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

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

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

Equation de Schrödinger (particule libre)

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

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

Equation de Schrödinger (oscillateur harmonique)

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

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

5 Formulation générale de la mécanique quantique

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

5.1 Les postulats de la mécanique quantique

5.1.1 Postulat I : état d'un système

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

Commentaires

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

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

5.1.2 Postulat II : quantités observables

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

Commentaires

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

5.1.3 Postulat III : probabilité et processus de mesure

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

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \,. \tag{56}$$

Si $|\psi\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{A}$, par exemple $|\psi\rangle = |a_n\rangle$ avec valeur propre a_n de $\hat{A}$, alors la mesure de l'observable $|A\rangle$ donnera **avec certitude** la valeur a_n. Ceci est consistent avec l'espérance définie par l'équation (56) : $\langle A\rangle = \langle a_n|\hat{A}|a_n\rangle = a_n\langle a_n|a_n\rangle = a_n$.

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

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

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

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

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

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

Par exemple :

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

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

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

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

En représentation des positions

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\frac{e^{i\frac{p}{\hbar}x}}{N}\tilde{\phi}(p) = \phi(x) \tag{78}$$

Où nous avons indiqué la représentation des impulsions des $|\phi\rangle$ avec $\tilde{\phi}(p)$. D'après (78) on voit que $\phi(x)$ et $\tilde{\phi}(p)$ sont liés par la transformée de Fourier. En représentation des impulsions, par contre,

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

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

On a donc

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

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

Commentaires

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

$$|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle\,. \tag{57}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_n\sum_m \langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|\hat{A}|a_m\rangle\langle a_m|\psi\rangle \\
&= \sum_n\sum_m \langle\psi|a_n\rangle a_m\langle a_n|a_m\rangle\langle a_m|\psi\rangle \\
&= \sum_n\sum_m \langle\psi|a_n\rangle a_m\langle a_m|\psi\rangle\delta_{nm} \\
&= \sum_m a_m|\langle a_m|\psi\rangle|^2
\end{aligned} \tag{58}$$

Ce résultat doit être interprété comme une valeur moyenne au sens statistique. Le résultat de la mesure est une des valeurs propres a_m, avec probabilité $|\langle a_m|\psi\rangle|^2$. En d'autres mots, supposons d'avoir N répliques identiques d'un système dans un état $|\psi\rangle$ et d'effectuer la même mesure de $\hat{A}$ sur chacun des ces systèmes. L'interprétation correcte du concept de probabilité est que chaque mesure donnera une parmi les valeurs propres a_n. Pour N suffisamment grand, nous pourrions en principe calculer la distribution statistique des résultats des N mesures. Cette distribution serait exactement donnée par $|\langle a_m|\psi\rangle|^2$. Dans ce sens, la théorie de la mécanique quantique est parfaitement déterministe, puisque elle définit tous les résultats possibles d'une mesure et en donne avec précision les différentes probabilités. A titre d'exemple, considérons l'opérateur de la position $\hat{x}$. Nous pouvons définir formellement ses états propres $|x\rangle$, tels que $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$.[5] Il s'ensuit que la probabilité de mesurer la valeur x de la position du système est donnée par $|\langle x|\psi\rangle|^2$. Mais cette probabilité est donnée, dans le cadre de la théorie de Schrödinger, par le module au carré $|\psi(x)|^2$ de la fonction d'onde $\psi(x)$. La formulation générale de la mécanique quantique permet donc d'identifier la fonction d'onde d'un état $|\psi\rangle$, évaluée à la position x, comme étant la projection de l'état $|\psi\rangle$ sur l'état propre $|x\rangle$ de la position :

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle\,. \tag{59}$$

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

   Une question beaucoup plus profonde est celle concernant les *variables*

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

Représentation des impulsions

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

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

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

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

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

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

et

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

ce qui implique

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

La solution de cette équation est

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

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

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

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

Vérifions la relation de complétude

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

Ecrivons ce produit scalaire en représentation des positions

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

Nous connaisssons déjà un objet mathématique qui a cette propriété. C'est la fonction “delta” de Dirac

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

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

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

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

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

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

Vérifions-la :

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

En représentation des positions

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

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

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

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

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

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

5.1.4 Postulat IV : relations de commutation canoniques

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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\hat{I}\,. \tag{60}$$

Commentaires

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

5.1.5 Postulat V : équation de Schrödinger

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}, t)|\varphi(t)\rangle\,, \tag{61}$$

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t) = H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\varphi(x,t)\,. \tag{62}$$

Commentaires

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

Spectre continu

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

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

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

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

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

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

Par la définition d'état propre nous avons

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

et par la définition d'opérateur de position

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

d'où

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

Donc

$$\phi_{x_0}(x) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases} \tag{77}$$

