

Mémoire de magistère de mathématiques

LES POSTULATS DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE

Adrien Hardy

La physique quantique, élaborée dès 1925 par Heisenberg (Werner Karl) et Schrödinger (Erwin), est une branche de la physique théorique qui vise à comprendre le monde de l'infiniment petit. Elle se démarque étrangement de la physique classique, qui prétend expliquer les réalités à notre échelle, et fascine par nombre de ses résultats qui vont à l'encontre de notre intuition.

Cependant, son axiomatisation reste hasardeuse : son formalisme est dû aux tâtonnements de chercheurs évoluant dans un monde hostile à l'expérimentation ; puisque, comme nous le verrons plus tard, à cette échelle, l'appareil de mesure influe sur le système à étudier.

Pour comprendre un phénomène physique, nous partons d'une expérience l'incluant. Nous l'analysons, puis nous essayons de déterminer quelles lois connues y interviennent. Si nous sommes confrontés à un phénomène complètement nouveau, nous cherchons alors un cadre mathématique adéquate à une formalisation de la nouvelle théorie, quitte à développer de nouveaux outils mathématiques, et nous tentons ensuite de déterminer empiriquement un nombre d'équations maitresses qui vont nous permettre de prédire l'évolution des systèmes soumis à ce phénomène physique (rappelez-vous que la physique nous sert à comprendre l'évolution des systèmes dans le temps). Il est esthétique de mettre en place ces équations en usant du formalisme précédent et ce de la façon la plus courte possible.

C'est cette démarche que nous allons essayer de suivre tout au long de ce mémoire.

Une axiomatique de la physique quantique est maintenant mise sur pied et acceptée par la majorité de la communauté scientifique. Malheureusement, son formalisme est mathématiquement lourd et peu approprié à l'interprétation (il est dur de donner un sens physique à un espace de dimension infini !). En fait, le problème majeur de la physique quantique est que nombre d'objets mathématiques couramment utilisés dans la théorie, et qui ont à plusieurs reprises porté leurs fruits dans des prévisions expérimentales, n'ont aucune interprétation simple vis-à-vis de notre réalité physique (du moins celle que nous croyons comprendre).

Ce mémoire vise à mettre en lumière cette structure mathématique, expliquer au mieux sa provenance, exhiber quelques-unes de ses conséquences et donner au lecteur un aperçu de l'étrangeté et du caractère magique des

lois qui gouvernent le monde quantique.

Des mêmes fondations mathématiques, les chercheurs ont dégagé des descriptions du monde quantique radicalement différentes. En ce sens, je ne pourrai pas rester objectif et serai obligé d'interpréter à ma manière différents résultats, suivant les lectures qui m'auront guidées.

Ce mémoire reste à dominante mathématique et certains aspects de la théorie physique seront éliminés. Du coup, cet exposé est fondamentalement différent d'un cours de physique et se veut accessible à un mathématicien ayant quelques bases en physique.

*Nous ne considérerons ici que des situations non relativistes.*

## Table des matières

0.1	Introduction historique . . . . .	6
0.1.1	L'effet photoélectrique . . . . .	6
0.1.2	Dualité onde-corpuscule (ou principe de complémentarité) . . . . .	6
0.1.3	La fonction d'onde selon Schrödinger . . . . .	8
<b>1</b>	<b>Enoncé des postulats</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>Vecteurs d'état et observables selon Schwinger.</b>	<b>12</b>
2.1	L'expérience de Stern-Gerlach (1922) . . . . .	12
2.2	Quelques jeux de notations . . . . .	13
2.2.1	Une algèbre de mesures . . . . .	13
2.2.2	Introduction du vecteur d'état . . . . .	17
2.2.3	Un peu de dualité . . . . .	18
2.2.4	Différentes représentations des états . . . . .	21
2.3	Comment on en arrive à un monde probabiliste . . . . .	23
2.3.1	Un exemple . . . . .	24
2.3.2	Généralisation . . . . .	25
2.3.3	La mesure perturbe les systèmes! . . . . .	26
2.3.4	Introduction des observables . . . . .	28
2.3.5	Quelques remarques quant au produit hermitien . . . . .	31
2.4	Quelques développements quant aux observables . . . . .	32
2.4.1	Variante du Postulat 2 . . . . .	33
2.4.2	Nécessité pour une observable d'être hermitique . . . . .	36
2.4.3	Propriétés d'un opérateur hermitique . . . . .	38
2.4.4	Principe d'incertitude de Heisenberg . . . . .	39
2.5	$\mathbb{C}$ -Espace vectoriel . . . . .	43
2.5.1	Une équation de conservation bien connue . . . . .	43
2.5.2	Un mouvement possible que dans un monde complexe . . . . .	45
2.5.3	Le principe de superposition . . . . .	46

