Translations - Quantité de mouvement - Position.

I L'opérateur de translation.

1) Système quantique isolé, invariant par translation spatiale, donc il existe un opérateur unitaire $U(a)$ dans l'espace de Hilbert H des etats. Si $v \in H$, représente l'état du système dans un référentiel R, alors le vecteur $U(a)v$ représente le même état dans le référentiel R' obtenu en translatant R de a.

2) Les translations forment un groupe additif, donc les opérateurs $\{U(a)\}$ forment une représentation du groupe : $U(a).U(b) = U(a+b)$

II Le générateur infinitésimal.

1) Théorème.

D'après le théorème de S.N.A.G., il existe un opérateur hermitique P tel que $U(a) = \exp(i a P/\hbar)$, P: générateur infinitésimal

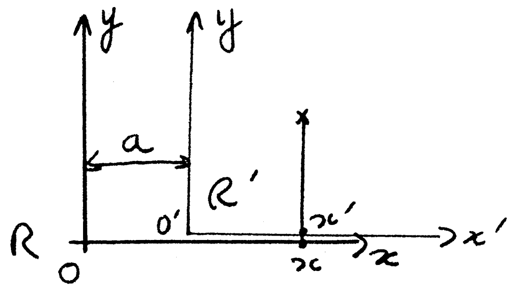
$$\left(U(\delta a) = I + i\,\delta a\,P + O(\delta a^2)\right)$$

2) Interprétation physique

Soient : v_p un vecteur propre de P et a une translation alors on a : $P.u_p = p.v_p$ et $v_p \to U(a)\,u_p = \exp(iaP)u_p$ d'où $U(a)\,u_p = e^{iap}.u_p$. Il y a donc un comportement harmonique en a, donc v_p est un état propre de la quantité de mouvement, avec la valeur propre p, donc P est la grandeur physique quantité de mouvement.

III La position

Elle est définie par l'opérateur X.



Nous avons $x' = x - a$

Pour un état u : $\langle u | X | u \rangle$ = valeur moyenne de la position du système dans l'état $|u\rangle$

On exige : $\langle u' | X | u' \rangle = \langle u | X | u \rangle - a$,

où : $|u'\rangle = U(a)|u\rangle$ (U unitaire)

donc : $\langle u' | = \langle u | U^{+}(a) = \langle u | U^{-1}(a)$

et : $\langle u | U^{-1}(a)\, X\, U(a) | u \rangle = \langle u | X | u \rangle - a \quad \forall u \in \mathcal{H}$

$\langle u | U^{-1}(a)\, X\, U(a) | u \rangle = \langle u | X | u \rangle - a \langle u | u \rangle$

mais : $-a \langle u | u \rangle = \langle u | -aI | u \rangle$

donc : $\langle u | U^{-1}(a)\, X\, U(a) | u \rangle = \langle u | (X - aI) | u \rangle$

c'est à dire : $U^{-1}(a)\, X\, U(a) = X - aI$ (vrai $\forall a$)

mais comme $U(a) = \exp(iaP)$ alors :

$$\exp(-iaP)\, X\, \exp(iaP) = X - aI$$

d'où : $X - iaP[P, X] + \frac{(-ia)^2}{2!}[P, [P, X]] + \cdots\cdots = X - aId$

donc : $[P, X] = -iId \iff [X, P] = iId$.

Nous obtenons : $[X, P] = iId$.

<u>1)</u> Nous avons la relation de commutation canonique :

$$[X, P] = iId$$

qui est une condition nécessaire et suffisante pour que X soit un opérateur de position.

<u>2) Inégalité de Heisenberg</u>

Nous avons : $[A, B] = iC$

donc : $\Delta_v A \times \Delta_v B \geqslant \frac{1}{2} |\langle C \rangle_v|$

c'est à dire :

$$\Delta X . \Delta P \geqslant \frac{1}{2}$$

3) Réalisation de la relation de commutation canonique

Il n'existe pas d'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ où se réalise la relation de commutation canonique.

Théorème : Toutes les réalisations de la relation de commutation canonique sont unitairement équivalentes à la suivante :

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \ni \varphi(x) : \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx < \infty$$

Produit scalaire :

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi(x)}\, \psi(x)\, dx .$$

Nous avons :

$$\begin{cases} X_\circ \varphi(x) = x\, \varphi(x) & (X_\circ = \text{multiplication par } x) \\ P_\circ \varphi(x) = -i \dfrac{d\varphi}{dx} & (P_\circ = \text{dérivation}) \end{cases}$$

$\varphi(x)$ est une fonction d'onde.

* $XP\varphi(x) = x P \varphi(x) = -i x \dfrac{d\varphi}{dx}$

$Px\varphi(x) = -i \dfrac{d}{dx}\left(x\varphi(x)\right) = -i\varphi - ix\dfrac{d\varphi}{dx}$

$(XP - PX)\,\varphi(x) = i\varphi(x) \Rightarrow [X, P] = i\, Id$

* Hermiticité.