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

La fonction (77) n'est pas une fonction $L^{(2)}(\mathbb{R})$. Il faut donc introduire une extension de $L^{(2)}(\mathbb{R})$ pour inclure ces nouvelles fonctions d'onde. L'orthogonalité entre $|\phi_{x_0}\rangle$ et $|\phi_{x_1}\rangle$ ($x_0 \neq x_1$) est déjà assurée : il suffit d'écrire le produit scalaire dans la représentation des positions :

$$\langle\phi_{x_0}|\phi_{x_1}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\phi^*_{x_0}(x)\phi_{x_1}(x) = 0 \quad \text{d'après (77)}$$

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

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

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

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

Nous pouvons donc indiquer cette amplitude par

$$\langle\phi_n|\phi\rangle \equiv f(a_n, b_n, c_n, ...) \tag{76}$$

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

Grâce à l'unicité de la base générée par un ECOC, l'expression (76) nous dit que f est une fonction complètement définie. Elle peut donc être utilisée pour représenter l'état $|\phi\rangle$. On dit que $|\phi\rangle$ est donné par $f(a, b, c, ...)$ dans la représentation des observables $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$....

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\varphi(x,t) = \varphi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) , \tag{63}$$

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

$$H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) . \tag{64}$$

5.2 Le processus de mesure

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

$$|\langle a_n|\psi\rangle|^2 \tag{65}$$

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

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{66}$$

Il est très important de souligner l'interprétation statistique de ce postulat. Pour bien comprendre les deux résultats (65) et (66), nous devons imaginer d'avoir préparé un ensemble statistique composé d'un grand nombre de répliques identiques du système dans l'état $|\psi\rangle$, et d'effectuer la mesure une fois sur chacun de ces systèmes. Le Postulat III affirme que l'analyse statistique des différents résultats obtenus, donnera une distribution de probabilité (65) et une valeur moyenne (66).

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

$$\sum_{i=1}^{r} \left|\langle a_n^{(i)}|\psi\rangle\right|^2 \tag{67}$$

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

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

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

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

$$|\psi'\rangle=\sum_{m=1}^{\infty}\langle a_n,b_m|\psi\rangle|a_n,b_m\rangle\,. \tag{68}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{A}=\sum_j a_j|\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$
$$\hat{B}=\sum_j b_j|\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

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

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

Dans ce sous-espace nous pouvons construire l'opérateur

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

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

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

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

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

5.5 Représentations des états

Le concept de ECOC est très important en mécanique quantique. L'unicité de la base $\{|\phi_n\rangle\}$ nous permet de représenter un élément de la base par qui diagonalise simultanément $\hat{A}$ et $\hat{B}$. Ce fait est vrai pour un nombre quelconque d'observables $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, ...$, pourvu qu'ils commutent tous entre eux. La base $\{|\phi_n\rangle\}$ est telle que

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\Delta\hat{A}_{|\psi\rangle}\Delta\hat{B}_{|\psi\rangle} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]|\psi\rangle\right|, \tag{69}$$

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

$$\Delta\hat{O}_{|\psi\rangle} = \sqrt{\langle\psi|\hat{O}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle^2} \tag{70}$$

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

$$\begin{aligned}&\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^\dagger = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \\ \Rightarrow \quad &\langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]|\psi\rangle^* = -\langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]|\psi\rangle\end{aligned} \tag{71}$$

On définit les opérateurs hermitiques

$$\begin{aligned} \hat{A}_0 &= \hat{A} - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\hat{I} \\ \hat{B}_0 &= \hat{B} - \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle\hat{I} \end{aligned} \tag{72}$$

qui satisfont

$$\begin{aligned} &\langle\psi|\hat{A}_0^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - 2\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2 = \Delta\hat{A}^2_{|\psi\rangle} \\ &\left[\hat{A}_0, \hat{B}_0\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \\ &\hat{A}_0^\dagger = \hat{A}_0 \end{aligned} \tag{73}$$

et on considère

$$\begin{aligned} & f(\lambda) = \left\|\left(\hat{A}_0 - i\lambda\hat{B}_0\right)|\varphi\rangle\right\|^2 \geq 0 \quad (\forall\lambda) \\ \text{Mais} \quad & f(\lambda) = \langle\psi|\left(\hat{A}_0 + i\lambda\hat{B}_0\right)\left(\hat{A}_0 - i\lambda\hat{B}_0\right)|\psi\rangle \\ \text{soit} \quad & f(\lambda) = \langle\psi|\hat{A}_0^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|\hat{B}_0^2|\psi\rangle - i\lambda\langle\psi|\hat{A}_0\hat{B}_0|\psi\rangle + i\lambda\langle\psi|\hat{B}_0\hat{A}_0|\psi\rangle \\ & \quad = \langle\psi|\hat{A}_0^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|\hat{B}_0^2|\psi\rangle + \lambda\underbrace{\left(-i\langle\psi|\left[\hat{A}_0, \hat{B}_0\right]|\psi\rangle\right)}_{\in\mathbb{R}} \end{aligned} \tag{74}$$

