

3 La mécanique matricielle de Heisenberg

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

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

Nous avons déjà remarqué que cette équation peut être écrite comme

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

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

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

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

$$\mathbf{p} \equiv -i\hbar \Delta \quad \mathbf{p}^a \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^a} \quad v = x, y, z$$

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

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

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

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

Avec ces définitions, il est clair que

$$H\psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\langle p_2^0 \rangle = \langle p_2^0 \rangle - \langle p_2^0 \rangle = (\Delta p)_2^2$$

d'où

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

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

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

Elle nous dit qu'il est impossible de connaître avec une précision arbitraire la position x et l'impulsion p d'une particule. Mais x exprime la trajectoire - caractéristique de particule - et $p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda}$ la longueur d'onde - caractéristique de Heisenberg est donc une conséquence directe du principe de complémentarité quantique de Bohr.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2 Principe d'incertitude de Heisenberg

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

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

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

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (20)$$

Preuve :

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

Définissons

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

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

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

Sa norme au carré doit être positive

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

Mais

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

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

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

mais

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

découle des propriétés de la transformée de Fourier.

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

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

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

propre x, y, z par définition. La transformée de Fourier

Il est clair qu'une fonction $\psi(\mathbf{r})$ est vecteur propre de x, y, z avec valeur opérateur quantité de mouvement sur le même espace.

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

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

sommable.

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

Exemples :

physique en question.

espace vectoriel, typiquement de dimension infinie) qui caractérise la quantité aux valeurs propres d'une matrice (d'un opérateur linéaire qui agit sur un

valeurs « observables » (mesurables) d'une quantité physique correspondent les

Nous pouvons donc récapituler l'essentiel de la théorie de Heisenberg. Les

tification canonique ».

tités physiques observables par des opérateurs hermitiques s'appelle « quan-

Nous verrons par la suite que la procédure formelle de représenter des quan-

Le lien entre les théories de Schrödinger et Heisenberg est donc établi.

$$\begin{aligned} [x, p_x]\phi &= x p_x \phi - p_x x \phi \\ &= x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi + i\hbar x \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \phi \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \phi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ &= 0 \end{aligned}$$

l'infini. Finalement nous pouvons montrer que $[x, p_x] = i\hbar$:

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

où la dérivée par rapport à une matrice est définie comme

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

x et p ,

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

$$x \cdot p - p \cdot x = i\hbar I$$

D'après la relation

premiers n'existe pas).

théorie de la mécanique quantique déduite seulement à partir de principes

théorie de Schrödinger (qui, à son tour, est obtenue à partir de postulats : une

p et x est introduit comme postulat, mais on voit qu'il est en accord avec la

seulement des valeurs discrètes de l'énergie sont possibles. Il faut donc que x

La physique classique. Ceci est contraire à l'idée qu'en mécanique quantique

Les valeurs propres de H seraient donc toutes les valeurs prévues par

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

de x et p . Donc

Mais ces vecteurs sont aussi vecteurs propres de $H(x, p)$, qui est une fonction

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

Nous avons

nalise x et p sont vecteurs propres de x et p par définition. Appelons-le $\phi_{p,x}$.

alors il existe une transformation unitaire U qui diagonalise les deux opérateurs,

matrice en dimension infinie et avec des indices continus)

verrons que cela est possible si on généralise la définition mathématique de

valeurs propres correspondant à l'ensemble de tous les nombres réels (nous

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.1 Lien avec la théorie de Schrödinger

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

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

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

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

avec le produit scalaire défini comme

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

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

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

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

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

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

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

Pour \hat{p}_x

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

Intégrons par parties

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