. $(\varphi, X\psi) \overset{?}{=} (X\varphi, \psi)$

$\int \overline{\varphi(x)}\, . \, x\, \psi(x)\, dx = \int \overline{x\, \varphi(x)}\, \psi(x)\, dx \Rightarrow X$ hermitique

. $(\varphi, P\psi) \overset{?}{=} (P\varphi, \psi)$

$\int \overline{\varphi(x)}\, (-i) \dfrac{d\psi}{dx}\, dx \overset{?}{=} \int \overline{-i \dfrac{d\varphi}{dx}}\, \psi(x)\, dx$

$-i \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}\, d\psi \overset{?}{=} \int -i\, \dfrac{d\varphi}{dx}\, \psi(x)\, dx$

$\Rightarrow \quad i \int d\overline{\varphi(x)}\, \psi(x) = \int \overline{-i \dfrac{d\varphi}{dx}}\, \psi(x)\, dx$

Il existe une infinité d'autres réalisations

Soit U un opérateur unitaire quelconque dans $\mathcal{H}$

Définissons :
$$\begin{cases} X_U = U^{-1} . X_\circ . U \\ P_U = U^{-1} . P_\circ . U \end{cases}$$

alors : $[X_U, P_U] = X_U P_U - P_U X_U$

et $[X_v, P_v] = U^{-1} X_0 P_0 U - U^{-1} P_0 X_0 U$

donc $[X_v, P_v] = U^{-1}(X_0 P_0 - P_0 X_0) U = i U^{-1} Id\, U = i\, Id$

d'où X_v et P_v satisfaisant à la RCC

On aura : $X_v^+ = U^+ X_0^+ (U^{-1})^+ = U^{-1} X_0 U = X_v$ si U est choisi unitaire

Il n'existe pas d'autre réalisation.

Exemples.

$$H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \hat{\varphi}(p)$$

$$\begin{cases} P_1\, \hat{\varphi}(p) = p\, \hat{\varphi}(p) & P_1 = p\, x \\ X_1\, \hat{\varphi}(p) = i \dfrac{d}{dp} \hat{\varphi}(p) & X_1 = i \dfrac{d}{dp} \end{cases}$$

Unitairement équivalent à (X_0, P_0)

$$\hat{\varphi} = U\varphi \Rightarrow \hat{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ipx} \varphi(x)\, dx$$

et $\varphi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int e^{-ipx} \hat{\varphi}(p)\, dp$

IV Généralisation à trois dimensions

. Translation à trois dimension : $\vec{a}$ $\exists\, U(\vec{a}) = \exp(i \vec{a} \vec{P})$

$U(\vec{a}) = \exp(i a_x P_x + i a_y P_y + i a_z P_z)$

$U(a_x) . U(a_y) = U(a_y) . U(a_x)$

$e^{i a_x . P_x} . e^{i a_y P_y} = e^{i a_y . P_y} . e^{i a_x P_x}$

$[P_k, P_\ell] = 0 \Rightarrow U(\vec{a}) = \exp(i a_x P_x) \exp(i a_y . P_y) \exp(i a_z . P_z)$

. Position : $\vec{R} = (X, Y, Z) \Leftrightarrow \vec{R} = (R_x, R_y, R_z)$

$$[R_k, R_\ell] = 0 \qquad [R_k, R_\ell] = i\, \delta_{k\ell}\, Id$$

. Réalisations : Elles sont toutes unitairement équivalentes à :

$$H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \ni \varphi(\vec{r})$$

$$(\varphi, \psi) = \iiint dx\, dy\, dz\, \overline{\varphi(x,y,z)}\, \psi(x,y,z)$$

On aura :

$X \varphi(x,y,z) = x \varphi(x,y,z)$; $P_x . \varphi(x,y,z) = -i \dfrac{\partial}{\partial x} \varphi(x,y,z)$

$Y \varphi(x,y,z) = y \varphi(x,y,z)$; $P_y . \varphi(x,y,z) = -i \dfrac{\partial}{\partial y} \varphi(x,y,z)$

$Z \varphi(x,y,z) = z\, \varphi(x,y,z)$; $P_z . \varphi(x,y,z) = -i \dfrac{\partial}{\partial z} \varphi(x,y,z)$

Opérateurs x et P , $[X, P] = iI$

V Valeurs propres et vecteurs propres de x et P

Nous avons: $X . u_x = x . u_x$ $\{u\}$? (spectre de $x = \mathbb{R}$)?

on aura: $X, V(a) = V(a)\,(X - aI)$

$$X\,V(a)\,u_x = V(a)\,(X - aI)\,u_x$$

$$X\,V(a)\,u_x = (x-a)\,V(a)\,u_x$$

où $V(a)\,u_x$ est vecteur propre de x avec la valeur propre $(x-a)$.

$V(a)\,u_x = u_{x-a}$.

Partant d'une valeur quelconque on s'apperçoit que toutes les valeurs propres de X sont réelles (tout $\mathbb{R}$)

On a $P u_p = p . u_p$ et $V^{-1}(k) . P V(k) = P + kI$

ou $V(a) = e^{iap}$ et $V(k) = e^{ikx}$; donc le spectre de x est comme celui de $\mathbb{R}$.

Par analogie:

$$(u_i , u_j) = \delta_{ij} \longrightarrow (u_{x'} , u_x) = \delta(x'-x)$$

$$v = \Sigma (a_k , v)\, u_k = \int dx\, \underbrace{(u_x , v)}_{v(x)}\, u_k$$ (fonction d'onde de l'etat v)

$$1 = \|v\|^2 = \int dx\, |(u_x , v)|^2 = \int dx\, |v(x)|^2$$

$(u_{x'} , u_x) = \delta(x'-x)$

$(v_{p'} , u_p) = \delta(p'-p)$

$(v_x , u_p) = (V(-v)\,u_0 , u_p) = (u_0 , V(x)\,u_p)$

$(v_x , u_p) = (u_0 , e^{ipx} u_p) = e^{ipx} (u_0 , v_p) = \alpha(p)\, e^{ipx}$

$V(-x) = V^{-1}(x) = V^{+}(x)$ et $V(x) = \exp(iPx)$

On peut passer sans difficultés à:

$(v_x , v_p) = (u_x , V(p)\, v_{p=0})$

$(v_x , u_p) = e^{ipx} (u_x , u_{p=0}) = \beta(x)\, e^{ipx}$

On a égalité si : $\beta(x) = \alpha(p) = cte = C$

donc: $(u_x , u_p) = C . e^{ipx}$; $(u_{x'} , u_x) = C . \delta(u'-v)$; $(v_{p'} , u_p) = C\delta(p'-p)$

Pour v quelconque : $(v_p, v) = \int dx\,(u_p, u_x)(u_x, v)$

et $\hat{v}(p) = \int dx\, e^{-ipx} v(x)$ (Fourier)

Notation de Dirac : $X|x\rangle = x|x\rangle$

$P|p\rangle = p|p\rangle$

on aura : $\langle x', x\rangle = c\,\delta(x'-x)$; $\langle p'|p\rangle = c\,\delta(p'-p)$; $\langle x|p\rangle = c\,e^{ipx}$

VI Le rôle formel de X et P

Hp opérateur linéaire dans $\mathcal{H}$, peut s'exprimer en terme de X et de P. $\mathcal{H}$ dans la réalisation $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ($X = x$ et $P = -i\frac{d}{dx}$)

Exemples :

* opérateur de dérivation : $\varphi(x)$

$$\varphi(x) \longmapsto \sum_n c_n \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n}$$

$$A = \sum_n c_n (iP)^n$$

* opérateur de multiplication :

$$\varphi(x) \longmapsto f(x)\varphi(x) \qquad A = f(x)$$

→ $\varphi(x) \longmapsto x\,\varphi'(x+a)$

$$x \frac{d}{dx}(\varphi(x+a))$$

$$X(iP)\,e^{-iaP}\varphi(x)$$

→ $\varphi(x) \longmapsto \alpha(x) \int \beta(y)\,\varphi(x+y)\,dy$

$$\varphi(x+y) = \sum_n \frac{y^n}{n!}\varphi^{(n)}(x)$$

$$\alpha(x) \int \beta(y) \sum_n \frac{y^n}{n!}\varphi^{(n)}(x)\,dy$$

$$\alpha(x) \sum_n c_n \varphi^{(n)}(x) \qquad c_n = \frac{1}{n!}\int \beta(y)\,y^n\,dy$$

Dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimension infinie, la définition d'un opérateur A comporte celle de son domaine :

$$\mathcal{D}(A) = \{\varphi \in \mathcal{H} \,/\, \exists\, A\varphi \in \mathcal{H}\}$$

Exemple. $\mathcal{D}(P) = \varphi' \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

Si $\mathcal{D}(A)$ est <u>dense</u> dans $\mathcal{H}$ alors ça marche.

• Tout vecteur de $\mathcal{H}$ peut être approché par une suite convergente de vecteurs appartenant à $\mathcal{D}(A)$.

VII L'équation de Schrödinger

Théorie générale de l'évolution : $v(t) \in \mathcal{H}$

$$i \frac{dv}{dt} = Hv \rightarrow \text{opérateur d'évolution}$$

Pour un quanton on aura :

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

On aura :

$$i \frac{dv}{dt} = \left(\frac{P^2}{2m} + V(X)\right) v$$

On choisit en général la réalisation "x" :

$$X \rightarrow x$$

$$P \rightarrow -i \frac{d}{dx}$$

$$v(t) \rightarrow \psi(x,t) = (u_x, v(t))$$

Nous aurons :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2m} + V(x)\right) \psi(x,t)$$

(Equation de Schrödinger dépendante du temps)

Etats stationnaires : $\psi(x,t) = e^{-iEt} \varphi(x)$

$$H\varphi = E\varphi \quad \Rightarrow \quad E\varphi(x) = \left(-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \varphi(x)$$

avec $\varphi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

(Equation de Schrödinger indépendante du temps)