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

$$\begin{aligned} & \Delta = \left(-i\langle\psi|\left[\hat{A}_0, \hat{B}_0\right]|\psi\rangle\right)^2 - 4\langle\psi|\hat{A}_0^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{B}_0^2|\psi\rangle \leq 0 \\ \Rightarrow \quad & \left(\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2\right)\left(\langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle^2\right) \geq \frac{1}{4}\left|\langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]|\psi\rangle\right|^2 \\ \Rightarrow \quad & \Delta\hat{A}_{|\psi\rangle}\Delta\hat{B}_{|\psi\rangle} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|\left[\hat{A}, \hat{B}\right]|\psi\rangle\right| \end{aligned} \tag{75}$$

Il est donc impossible de mesurer simultanément est avec une précision arbitraire deux observables qui ne commutent pas. En particulier, pour $\hat{A} = \hat{x}$ et $\hat{B} = \hat{p}_x$, ce résultat coïncide avec le principe d'incertitude de Heisenberg pour la position et la quantité de mouvement (20).

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

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

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

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

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

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

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

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

Dans cette base, la représentation devient

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

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

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

5.4 Ensembles complets d'observables qui commutent

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

C'est le produit entre deux matrices

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ . \\ . \\ a_n \\ . \\ . \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1^* & . & . & b_n^* & . & . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & . & . & . & . \\ a_2 b_1^* & . & & & & \\ . & & . & & & \\ . & & & . & & \\ . & & & & . & \\ . & & & & & . \end{pmatrix}$$

Appliquons cet opérateur à un vecteur

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

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

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

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

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

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

dont la preuve est immédiate.

5.3 Espaces de Hilbert et opérateurs

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

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

Propriétés du produit scalaire :

1. (χ, ϕ) linéaire par rapport à ϕ
2. (χ, ϕ) antilinéaire par rapport à χ

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

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

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

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

Nous indiquons cela par un “vecteur colonne”

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Le "bra" correspondant à $|\xi\rangle$ est

$$\begin{aligned} & \left(\sum_n A^*_{1n} a^*_n, \ \ . \ \ . \ \ , \sum_n A^*_{jn} a^*_n, \ \ . \ \ .\right) = \langle \xi | \\ = & \left(\sum_n a^*_n (\hat{A}^\dagger)_{n1}, \ \ . \ \ . \ \ . \ \ , \sum_n a^*_n (\hat{A}^\dagger)_{nj}, \ \ . \ \ .\right) \\ = & \left(a^*_1, \ \ . \ \ . \ \ a^*_n, \ \ . \ \ .\right) \begin{pmatrix} (\hat{A}^\dagger)_{11} & (\hat{A}^\dagger)_{12} & . & . & . & . \\ (\hat{A}^\dagger)_{21} & . & & & & \\ . & & . & & & \\ . & & & . & & \\ . & & & & . & \\ . & & & & & . \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Cet objet peut être indiqué par

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

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

Exemple : Etats cohérents $|z\rangle$

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

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

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

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

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

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \qquad et \qquad |\xi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

alors

$$|\phi\rangle\langle\xi| = \begin{pmatrix} a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \left(b^*_1 \ \ . \ \ . \ \ b^*_n \ \ . \ \ .\right)$$

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

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

$$|\phi\rangle$$

qu'on appelle "ket".

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

$$\langle\xi|$$

qu'on appelle "bra".

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\phi = \begin{pmatrix} a_1 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ a_N \end{pmatrix} \qquad \xi = \begin{pmatrix} b_1 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ b_N \end{pmatrix}$$

Le produit scalaire est écrit avec le symbole

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

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

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

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

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

Nous comprenons immédiatement que, pour remplir toutes les propriétés du produit scalaire, P_ξ est une fonction linéaire. Il est possible de montrer que l'ensemble des fonctions $\{P_\xi, \xi \in \mathcal{H}\}$ forme un espace vectoriel qui a exactement les mêmes propriétés que $\mathcal{H}'$, espace des vecteurs ligne. En d'autres termes, si $\xi, \phi \in \mathcal{H}$ et

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

alors

$$P_\xi \longleftrightarrow \begin{pmatrix} b_1^* & ,..., & b_N^* \end{pmatrix}$$

puisque

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

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

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

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

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

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

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

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

ce qui est possible seulement en dimension infinie.

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

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

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

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

$$\phi = \begin{pmatrix} a_1 \\ . \\ . \\ a_n \\ . \\ . \end{pmatrix} \qquad a_j \in \mathbb{C}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

avec

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