<b>3</b>	<b>L'équation de Schrödinger</b>	<b>49</b>
3.1	Opérateurs unitaires et changements de référentiels . . . . .	49
3.2	Symétries préservant l'espace-temps . . . . .	53
3.3	Mise en place de l'équation de Schrödinger. . . . .	55

## 0.1 Introduction historique

### 0.1.1 L'effet photoélectrique

Découvert en 1887 par Hertz (Heinrich Rudolf), l'effet photoélectrique peut être facilement mis en évidence en éclairant une plaque métallique : sous l'action du rayon lumineux, des électrons "sautent" du métal. C'est cet effet qui donne aux panneaux solaires leur raison d'être.

Cependant, nous nous sommes rendu compte expérimentalement que les électrons ne sont émis que si la fréquence du rayonnement est supérieure à un certain seuil, qui dépend du matériau, alors que leur nombre, qui détermine l'intensité du courant créé, est proportionnel à l'intensité de la source lumineuse.

Cet effet ne peut être expliqué de manière satisfaisante si l'on considère que la lumière est une onde. Cette idée est solidement ancrée à l'époque et permet d'expliquer nombres de phénomènes où la lumière intervient, tel l'optique. Le problème vient du fait que si l'on considère la lumière comme une onde, en augmentant son intensité, on devrait pouvoir fournir suffisamment d'énergie au matériau pour libérer un électron, ce qui n'est ici manifestement pas le cas.

Einstein (Albert) résoud ce "paradoxe" en faisant l'hypothèse de non divisibilité à l'infini de la lumière : il considère la lumière comme une pluie de corpuscule, *les photons*. Chaque photon possède alors une énergie proportionnelle à la fréquence du rayonnement :  $E = h\nu$  (*Relation de Planck-Einstein*, où  $h$  est la constante de Planck. On utilisera souvent  $\hbar = h/2\pi$ ).

Ainsi, augmenter l'intensité du faisceau lumineux n'augmente pas l'énergie des photons mais leur nombre et du coup, la fréquence est le seul critère permettant d'arracher ou non un électron à la plaque.

Il est à noter que le premier à avoir mis en évidence la quantification d'une propriété physique est Planck (d'où sa constante) dans une théorie visant à expliquer la nature du rayonnement du corps noir à partir de la notion d'échanges discontinus avec la matière.

### 0.1.2 Dualité onde-corpuscule (ou principe de complémentarité)

La lumière possède donc une double identité. Elle se comporte comme une onde dès qu'elle intervient en optique (interférences, diffraction ...) et elle

s'assimile à une pluie de particules dans certains cas, tel l'effet photoélectrique (mais l'aspect corpusculaire de la lumière intervient dans d'autres phénomènes, l'effet Compton entre autre).

En 1924, De Broglie (Louis) affirme que toute particule obéit également au principe de dualité : tout corpuscule peut se comporter comme une onde suivant les situations. Davisson (Clinton Joseph) et Germer (Lester Halbert) confirment l'hypothèse de De Broglie trois ans plus tard : en dirigeant un faisceau d'électrons à travers une grille cristalline, ils obtiennent des motifs d'interférence, caractéristique propre aux ondes.

Nous détaillerons par la suite (cf. 2.5.3 - principe de superposition) une expérience menant aux mêmes conclusions.

Il est très difficile d'imaginer un objet qui soit à la fois une onde et une particule, tel que nous définissons ces deux entités en physique classique, à cause de leurs propriétés opposées :

- Une particule peut être localisée précisément (je vois cette bille, elle est ici) alors qu'une onde est *délocalisée* (un son peut être entendu dans toute la pièce).
- Il n'est possible ni de créer ni de détruire une particule (en mécanique classique ! cette assertion est justement fautive en mécanique quantique) alors qu'il suffit de pincer une corde de guitare pour créer une onde.
- Les particules sont clairement dissociées : si un atome est à un endroit, aucun autre atome ne pourra y être au même moment. