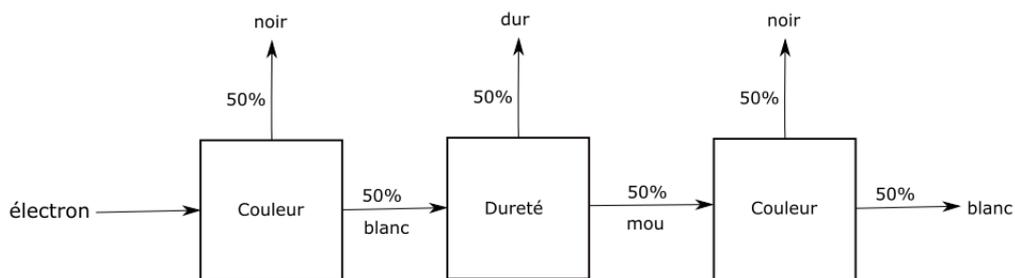


FIGURE 2.3 – Résultats de la mesure de la couleur lorsque l'électron a d'abord été mesuré blanc puis mou.

Et là, surprise ! Dans la troisième boîte, l'électron est mesuré blanc dans seulement la moitié des cas et noir dans l'autre moitié des cas alors que celui-ci avait été mesuré blanc par la première boîte.

C'est ainsi que fonctionne le monde à l'échelle atomique, les expériences présentées ci-dessus ont toutes été réalisées en laboratoire et les résultats énoncés sont ceux qui ont été observés.

Il faut donc bien comprendre que la couleur d'un électron n'est pas une propriété qui est définie à proprement parler. Un électron n'est pas soit blanc, soit noir, lorsque l'on effectue une mesure de sa couleur on connaît juste la probabilité qu'il soit mesuré blanc ou noir (50%). Et c'est le mieux que l'on puisse faire en terme de prédiction.

Bien sûr, pour d'autres propriétés de la matière, le résultat d'une mesure n'est pas binaire. Il peut même y avoir une infinité de résultats possibles, dans ce cas là, on est capable de prédire la densité de probabilité de la dite propriété comme nous allons le voir.

Nous avons à présent vu les deux ingrédients fondamentaux de la théorie quantique : la dualité onde-corpuscule dont on a déjà brièvement parlé dans l'introduction et le comportement probabiliste dont on vient de parler.

Ces deux aspects de la théorie sont encodés dans une fonction. Cette fonction est appelée *fonction d'onde*, elle est notée ψ , et c'est cette fonction qui apparaît dans l'équation de Schrödinger. La fonction d'onde détermine l'*état quantique* d'un système, à partir duquel on peut déterminer les propriétés du système.

Si on considère une particule se déplaçant de façon rectiligne, la fonction d'onde ψ est une fonction de la variable x à valeur dans \mathbb{C} ,

$$\begin{aligned} \psi &: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \\ x &\mapsto \psi(x) \end{aligned}$$

Elle va nous permettre de trouver par exemple les valeurs possibles pour la position d'une particule. Elle va aussi nous permettre comme nous allons le voir de trouver les valeurs possibles pour l'impulsion d'une particule. Pour le moment on considère que le temps est fixé, on verra plus tard comment la fonction d'onde évolue dans le temps.

La fonction $|\psi(x)|^2$ représente la *densité de probabilité* de la position de la particule, ce qui veut dire que pour un ensemble $E \subset \mathbb{R}$, l'intégrale

$$\int_E |\psi(x)|^2 dx,$$

correspond à la probabilité de trouver la particule à l'intérieur de l'ensemble E .

Pour que l'on puisse parler de densité de probabilité, $|\psi(x)|^2$ doit naturellement être normalisée

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Il faut bien comprendre que la fonction d'onde ne décrit pas quelque chose qui est directement observable en regardant un seul électron, la fonction d'onde décrit plutôt le comportement statistique d'une séquence entière d'électrons préparés dans le même état (voir l'expérience des deux fentes de Young pour mieux comprendre le phénomène, par exemple dans [1] p.13).

La fonction d'onde ainsi que son évolution dans le temps compte pour l'aspect ondulatoire de la théorie alors que l'aspect corpusculaire vient de l'interprétation qui est faite de la fonction d'onde.

On va maintenant s'intéresser au formalisme qui permet de décrire les comportements que l'on vient d'énoncer.

2.2 Opérateurs pour les grandeurs physiques

En mécanique quantique, les grandeurs physiques sont appelées des *observables*, elles ne sont plus exprimées à l'aide de fonctions mais grâce à des *opérateurs*.

Pour modéliser une certaine grandeur physique, on va avoir besoin d'un opérateur A et d'un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sur un espace de Hilbert \mathcal{H} sur \mathbb{C} , qui sera toujours supposé séparable. Dans notre cas, où la particule se déplace dans \mathbb{R} , l'espace de Hilbert utilisé est $L^2(\mathbb{R})$.

On suit la convention qui est de rigueur dans les livres de physique quantique qui dit que le produit scalaire est antilinéaire par rapport à la première variable et linéaire par rapport à la deuxième variable :

$$\langle \lambda\phi, \psi \rangle = \bar{\lambda}\langle \phi, \psi \rangle \quad ; \quad \langle \phi, \lambda\psi \rangle = \lambda\langle \phi, \psi \rangle,$$

$\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$ et $\forall \lambda \in \mathbb{C}$.

Le produit scalaire est le produit scalaire usuel pour $L^2(\mathbb{R})$:

$$\langle \phi, \psi \rangle = \int \overline{\phi(x)}\psi(x) dx.$$

Pour des raisons d'ordre physique et mathématiques, on souhaite que les opérateurs que l'on va définir soient *auto-adjoints*. Pour rappel :

Définition 4. Soit $A \in \mathcal{H}$ un opérateur borné. On appelle l'adjoint de A , noté A^* , l'opérateur borné vérifiant

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A^*\phi, \psi \rangle,$$

$\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$. De plus, si $A^* = A$, alors on dit que A est un opérateur auto-adjoint.

L'adjoint de l'opérateur A est unique et son existence se démontre grâce au théorème de Riesz.

Mais attention! Dans la démonstration du théorème de Riesz et dans la définition ci-dessus, il est question d'*opérateur borné*. Et le problème, c'est qu'en général, l'opérateur A est un *opérateur non borné*, ce qui reflète le fait qu'en mécanique classique, la grandeur qu'il modélise est représentée par une fonction qui n'est pas bornée.

Il faut donc faire très attention car la notion d'opérateur auto-adjoint non borné est plus technique que la notion d'opérateur auto-adjoint borné.

Définition 5. Un opérateur non-borné A sur \mathcal{H} est une application linéaire d'un sous espace dense $Dom(A) \subset \mathcal{H}$ dans \mathcal{H} .

Remarque 6. Attention à la terminologie employé, un opérateur borné est également un opérateur non-borné. En effet, la définition ci-dessus n'exclut pas d'avoir $Dom(A) = \mathcal{H}$ et A borné.

En revanche, un opérateur auto-adjoint non borné défini sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} tout entier est forcément borné.

On rappelle qu'un opérateur auto-adjoint est symétrique.

Corollaire 2. Si A est un opérateur symétrique avec $Dom(A) = \mathcal{H}$, alors A est borné.

Démonstration. Montrer la continuité de l'opérateur A est équivalent à montrer que l'opérateur A est borné.

Soit $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de vecteurs de \mathcal{H} tel que $\psi_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \psi$.

On veut montrer que

$$A\psi_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \chi = A\psi.$$

Soit $\phi \in \mathcal{H}$,

$$\begin{array}{ccc} \langle \phi, A\psi_n \rangle & \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} & \langle \phi, \chi \rangle \\ \parallel & & \\ \langle A\phi, \psi_n \rangle & \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} & \langle A\phi, \psi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle \end{array}$$

Donc

$$\begin{aligned} \langle \phi, \chi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle, \quad \forall \phi \in \mathcal{H} &\Leftrightarrow \langle \phi, \chi - A\psi \rangle = 0, \quad \forall \phi \in \mathcal{H} \\ &\Leftrightarrow \chi - A\psi = 0 \\ &\Leftrightarrow \chi = A\psi \\ &\Leftrightarrow A \text{ est continue.} \end{aligned}$$

□

On va à présent définir la notion d'opérateur adjoint pour les opérateurs non bornés.

Définition 6. Soit A un opérateur non borné sur \mathcal{H} . L'adjoint A^* de A est défini de la façon suivante.

Soit $\phi \in \mathcal{H}$ un vecteur, on dit que $\phi \in \text{Dom}(A^*)$ si

$$\langle \phi, A \cdot \rangle : \text{Dom}(A) \rightarrow \mathcal{H},$$

est continue.

Soit $\phi \in \text{Dom}(A^*)$, $A^*\phi$ est l'unique vecteur χ de \mathcal{H} tel que

$$\langle \chi, \psi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle,$$

$\forall \psi \in \text{Dom}(A)$.

Définition 7. Un opérateur non borné A dans \mathcal{H} est symétrique si

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A\phi, \psi \rangle, \quad \forall \phi, \psi \in \text{Dom}(A).$$

De plus, l'opérateur A est auto-adjoint si $\text{Dom}(A^*) = \text{Dom}(A)$ et $A^*\phi = A\phi$, $\forall \phi \in \text{Dom}(A)$.

Remarque 7.

1. Tout ça pour dire que A est un opérateur auto-adjoint si A^* et A sont le même opérateur avec le même domaine de définition.
2. Dans la pratique, trouver ce domaine est une tâche assez délicate. En effet, le choix du domaine n'est pas unique, l'opérateur peut être défini sur plusieurs domaines différents tous denses. Le fait que $\text{Dom}(A^*) = \text{Dom}(A)$ réduit néanmoins les possibilités mais le choix final du domaine dépendra du problème étudié.

Axiome 1. L'état d'un système est représenté par un vecteur unitaire ψ de l'espace de Hilbert \mathcal{H} . Si ψ_1 et ψ_2 sont deux vecteurs unitaires avec $\psi_2 = c\psi_1$, $c \in \mathbb{C}$, alors ψ_1 et ψ_2 représente le même état quantique.

L'axiome qui suit présente la façon dont on utilise les opérateurs pour modéliser une grandeur physique.

Axiome 2. *Si un système quantique est dans un état décrit par un vecteur unitaire $\psi \in \mathcal{H}$, la valeur moyenne attendue lors d'une mesure de la grandeur physique modélisé par l'opérateur A est donnée par :*

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \int \overline{\psi(x)}(A\psi)(x) dx.$$

Notation 1. *On utilisera la notation suivante pour l'expression de la valeur moyenne attendue de l'opérateur auto-adjoint A dans l'état quantique ψ :*

$$\langle A \rangle_\psi := \langle \psi, A\psi \rangle.$$

Affirmation 1. *Supposons que l'opérateur A possède une base orthonormale $\{e_j\}$ de vecteurs propres avec comme valeurs propres associées λ_j . Supposons que ψ soit un vecteur unitaire de \mathcal{H} qui a pour expression*

$$\psi = \sum_{j=1}^{\infty} a_j e_j.$$

On définit l'événement suivant : $E =$ "mesurer la valeur λ lors d'une mesure de la grandeur physique représentée par l'opérateur A lorsque la particule est dans l'état ψ ".

On a

$$\mathbb{P}(E) = \sum_{j | \lambda_j = \lambda} |a_j|^2.$$

Les différentes valeurs de mesure possible d'une grandeur physique sont donc les valeurs propres de l'opérateur A :

$$A\psi = \lambda\psi, \quad \psi \neq 0,$$

où λ représente une valeur particulière susceptible d'être mesurée.

Étant donné que la fonction d'onde est une application complexe, il se pourrait que l'on trouve une ou plusieurs valeur propres λ qui soient complexes. Or dans la réalité, les grandeurs que l'on mesure sont toujours réelles. Les résultats qui suivent permettent de voir qu'en fait cette situation ne peut pas se produire, grâce au fait que A soit un opérateur auto-adjoint (et donc symétrique).

Proposition 5. Soit A un opérateur symétrique dans \mathcal{H} .

1. $\forall \psi \in \text{Dom}(A)$, la quantité $\langle \psi, A\psi \rangle$ est réel.
2. Si λ est une valeur propre de A , alors $\lambda \in \mathbb{R}$.

Démonstration.

1. Comme l'opérateur A est symétrique, on a

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, A\psi \rangle}.$$

2. Si ψ est un vecteur propre de A associé à la valeur propre λ , alors

$$\lambda \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \bar{\lambda} \langle \psi, \psi \rangle.$$

Comme on a supposé que $\psi \neq 0$, ceci implique que $\lambda = \bar{\lambda}$.

□

Maintenant que nous avons vu comment les grandeurs physiques sont modélisées par des opérateurs auto-adjoints, nous allons voir comment sont choisis ces opérateurs.

C'est un résultat très important qui est un des axiomes de la mécanique quantique.

Axiome 3. A chaque fonction réelle f de l'espace des phases classique est associé un opérateur auto-adjoint \hat{f} de l'espace de Hilbert.

Dans la pratique, pour trouver l'opérateur auto-adjoint associé à une fonction réelle de l'espace des phases, on utilise un procédé qui s'appelle la *quantification*. C'est un ensemble de guides qui permettent de "convertir" une fonction réelle de l'espace des phases en un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert.

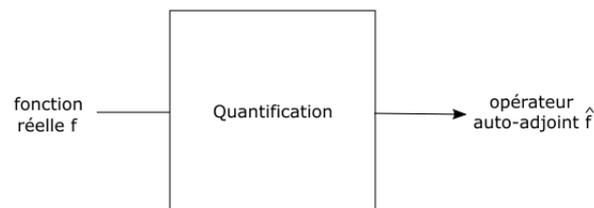


FIGURE 2.4 – Processus de quantification

On ne rentrera pas dans les détails de ce processus mais il est important de comprendre que la quantification d'une fonction n'est pas une tâche si évidente. Pour plus d'informations concernant la quantification, on pourra regarder le chapitre 13 de [1].

Maintenant que nous avons présenté le cadre assez général des opérateurs représentant certaines grandeurs physiques, nous allons définir les principaux opérateurs que nous allons utiliser par la suite. On va définir l'*opérateur de position* ainsi que l'*opérateur d'impulsion* sans donner les motivations qui sont à l'origine de leur définition. On parlera également de l'*opérateur Hamiltonien*.

2.2.1 L'opérateur de position

L'opérateur de position, noté X , est donc l'opérateur auto-adjoint associé à la fonction x tel que définit dans (1.15) en accord avec l'axiome 3 que nous venons d'énoncer.

Définition 8. *Pour une particule se déplaçant dans \mathbb{R} , on définit l'opérateur de position X sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ par*

$$X\psi(x) = x\psi(x), \quad (2.1)$$

$\forall \psi \in \text{Dom}(X)$, avec $\text{Dom}(X) = \{\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \mid x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}$.

Puisque $|\psi(x)|^2$ est une densité de probabilité, nous allons pouvoir voir la signification de $\langle X \rangle_\psi$ en terme de probabilité :

$$\langle X \rangle_\psi = \langle \psi, X\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x)} x \psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 dx = \mathbb{E}(x)$$

Ce n'est donc rien d'autre que l'espérance d'une densité de probabilité, ce qui justifie le fait que $\langle X \rangle_\psi$ représente la position moyenne d'une particule.

Affirmation 2. *L'opérateur X est auto-adjoint sur $\text{Dom}(X)$.*

2.2.2 L'opérateur d'impulsion

L'opérateur d'impulsion, noté P , est l'opérateur auto-adjoint associé à la fonction p tel que définit dans (1.16).

Définition 9. Pour une particule se déplaçant dans \mathbb{R} , on définit l'opérateur d'impulsion P sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ par

$$P\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}, \quad (2.2)$$

$\forall \psi \in \text{Dom}(P)$.

De plus,

$$\langle P \rangle_\psi = \langle \psi, P\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \hbar k |\hat{\psi}(k)|^2 dk,$$

où $\psi \in \text{Dom}(P)$, avec $\text{Dom}(P) = \{\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \mid \frac{d\psi}{dx} \in L^2(\mathbb{R})\}$.

Remarque 8.

1. $\hat{\psi}$ est la transformé de Fourier de ψ , elle est définie par

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \psi(x) dx.$$

2. La fonction $|\hat{\psi}(k)|^2$ représente la densité de probabilité de l'impulsion de la particule divisée par la constante de Planck normalisée (p/\hbar), ce qui veut dire que pour un ensemble $E \subset \mathbb{R}$, l'intégrale

$$\int_E |\hat{\psi}(k)|^2 dk,$$

correspond à la probabilité de trouver la valeur p/\hbar à l'intérieur de l'ensemble E .

3. Si ψ est un vecteur unitaire de $L^2(\mathbb{R})$, alors d'après le théorème de Plancherel, $\hat{\psi}$ est aussi un vecteur unitaire de $L^2(\mathbb{R})$

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\hat{\psi}(k)|^2 dk = 1.$$

Affirmation 3. L'opérateur P est auto-adjoint.

2.2.3 L'opérateur Hamiltonien

L'opérateur Hamiltonien, noté \hat{H} , est l'opérateur auto-adjoint associé au Hamiltonien H de l'espace des phases classique.

Son expression varie en fonction du système que l'on étudie, ainsi on ne peut pas le définir de façon générale. À Hamiltonien classique est associé un opérateur Hamiltonien que l'on obtient grâce au processus de quantification.

Dans les exemples que l'on va voir, il suffira de faire les changements suivants :

$$\begin{aligned} x &\rightarrow X, \\ p &\rightarrow P. \end{aligned}$$

2.3 Évolution temporelle en mécanique quantique

Jusqu'à présent, on a considéré la fonction d'onde ψ à un temps fixé. On va maintenant étudier la façon dont elle évolue au cours du temps.

C'est ici que l'on va voir le lien qui existe entre la mécanique Hamiltonienne et la mécanique quantique. Pour rappel, en mécanique Hamiltonienne, l'évolution temporelle d'un système est gouvernée par son Hamiltonien H . Et bien en mécanique quantique, c'est l'opérateur Hamiltonien qui va nous permettre d'étudier l'évolution temporelle du système.

Il faut comprendre que lorsque l'on veut résoudre un problème de mécanique quantique, on part toujours d'un problème de mécanique classique. On possède donc l'Hamiltonien H du système, la quantification permet de trouver l'opérateur \hat{H} associé. En quelque sorte, on "traduit" le problème classique en version quantique.

Axiome 4. *L'évolution temporelle de la fonction d'onde ψ dans un système quantique est donnée par l'équation de Schrödinger*

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi, \quad (2.3)$$

où \hat{H} est l'opérateur associé au Hamiltonien classique H .

Afin de voir d'autres analogies avec la mécanique Hamiltonienne, on va définir la notion de *commutateurs*.

Définition 10. *Soient A et B deux opérateurs non bornés sur \mathcal{H} , on définit l'opérateur AB qui a pour domaine*

$$\text{Dom}(AB) = \left\{ \psi \in \text{Dom}(B) \mid B\psi \in \text{Dom}(A) \right\},$$

par

$$(AB)\psi = A(B\psi).$$

Définition 11. *Soient A et B deux opérateurs non bornés sur \mathcal{H} , on définit l'opérateur $[A, B]$ qui a pour domaine*

$$\text{Dom}([A, B]) = \text{Dom}(AB) \cap \text{Dom}(BA),$$

par

$$[A, B]\psi = (AB)\psi - (BA)\psi.$$

On dit que $[A, B]$ est le commutateur des opérateurs A et B .

On dit que deux opérateurs A et B commutent si $[A, B] = 0$, sinon on dit que les deux opérateurs ne commutent pas.

Proposition 6. *Les opérateurs de position et d'impulsion X et P satisfont les relations suivantes :*

1. $[X, X] = 0$
2. $[P, P] = 0$
3. $[X, P] = XP - PX = i\hbar I$

Remarque 9.

1. Le point 3. de la proposition 6. indique que les opérateurs X et P ne commutent pas.
2. Ces relations sont à comparer avec (1.17), (1.18) et (1.19).

Démonstration.

1. $[X, X] = X^2 - X^2 = 0$
2. $[P, P] = P^2 - P^2 = 0$
3. Soit $\psi \in C_c^1$,

$$\begin{aligned} PX\psi(x) &= -i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi(x)) \\ &= -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx} \\ &= -i\hbar\psi(x) + XP\psi(x) \end{aligned}$$

On a donc bien

$$(XP - PX)\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

□

Voici quelques propriétés que satisfont les commutateurs.

Proposition 7. *Pour tout opérateur A , B et C sur \mathcal{H} , on a les relations suivantes :*

1. $[A, B + \alpha C] = [A, B] + \alpha[A, C]$
2. $[B, A] = -[A, B]$
3. $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
4. $[A, [B, C]] = [[A, B], C] + [B, [A, C]]$

Remarque 10.

1. Bien sûr, pour pouvoir utiliser ces propriétés, il faut qu'elles aient du sens, il faut donc les appliquer à des vecteurs de \mathcal{H} qui sont dans leur domaine.
2. Le point 4 est équivalent à l'identité de Jacobi.
3. Ces relations sont à comparer avec celles vues dans la proposition 2.

Démonstration. La démonstration de cette proposition est similaire à celle de la proposition 2, on ne la rédigera donc pas. \square

Les équations (2.3) et (1.12) font intervenir un Hamiltonien mais il ne semble pas y avoir de lien entre elles. Pour voir certaines similitudes dans leur évolution temporelle, il faut considérer la valeur moyenne au cours du temps des grandeurs physiques en mécanique quantique.

Proposition 8. Supposons que $\psi(t) \in \text{Dom}([A, \hat{H}])$ est une solution de l'équation de Schrödinger et A est un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} . On a :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [A, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)}, \quad (2.4)$$

où \hat{H} est l'opérateur Hamiltonien associé à l'Hamiltonien classique H .

Remarque 11.

1. (2.4) est à comparer avec (1.20).
2. On voit dans cette proposition que la non commutativité des opérateurs est fondamentale en mécanique quantique. Sans celle-ci, on ne pourrait pas étudier des comportements intéressants lors de l'évolution temporelle. Car si tous les opérateurs commutaient avec \hat{H} , on aurait $[A, \hat{H}] = 0$ quelque soit l'opérateur choisit et donc $\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi(t)} = 0$. Ce qui voudrait dire que la valeur $\langle A \rangle_{\psi(t)}$ serait indépendante du temps.
3. Lorsque $[A, \hat{H}] = 0$, on dit que l'opérateur A est une quantité conservée.

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle A \rangle_{\psi(t)} &= \frac{d}{dt}\langle \psi(t), A\psi(t) \rangle \\
&= \left\langle \frac{d\psi}{dt}(t), A\psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t), A \frac{d\psi}{dt}(t) \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi(t), A\psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t), A \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi(t) \right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left(- \left\langle \hat{H}\psi(t), A\psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t), A\hat{H}\psi(t) \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left(- \left\langle \psi(t), \hat{H}A\psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t), A\hat{H}\psi(t) \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t), (A\hat{H} - \hat{H}A)\psi(t) \right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi(t), [A, \hat{H}]\psi(t) \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [A, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)}
\end{aligned}$$

□

L'application

$$(A, B) \mapsto \frac{1}{i\hbar} [A, B],$$

où A et B sont des opérateurs auto-adjoints joue donc un rôle similaire au crochet de Poisson.

2.4 Résolution de l'équation de Schrödinger

Nous allons à présent voir comment résoudre l'équation de Schrödinger. On étudiera deux méthodes de résolution, l'une consiste à résoudre une équation linéaire aux dérivées partielles et l'autre consiste à résoudre l'équation à l'aide d'une exponentielle.

2.4.1 Équation linéaire aux dérivées partielles

On va considérer l'exemple le plus simple d'opérateur Hamiltonien \hat{H} , celui qui correspond à une particule se déplaçant dans \mathbb{R} .

On rappelle que l'Hamiltonien classique d'une particule se déplaçant dans \mathbb{R} est donné par

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

L'opérateur Hamiltonien associé est le suivant

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + V(X),$$

où

$$(V(X)\psi)(x) = V(x)\psi(x).$$

On a donc

$$(\hat{H}\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x).$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est donc donnée par

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

C'est une équation linéaire aux dérivées partielles, elle est linéaire à coefficients non constants. On pourra utiliser les méthodes de résolution d'équation linéaire aux dérivées partielles pour la résoudre.

Cette méthode de résolution fonctionne seulement pour quelques exemples assez simples. Mais dans la majorité des cas, il faudra utiliser la deuxième méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger.

2.4.2 Résolution à l'aide de l'exponentielle

L'équation (2.3) est une équation de la forme

$$\frac{dv}{dt} = Av,$$

où $A = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}$ est un opérateur linéaire sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$.

Affirmation 4. *Supposons que \hat{H} soit un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} . Si on peut donner un sens à l'expression $e^{-it\hat{H}/\hbar}$, alors la solution de l'équation (2.3) avec comme condition initiale $\psi_0 \in \text{Dom}(\hat{H})$ de Schrödinger est donnée par*

$$\psi(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}\psi_0. \quad (2.5)$$

Remarque 12. *Ceci n'est pas à prendre comme une démonstration mais cela permet de se faire une idée de ce que l'on attend d'elle.*

D'une part

$$\psi(0) = \psi_0.$$

D'autre part

$$\frac{d\psi}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}e^{-it\hat{H}/\hbar}\psi_0 \Leftrightarrow \frac{d\psi}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\psi(t).$$

qui n'est autre que l'équation de Schrödinger.

Maintenant, si on souhaite donner du sens à l'expression $e^{-it\hat{H}/\hbar}$, plusieurs situations sont possibles :

1. Si \hat{H} est un opérateur borné, alors l'exponentielle peut être exprimée à l'aide d'une série convergente.
2. Dans le cas générale où \hat{H} est un opérateur non-borné, on préférera utiliser le théorème spectral pour exprimer l'exponentielle.

On ne s'intéressera malheureusement pas au théorème spectral dans ce mémoire. On présentera juste certains résultats qui nous permettront de résoudre le problème de l'oscillateur harmonique quantique.

On va seulement considérer le cas d'un opérateur possédant un *spectre purement ponctuel*. Un opérateur auto-adjoint \hat{H} possède un spectre discret si il existe une base de vecteurs propres orthonormale $\{e_j\}$ pour \mathcal{H} .

Si

$$\hat{H}e_j = E_j e_j, \quad E_j \in \mathbb{R},$$

alors l'exponentielle peut être définie grâce à :

$$e^{-it\hat{H}/\hbar}e_j = e^{-itE_j/\hbar}e_j, \quad (2.6)$$

$\forall j$.

Bien sûr, tous les opérateurs ne possèdent pas une base orthonormée de vecteurs propres. Mais le théorème spectral nous dit qu'il existe toujours une décomposition de \mathcal{H} en espace propre généralisé pour l'opérateur A .

Attention, il est important de comprendre que pour résoudre l'équation (2.5), il faut pouvoir donner un sens à l'expression $e^{-it\hat{H}/\hbar}$, en d'autres termes on doit être capable de calculer explicitement cette quantité, c'est seulement une fois que l'on a exprimé explicitement cette quantité que l'on a résolu l'équation.

On ne verra pas le théorème spectral, mais il faut retenir une chose :

Affirmation 5. *Peu importe ce que dit le théorème spectral, on peut toujours donner un sens à l'expression e^{iaA} , pour n'importe quel opérateur auto-adjoint A et nombre réel a .*

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger, il est donc nécessaire de calculer les valeurs propres de A afin de pouvoir exprimer $e^{-it\hat{H}/\hbar}$. C'est ce que nous tâchons de faire dans la sous-partie suivante.

2.5 Équation de Schrödinger indépendante du temps

Comme on l'a vu dans la sous-partie précédente, les vecteurs propres de l'opérateur \hat{H} permettent de résoudre l'équation de Schrödinger. On va à présent voir comment les trouver grâce à l'équation de Schrödinger dite indépendante du temps.

Définition 12. Si \hat{H} est l'opérateur Hamiltonien pour un système quantique, l'équation

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad E \in \mathbb{R},$$

est appelée *équation de Schrödinger indépendante du temps*.

Avec cette équation, on cherche à la fois à déterminer les valeurs possibles de E (valeurs propres) pour lesquelles on a une solution non nulle mais aussi les valeurs correspondantes de ψ (vecteurs propres).

Si ψ est une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, alors la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps avec pour condition initiale ψ est

$$\psi(t) = e^{-itE/\hbar}\psi.$$

Il est à noter que puisque $\psi(t)$ est le produit d'une constante (par rapport à x) et de ψ , en accord avec l'axiome 1, $\psi(t)$ représente le même état quantique au cours du temps.

Une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps est parfois appelée *état stationnaire*.

2.6 Étude des deux modèles quantiques

2.6.1 Particule libre

On va étudier la version quantique de la particule libre.

En mécanique classique, on rappelle que l'Hamiltonien d'une particule libre se déplaçant dans \mathbb{R} est donné par :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m}. \tag{2.7}$$

En accord avec l'axiome (3), il existe un opérateur Hamiltonien \hat{H} associé, il est donné par :

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m}, \quad (2.8)$$

où P est l'opérateur tel que définit dans (2.2).

Ainsi, l'équation de Schrödinger pour une particule libre aussi appelée *équation libre de Schrödinger* est donné par :

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi &\Leftrightarrow \frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{P^2}{2m} \psi \\ &\Leftrightarrow \frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x, t) \end{aligned}$$

Voici donc l'équation que l'on cherche à résoudre :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x, t). \quad (2.9)$$

On va résoudre cette équation avec comme condition initiale

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x).$$

Pour résumer, voici le système que l'on doit résoudre :

$$(E_3) \begin{cases} \frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x, t), \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x). \end{cases} \quad (2.10)$$

On va d'abord commencer par chercher des solutions de (2.9) sur \mathbb{R} qui sont de la forme

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega(k)t)}, \quad (2.11)$$

où $\omega(k)$ reste à déterminer. Comme (2.9) est une équation aux dérivées partielles linéaire, toute combinaison linéaire de solutions sera aussi solution.

Remarque 13. *Ces solutions ne sont pas carrés intégrables (pour t fixé), mais on verra comment faire avec par la suite. On appelle ces solutions des exponentielles pures.*

Pour trouver la valeur de $\omega(k)$, il suffit d'injecter l'expression (2.11) de ψ dans (2.9).

$$\begin{aligned} (2.11) \rightarrow (2.9) &\Leftrightarrow -i\omega(k)\psi(x, t) = \frac{i\hbar}{2m}(ik)^2\psi(x, t) \\ &\Leftrightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \end{aligned}$$

On va à présent construire une solution générale de l'équation (2.9) à partir des solutions de la forme (2.11).

En effet, comme on l'a déjà mentionné, les solutions exponentielles pures ne sont pas carrés intégrables, elles ne peuvent donc pas être des solutions de notre système. On va donc utiliser la transformée de Fourier qui va nous permettre de construire des solutions carrés intégrables à partir des solutions exponentielles pures.

Pour cela on va exprimer la solution de l'équation libre de Schrödinger comme une *superposition* des solutions exponentielles pures.

Définition 13. Une fonction $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ est dite à décroissance rapide si elle est C^∞ et si $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}$,

$$p_{\alpha, \beta}(\psi) = \sup_{x \in \mathbb{R}} |x^\alpha \partial^\beta \psi(x)| < \infty. \quad (2.12)$$

L'ensemble des fonctions à décroissance rapide est l'espace de Scharwz, noté $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Proposition 9. Supposons que $\psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Alors

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\psi}_0(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk, \quad (2.13)$$

est solution du système (E_3).

Démonstration.

Vérifions que la condition initiale soit satisfaite :

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\psi}_0(k) e^{ikx} dk \\ &= \psi_0(x) \end{aligned}$$

Dans la dernière égalité, on a utilisé la définition et l'unicité de la transformée de Fourier inverse de $\psi_0(x)$.

Pour montrer que $\psi(x, t)$ vérifie bien l'équation libre de Schrödinger, on va avoir besoin d'appliquer le théorème de dérivabilité des intégrales à paramètres, d'une part une fois en t et d'autre part deux fois en x .

On pose

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x, k, t) dk,$$

où

$$f(x, k, t) = \hat{\psi}_0(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}.$$

On peut l'appliquer en x car :

1. $\forall x \in \mathbb{R}, t \rightarrow f(x, k, t)$ est C^0 par morceau et intégrable.
2. f admet une dérivée partielle en x

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, k, t) = \hat{\psi}_0(k) (ik) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}.$$

3. $\forall x \in \mathbb{R}, k \rightarrow \frac{\partial f}{\partial x}(x, k, t)$ est C^0 par morceau.
4. $\forall k \in \mathbb{R}, x \rightarrow \frac{\partial f}{\partial x}(x, k, t)$ est C^0 .
5. On utilise $|k| |\hat{\psi}_0(k)|$ comme fonction dominante, elle est C^0 par morceau, intégrable et $\forall x \in \mathbb{R}, \forall k \in \mathbb{R}$, on a

$$\left| \frac{\partial f}{\partial x}(x, k, t) \right| \leq |k| |\hat{\psi}_0(k)|$$

On a donc

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial f}{\partial x}(x, k, t) dk$$

On peut utiliser les mêmes arguments pour dériver une seconde fois en x , et parallèlement le même argument fonctionne pour dériver en t .

Finalement, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\psi}_0(k) \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \right) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \left(-i \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \hat{\psi}_0(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\psi}_0(k) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \right) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \left(-i \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \hat{\psi}_0(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk \end{aligned}$$

On voit que l'équation libre de Schrödinger (2.9) est satisfaite. \square

Proposition 10. *La transformée de Fourier de $\psi(x, t)$ est donnée par*

$$\hat{\psi}(k, t) = \hat{\psi}_0(k) \exp\left(-i \frac{\hbar k^2 t}{2m}\right). \quad (2.14)$$

Démonstration. On peut réécrire (2.13) de la façon suivante

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ikx} (\hat{\psi}_0(k) e^{-i \frac{\hbar k^2 t}{2m}}) dk. \quad (2.15)$$

L'unicité de la transformée de Fourier nous donne le résultat souhaité. \square

La proposition 9 ne permet pas encore de pouvoir calculer explicitement $\psi(x, t)$ à cause de la transformée de Fourier. Le résultat suivant nous donne la valeur de $\psi(x, t)$ sous la forme d'une intégrale qui elle peut être calculée plus ou moins explicitement à l'aide des méthodes d'analyse numérique.

Théorème 1. *Supposons que $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$. Alors $\psi(x, t)$, comme défini dans (2.13), peut être calculée pour tout $t \neq 0$ par*

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t \hbar}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(i \frac{m}{2t\hbar} (x - y)^2\right) \psi_0(y) dy, \quad (2.16)$$

où la racine complexe est celle avec la partie réel positive.

Remarque 14. *On ne s'intéressera pas à la démonstration de ce théorème, elle demande une notion un peu plus générale de la transformée de Fourier et également le calcul d'intégrale impropre. Voir la démonstration dans [1] p.95 si intéressé.*

Pour finir, on rappelle que comme la particule n'a pas de position et d'impulsion définies, cela n'a aucun sens de demander si la particule satisfait l'équation de Newton. En revanche, ça en a si on s'intéresse à la position et l'impulsion moyenne de la particule au cours du temps. On va donc utiliser la proposition

8.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle X \rangle_{\psi(t)} &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [X, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)} \\
&= \left\langle \frac{1}{i\hbar} (X\hat{H} - \hat{H}X) \right\rangle_{\psi(t)} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} (X\hat{H}\psi - \hat{H}X\psi)(x,t) dx \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(2 \frac{\partial \psi}{\partial x}(x,t) + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \right) \right) dx \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x}(x,t) dx \\
&= \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} (-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x,t) dx \\
&= \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} (P\psi)(x,t) dx \\
&= \frac{1}{m} \langle P \rangle_{\psi(t)}
\end{aligned}$$

De même,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle P \rangle_{\psi(t)} &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [P, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)} \\
&= 0
\end{aligned}$$

car P et \hat{H} commutent, en effet

$$[P, \hat{H}] = [P, \frac{P}{2m}] = \frac{1}{2m} [P, P^2] = 0.$$

Donc, on a

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\langle X \rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m}\langle P \rangle_{\psi(t)}, \\ \frac{d}{dt}\langle P \rangle_{\psi(t)} = 0. \end{cases}$$

Donc

$$\begin{cases} \langle X \rangle_{\psi(t)} = \langle X \rangle_{\psi_0} + \frac{t}{m}\langle P \rangle_{\psi_0}, \\ \langle P \rangle_{\psi(t)} = \langle P \rangle_{\psi_0}. \end{cases}$$

Ceci est à comparer avec la remarque 2. Ainsi, la particule libre est un des cas particuliers dans lequel la valeur moyenne de la position et de l'impulsion correspondent exactement à la trajectoire de la particule libre classique.

2.6.2 Oscillateur harmonique

On va étudier l'oscillateur harmonique dit quantique, il correspond à la version quantique de l'oscillateur harmonique classique.

En mécanique classique, l'Hamiltonien du système est donné par la fonction suivante :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2, \quad (2.17)$$

où $k > 0$.

En accord avec l'axiome 3, il existe un opérateur Hamiltonien \hat{H} associé à (2.17), il est donné par l'expression suivante :

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{k}{2}X^2, \quad (2.18)$$

où $k > 0$, X et P sont les opérateurs de position et d'impulsion tels que définit dans (2.1) et (2.2).

On rappelle que l'évolution temporelle du système est donnée par l'équation de Schrödinger (2.3), et que, la solution de cette équation est donnée par (2.5).

Il nous faut donc calculer la quantité (2.5). Pour cela, il suffit de trouver une base orthonormale de vecteurs propres de \hat{H} , et donc de trouver les vecteurs propres et les valeurs propres associées de l'opérateur \hat{H} .

On va remplacer k par $m\omega^2$ dans la suite, les deux quantités sont équivalentes, la deuxième quantité vient de la fréquence de l'oscillation de l'oscillateur harmonique classique $\omega = \sqrt{k/m}$. On peut donc réécrire (2.18) comme suit

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{k}{2}X^2 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 = \frac{1}{2m}(P^2 + (m\omega X)^2).$$

Définition 14. On introduit l'opérateur d'annihilation a

$$a = \frac{m\omega X + iP}{\sqrt{2\hbar m\omega}},$$

et son adjoint a^* , l'opérateur de création

$$a^* = \frac{m\omega X - iP}{\sqrt{2\hbar m\omega}}.$$

Rappelons que les opérateurs ne commutent pas, on a donc

$$(A - B)(A + B) = A^2 + AB - BA - B^2 = A^2 - B^2 + [A, B].$$

On va calculer a^*a , les calculs sont rigoureux pour tout $\psi \in \text{Dom}(XP) \cap \text{Dom}(PX) \cap \text{Dom}(P^2) \cap \text{Dom}(X^2)$, par exemple pour tout $\psi \in C_c^2$:

$$\begin{aligned} a^*a &= \left(\frac{m\omega X - iP}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \right) \left(\frac{m\omega X + iP}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \right) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} ((m\omega X)^2 + im\omega XP - im\omega PX + P^2) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} ((m\omega X)^2 + P^2 + im\omega[X, P]) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \frac{1}{2m} (P^2 + (m\omega X)^2) - \frac{1}{2}I \end{aligned}$$

On obtient :

$$\hat{H} = \hbar\omega(a^*a + \frac{1}{2}I). \quad (2.19)$$

Proposition 11. *Soient $A, B \in \mathcal{H}$ deux opérateurs tels que*

$$A = aB + bI,$$

où $a, b \in \mathbb{C}$. Si λ est une valeur propre de l'opérateur B associée au vecteur propre ψ (i.e. $B\psi = \lambda\psi$, $\psi \neq 0$).

Alors $a\lambda + b$ est une valeur propre de l'opérateur A associée au vecteur propre ψ .

Démonstration.

$$\begin{aligned} A\psi &= aB\psi + bI\psi \\ &= a\lambda\psi + b\psi \\ &= (a\lambda + b)\psi \end{aligned}$$

Puisque $\psi \neq 0$, on obtient les résultats souhaités. \square

La nouvelle expression de \hat{H} dans (2.19) et la proposition ci-dessus nous permettent de n'étudier que les propriétés spectrales (valeurs propres et vecteurs propres) de l'opérateur a^*a au lieu de celles de l'opérateur \hat{H} , ce qui sera plus facile. Pour revenir ensuite aux vecteurs et valeurs propres de \hat{H} , il nous suffira d'appliquer la proposition 11.

On calcule

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= aa^* - a^*a \\ &= \frac{-i}{\hbar}(XP - PX) \\ &= \frac{-i}{\hbar}[X, P] \\ &= I \end{aligned}$$

Il est donc facile de calculer que

$$\begin{aligned} [a, a^*a] &= [a, a^*]a + a^*[a, a] \\ &= a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [a^*, a^*a] &= [a^*, a^*]a + a^*[a^*, a] \\ &= -a^* \end{aligned}$$

Affirmation 6. *L'opérateur a^*a est auto-adjoint et*

$$\langle \psi, a^*a\psi \rangle \geq 0, \forall \psi \in \text{Dom}(a^*a).$$

Remarque 15. *C'est un opérateur positif car*

$$\langle \psi, a^*a\psi \rangle = \langle a\psi, a\psi \rangle \geq 0, \forall \psi \in \text{Dom}(a^*a).$$

Dans le résultat qui suit nous allons voir en quoi les opérateurs a et a^* sont utiles.

Proposition 12. *Soit $\psi \in \text{Dom}(a^*a) \cap \text{Dom}(a) \cap \text{Dom}(a^*)$, on suppose que ψ est un vecteur propre de a^*a avec comme valeur propre associée λ . Alors*

1. $a^*a\psi = \lambda\psi$
2. $a^*a(a\psi) = (\lambda - 1)a\psi$
3. $a^*a(a^*\psi) = (\lambda + 1)a^*\psi$

Remarque 16. *Soit $a\psi$ est nul, soit $a\psi$ est un vecteur propre pour l'opérateur a^*a avec comme valeur propre associée $\lambda - 1$. De même, soit $a^*\psi$ est nul, soit $a^*\psi$ est un vecteur propre pour l'opérateur a^*a avec comme valeur propre associée $\lambda + 1$.*

Démonstration.

Calcul préliminaire

$$\begin{aligned} [a, a^*a] = a &\Leftrightarrow aa^*a - a^*aa = a \\ &\Leftrightarrow a^*aa = aa^*a - a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [a^*, a^*a] = -a^* &\Leftrightarrow a^*a^*a - a^*aa^* = -a^* \\ &\Leftrightarrow a^*aa^* = a^*a^*a + a^* \end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned} a^*a(a\psi) &= (aa^*a - a)\psi \\ &= a(a^*a\psi) - a\psi \\ &= a\lambda\psi - a\psi \\ &= (\lambda - 1)a\psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a^*a(a^*\psi) &= (a^*a^*a + a^*)\psi \\ &= a^*(a^*a\psi) + a^*\psi \\ &= a^*\lambda\psi + a^*\psi \\ &= (\lambda + 1)a^*\psi \end{aligned}$$

□

Il est à noter que si ψ est un vecteur propre de a^*a avec comme valeur propre associée λ , alors

$$\lambda\langle\psi, \psi\rangle = \langle\psi, a^*a\psi\rangle = \langle a\psi, a\psi\rangle \geq 0,$$

ce qui veut dire que $\lambda \geq 0$.

Donc si λ est valeur propre de a^*a et ψ est le vecteur propre associé, le point 2. de la proposition 12. nous dit qu'à un moment on devrait avoir $\lambda - n < 0$, $n \in \mathbb{N}$. Or on vient de montrer que les valeurs propres de a^*a sont positives. Ce qui implique donc que

$$a^n\psi = 0.$$

On va donc poser

$$n_0 = \max\{n \mid a^n\psi \neq 0\}.$$

Ainsi, on a

$$a^{n_0}\psi \neq 0 \quad \text{et} \quad a^{n_0+1}\psi = 0,$$

ce qui implique que 0 est valeur propre de a .

De plus, si $\phi = a^{n_0}\psi$ alors

$$a\phi = 0.$$

Donc

$$a^*a\phi = 0,$$

or

$$a^*a\phi = (\lambda - n_0)\phi \Rightarrow \lambda \in \mathbb{N},$$

car $\phi = a^{n_0}\psi \neq 0$.

Donc en résumé, on vient de montrer que :

1. Les seules valeurs propres possibles de a^*a sont des entiers.
2. Si ψ est un vecteur propre de a^*a associé à la valeur propre $\lambda = n_0$, alors $a^{n_0}\psi$ est un vecteur propre de a pour la valeur propre 0.

On va maintenant chercher les ϕ tels que $a\phi = 0$.

$$\begin{aligned} a\phi = 0 &\Leftrightarrow (m\omega X + iP)\phi = 0 \\ &\Leftrightarrow m\omega x\phi(x) + \hbar\phi'(x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R} \\ &\Leftrightarrow \phi(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

On doit encore trouver la valeur de la constante C , celle-ci est donnée grâce au fait que ϕ doit être un vecteur unitaire.

Proposition 13. Soit $a > 0$. On a

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{x^2}{2a}} dx = \sqrt{a}.$$

Finalement, on trouve

$$C = \sqrt{\frac{\pi m\omega}{\hbar}}.$$

Soit

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\pi m\omega}{\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \quad (2.20)$$

On veut montrer que ψ_0 est l'unique (à une constante près) vecteur propre de a^*a associé à la valeur propre 0,

$$a^*a\psi = 0 \Leftrightarrow \psi = C\psi_0. \quad (2.21)$$

Pour \Leftarrow) c'est trivial.

Pour \Rightarrow) si $a^*a\psi = 0$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi, a^*a\psi \rangle \\ &= \langle a\psi, a\psi \rangle \\ &= \|a\psi\|^2. \end{aligned}$$

Donc $a\psi = 0$ et $\psi = C\psi_0$ d'après ce qu'on a montré précédemment.

D'après le point 3. de la proposition 12, on a que n est valeur propre de a^*a et que $(a^*)^n\psi_0$ est le vecteur propre associé (si $\psi_0 \neq 0$).

Soit $n \in \mathbb{N}$. On souhaite maintenant montrer que si ϕ_n vérifie

$$a^* a \phi_n = n \phi_n$$

alors

$$\phi_n = C(a^*)^n \psi_0.$$

En d'autre terme, on veut montrer que tous les vecteurs propres de a^*a sont de la forme $C(a^*)^n \psi_0$, et donc que 0 est la plus petite valeur propre de a^*a .

On le montre par récurrence, pour $n = 0$ c'est (2.21) qui nous le dit.

Soit $n \in \mathbb{N}^*$. On suppose que $\phi_n = C(a^*)^n \psi_0$ est vrai jusqu'au rang n . Si

$$a^* a \phi_{n+1} = (n+1) \phi_{n+1}, \quad (2.22)$$

la proposition 12.2. nous donne

$$a^* a (a \phi_{n+1}) = n a \phi_{n+1}$$

Par hypothèse de récurrence, on a donc

$$a \phi_{n+1} = C(a^*)^n \psi_0.$$

Et donc dans (2.22), on a

$$a^* C(a^*)^n \psi_0 = (n+1) \phi_{n+1} \Leftrightarrow C(a^*)^{n+1} \psi_0 = (n+1) \phi_{n+1}$$

Donc ψ_0 est un vecteur propre de a^*a associé à la valeur propre 0 qui est la plus petite valeur propre de a^*a . On appelle ψ_0 l'état fondamental du système. Pour avoir les autres valeurs propres de a^*a , il suffit d'appliquer successivement a^* à ψ_0 . Les autres vecteurs propres de a^*a sont appelés états excités.

Théorème 2. Soit ψ_0 le vecteur unitaire défini par (2.20) respectant $a\psi_0 = 0$. Alors les vecteurs $\psi_n := \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0$, $n \geq 0$ satisfont les propriétés suivantes $\forall n, m \geq 0$:

1. $a^* \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}$
2. $a^* a \psi_n = n \psi_n$
3. $\langle \psi_n, \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$
4. $a \psi_{n+1} = \sqrt{n+1} \psi_n$

Remarque 17. $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ est donc une "chaîne" de vecteurs propres de a^*a orthonormée.

Démonstration.

1. Par définition

$$\begin{aligned} a^* \psi_n &= a^* \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 \\ &= \sqrt{\frac{(n+1)!}{n!}} \frac{(a^*)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} \psi_0 \\ &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} a^* a \psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} a^* a ((a^*)^n \psi_0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} n (a^*)^n \psi_0 \\ &= n \psi_n \end{aligned}$$

3. Les vecteurs propres d'un opérateur auto-adjoint avec des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.

En effet, soient ϕ et ψ deux vecteurs propres associé à des valeurs propres distinctes λ et μ respectivement. On a

$$\begin{aligned} \langle \phi, A\psi \rangle &= \langle \phi, \mu\psi \rangle = \mu \langle \phi, \psi \rangle \\ &\parallel \\ \langle A\phi, \psi \rangle &= \langle \lambda\phi, \psi \rangle = \lambda \langle \phi, \psi \rangle \end{aligned}$$

Comme on a supposé que $\mu \neq \lambda$, on a donc

$$\langle \phi, \psi \rangle = 0.$$

Donc ϕ et ψ sont orthogonaux.

Donc si $n \neq m$, on a

$$\langle \psi_n, \psi_m \rangle = 0.$$

Si $n = m$, on raisonne par récurrence. Pour $n = 0$, on a bien

$$\langle \psi_0, \psi_0 \rangle = |\psi_0|^2 = 1.$$

Soit $n \in \mathbb{N}^*$. On suppose que $\langle \psi_n, \psi_n \rangle = 1$ est vrai jusqu'au rang n .

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{n+1}, \psi_{n+1} \rangle &= \left\langle \sqrt{\frac{1}{n+1}} a^* \psi_n, \sqrt{\frac{1}{n+1}} a^* \psi_n \right\rangle \\
&= \frac{1}{n+1} \langle a^* \psi_n, a^* \psi_n \rangle \\
&= \frac{1}{n+1} \langle \psi_n, a a^* \psi_n \rangle \\
&= \frac{1}{n+1} \langle \psi_n, (a^* a + I) \psi_n \rangle \\
&= \frac{1}{n+1} (\langle \psi_n, a^* a \psi_n \rangle + \langle \psi_n, \psi_n \rangle) \\
&= \frac{1}{n+1} (\langle \psi_n, n \psi_n \rangle + \langle \psi_n, \psi_n \rangle) \\
&= \frac{1}{n+1} (n+1) \langle \psi_n, \psi_n \rangle \\
&= \langle \psi_n, \psi_n \rangle \\
&= 1
\end{aligned}$$

4.

$$\begin{aligned}
a \psi_{n+1} &= \sqrt{\frac{1}{n+1}} a a^* \psi_n \\
&= \sqrt{\frac{1}{n+1}} (a^* a + I) \psi_n \\
&= \sqrt{\frac{1}{n+1}} (n+1) \psi_n \\
&= \sqrt{n+1} \psi_n
\end{aligned}$$

□

Il est maintenant raisonnable de se demander si les vecteurs $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ forment une base orthonormale pour l'espace de Hilbert (base hilbertienne).

Théorème 3. *L'état fondamental ψ_0 de l'oscillateur harmonique est donné par (2.20). Les états excités ψ_n sont donnés par*

$$\psi_n = H_n \psi_0, \quad (2.23)$$

où H_n est un polynôme de degré n donné inductivement par la formule

$$\begin{aligned}
H_0 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) &= I, \\
H_{n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) - \frac{dH_n}{dx} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \right),
\end{aligned}$$

où les H_n sont les polynômes d'Hermite.

Remarque 18. ψ_n est bien dans le domaine de l'opérateur a^*a , en effet c'est le produit d'un polynôme et d'une Gaussienne. En particulier $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ forme un ensemble orthogonal de fonction dans $L^2(\mathbb{R})$.

Il ne nous reste plus qu'à montrer que $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ forme une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$. C'est l'objet du prochain théorème.

Pour pouvoir le démontrer, on a besoin du résultat suivant :

Lemme 1. Soit $\alpha \in \mathbb{C}$. La suite des sommes partielles de la série

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}},$$

converge dans $L^2(\mathbb{R})$ vers la fonction $e^{\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}}$.

Démonstration. On doit montrer que

$$\left\| e^{\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} - \sum_{n=0}^N \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right\|_2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0.$$

Or, on a

$$\begin{aligned} & \left\| e^{\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} - \sum_{n=0}^N \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right\|_2^2 \\ &= \left\| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right\|_2^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right|^2 d\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right). \end{aligned}$$

$\forall x \in \mathbb{R}$,

$$\left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right|^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0.$$

De plus,

$$\begin{aligned}
\left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right|^2 &\leq \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \left| \frac{\alpha^n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right| \right)^2 \\
&= \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{|\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)|^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right)^2 \\
&\leq \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)|^n}{n!} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}} \right)^2 \\
&= e^{2|\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)|} e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}
\end{aligned}$$

et

$$\int_{\mathbb{R}} e^{2|\alpha \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)|} e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2} dx < \infty.$$

Donc on peut appliquer le théorème de convergence dominée, ce qui permet de conclure. \square

Théorème 4. *Les fonctions*

$$\psi_n(x) = H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \sqrt{\frac{\pi m\omega}{\hbar}} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right),$$

forment une base orthonormale pour l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$.

Démonstration. Dans la remarque 18, on a montré que $\psi_n \in L^2(\mathbb{R})$, et dans le point 3. du théorème 4. nous donne que les ψ_n sont orthogonaux. Donc $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$ forme un ensemble de vecteurs orthogonaux de $L^2(\mathbb{R})$.

On a vu que les ψ_n sont des vecteurs propres de l'opérateur \hat{H} .

Il ne reste donc plus qu'à montrer que $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$ forme une base orthonormale de $L^2(\mathbb{R})$.

Soit V l'ensemble des combinaisons linéaires finies de ψ_n . Comme H_n est un polynôme de degré n , V est l'ensemble des fonctions de la forme

$$\psi \left(\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \right) = p \left(\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \right) e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}},$$

où p est un polynôme.

Le lemme 1 montre que $e^{ik \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)} e^{-\frac{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)^2}{2}}$ appartient à la fermeture de V dans $L^2(\mathbb{R})$, $\forall k \in \mathbb{R}$.

Ainsi, si ψ est orthogonale à chaque élément de \overline{V} , on a

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-ik(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)} e^{-\frac{(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}{2}} \psi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) dx = 0, \quad (2.24)$$

$\forall k$.

Comme $e^{-\frac{(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}{2}}$ appartient à $L^\infty(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ et ψ appartient à $L^2(\mathbb{R})$, leur produit appartient à $L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$.

(2.24) nous dit donc que la transformée de Fourier dans $L^2(\mathbb{R})$ de $e^{-\frac{(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}{2}} \psi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ est identiquement nulle. Donc, $e^{-\frac{(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^2}{2}} \psi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$ doit être l'élément nulle de $L^2(\mathbb{R})$, et donc $\psi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) = 0$ presque partout.

On a donc montré que $V^\perp = \{0\}$, donc que V est dense dans $L^2(\mathbb{R})$. Et donc que $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ est une base orthonormale de $L^2(\mathbb{R})$. \square

On va maintenant voir si la position et l'impulsion moyenne de l'oscillateur harmonique quantique suivent la trajectoire de l'oscillateur harmonique classique.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X \rangle_{\psi(t)} &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [X, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x, t)} (X \hat{H} \psi - \hat{H} X \psi)(x, t) dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x, t)} \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^3 \psi + \frac{i\hbar}{2m} \left(2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) - \frac{k}{2} x^3 \psi \right) dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x, t)} \frac{i\hbar}{2m} 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \\ &= \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} (\psi(x, t)) dx \\ &= \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x, t)} (P\psi)(x, t) dx \\ &= \frac{1}{m} \langle P \rangle_{\psi(t)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle P \rangle_{\psi(t)} &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [P, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} (P\hat{H}\psi - \hat{H}P\psi)(x,t) dx \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi} \left(\frac{i\hbar^3}{2m} \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} - \frac{i\hbar}{2} k(2x\psi + x^2 \frac{\partial \psi}{\partial x}) - \frac{i\hbar^3}{2m} \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} + \frac{k}{2} (i\hbar)x^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} \frac{-i\hbar}{2} k 2x \psi(x,t) dx \\
&= - \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} kx \psi(x,t) dx \\
&= - \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} (V'(X)\psi)(x,t) dx \\
&= - \langle V'(X) \rangle_{\psi(t)}
\end{aligned}$$

La position et l'impulsion de l'oscillateur harmonique classique respectent les expressions (1.13). Mais il faut faire attention, car traduit en termes de position moyenne et d'impulsion moyenne, on devrait avoir

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle X \rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m} \langle P \rangle_{\psi(t)}, \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle_{\psi(t)} = -V'(\langle X \rangle_{\psi(t)}). \end{cases}$$

On va montrer que dans le cas de l'oscillateur harmonique quantique, on a bien

$$\langle V'(X) \rangle_{\psi(t)} = V'(\langle X \rangle_{\psi(t)}).$$

C'est la linéarité de V' qui permet de conclure. En effet

$$\langle V'(X) \rangle_{\psi(t)} = \langle kX \rangle_{\psi(t)} = k \langle X \rangle_{\psi(t)} = V'(\langle X \rangle_{\psi(t)}).$$

Ainsi, l'oscillateur harmonique quantique est aussi un des cas particulier dans lequel la valeur moyenne de la position et de l'impulsion correspondent exactement à la trajectoire de l'oscillateur harmonique classique.

Conclusion

En guise de conclusion, on va introduire trois autres principes très importants en mécanique quantique que l'on n'a pas eu l'occasion de développer dans ce mémoire. On verra aussi l'un des phénomènes que la théorie quantique a permis d'expliquer, et finalement, on verra pourquoi le comportement probabiliste a été tant controversé.

Le premier principe que l'on va introduire est le principe d'indétermination d'Heisenberg. Ce principe découle une nouvelle fois de la non-commutation des opérateurs de position X et d'impulsion P . Il établit que pour tout ψ dans $L^2(\mathbb{R})$ satisfaisant certaines conditions de domaines, on a

$$(\Delta_\psi X)(\Delta_\psi P) \geq \frac{\hbar}{2},$$

où Δ_ψ est une notation pour décrire la variance d'une variable aléatoire. Cette relation montre que l'on ne peut pas connaître *simultanément* aussi précisément que l'on veut la position et la vitesse d'une particule. Et ce n'est pas dû à un manque de précision de nos appareils de mesure mais bien à une propriété fondamentale des particules : plus on essaye de connaître avec précision la position d'une particule et plus la vitesse de celle-ci devient indéterminée. Ce résultat est démontré dans le chapitre 12 de [1].

Le second principe très important que l'on n'a pas pu aborder dans ce mémoire est l'*effet tunnel*. Pour faire simple, en mécanique classique il existe des barrières de potentiel, ce sont des zones qu'un objet ne peut pas traverser car il ne possède pas assez d'énergie, il rebondit tout simplement dessus. Et bien en mécanique quantique, une particule peut "traverser" une barrière de potentiel si celle-ci est assez fine, c'est un peu comme si elle avait réussi à creuser un tunnel dans la barrière, d'où le nom dudit principe.

Le troisième principe est la *réduction du paquet d'onde*. On a omis de dire quelque chose quand on a présenté le comportement probabiliste de la matière. On a dit qu'il n'était pas possible de prédire le résultat d'une mesure. Mais le lecteur attentif aura peut être remarqué que dans la figure (2.2), on

trouve dans 100% des cas la couleur de la particule mesurée lors de la première mesure. C'est un phénomène que l'on a encore beaucoup de mal à interpréter de nos jours. Cela a par exemple conduit à l'expérience de pensée du *chat de Schrödinger*, qui a la base à été inventée par Erwin Schrödinger pour tenter de montrer l'incohérence de ce phénomène au niveau macroscopique. Voir la *réduction du paquet d'onde* ou l'*effondrement de la fonction d'onde* pour plus d'information.

L'un des succès majeurs de la mécanique quantique est qu'elle a notamment permis d'expliquer la stabilité de la matière. En effet, on peut résoudre le modèle de l'atome d'hydrogène avec une méthode analogue à celle utilisée pour résoudre le modèle de l'oscillateur harmonique (calcul des valeurs/vecteurs propres). Cela permet d'expliquer qu'un électron orbitant autour d'un proton ne peut pas être sur n'importe quelle orbite. Un électron peut changer d'orbite, soit pour aller vers une orbite plus proche du proton en émettant un photon, soit pour aller vers une orbite plus lointaine du proton en absorbant un photon. Et l'électron ne peut pas rentrer en collision avec le proton car il existe une orbite minimale, c'est-à-dire la plus petite orbite où puisse se trouver un électron autour du proton. Voir le chapitre 18 de [1] pour plus d'informations.

Pour finir, le comportement probabiliste de la matière et le principe d'incertitude ont été très controversés au début de la théorie quantique. Certains physiciens ont pensé que la théorie n'était pas complète, c'est-à-dire que la théorie était vouée à disparaître pour être remplacé par une nouvelle théorie où le comportement probabiliste ne serait plus présent. Ils pensaient qu'il devait y avoir un certain nombre de variables cachées susceptibles de décrire le comportement de la matière de façon déterministe. Albert Einstein lui-même a eu énormément de mal avec cela, il disait d'ailleurs : "Quantum mechanics is certainly imposing. But an inner voice tells me that it is not yet the real thing. The theory says a lot, but does not really bring us any closer to the secret of the « old one ». I, at any rate, am convinced that He does not throw dice", où par 'He' il signifiait Dieu. Il a d'ailleurs écrit un article avec l'aide de Boris Podolsky et de Nathan Rosen pour tenter d'expliquer pourquoi la théorie quantique était incomplète (voir l'article EPR [11] pour plus d'informations). Mais aujourd'hui l'argument de l'article EPR n'est plus valable et on pense que le comportement probabiliste de la matière est bien réel. Voir [12] et les inégalités de Bell pour plus d'informations.

Bibliographie

- [1] Brian C. Hall. *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer, 2013.
- [2] Allan Adams. *Introduction to Superposition*. <https://www.youtube.com/watch?v=1Z3bPUKo5zc&list=PLU14u3cNGP61-9PEhRognw5vryrSEVLPr>.
- [3] Allan Adams. *Operator Methods for the Harmonic Oscillator*. https://www.youtube.com/watch?v=jJX_1zT73U0&index=9&list=PLU14u3cNGP61-9PEhRognw5vryrSEVLPr.
- [4] Barton Zwiebach. *Quantum Harmonic Oscillator Part I*. <https://www.youtube.com/watch?v=qu-jyrwW6hw&index=8&list=PLU14u3cNGP61-9PEhRognw5vryrSEVLPr>.
- [5] Inconnu. *Cours de mécanique quantique (part1)*. <https://www.youtube.com/watch?v=eBx80Cw6xRc&t=996s>.
- [6] Ian Stewart. *17 équations qui ont changé le monde*. Flammarion, 2015. Pages 305-329.
- [7] Étienne Klein. *Petit voyage dans le monde des quanta*. Flammarion, 2004.
- [8] Étienne Klein. *Etienne Klein - La mécanique quantique*. <https://www.youtube.com/watch?v=SsxhJbcxeQs&t=819s>.
- [9] David Louapre. *La mécanique quantique en 7 idées*. <https://www.youtube.com/watch?v=Rj3jTw2DxXQ&t=362s>.
- [10] David Louapre. *La théorie des cordes*. <https://www.youtube.com/watch?v=rXhzeKh8yBk&t=190s>.
- [11] A. Einstein, Yu Podolsky, and N. Rosen. *Phys. Rev.*, 47 :777, 1935.
- [12] Nicolas Gisin. *L'Impensable Hasard*. Odile Jacob, 2016.

Table des figures

1.1	Exemple de la trajectoire d'une particule libre ($x_0 = 1$, et $v_0 = 2$).	10
1.2	Exemple de la trajectoire d'un oscillateur harmonique ($x_0 = 2$ et $v_0 = 3$).	11
2.1	Résultats de la mesure de la couleur/dureté d'un électron choisi aléatoirement.	22
2.2	Résultats de la mesure de la couleur lorsque l'électron a été mesuré blanc lors de la première mesure.	23
2.3	Résultats de la mesure de la couleur lorsque l'électron a d'abord été mesuré blanc puis mou.	23
2.4	Processus de quantification	29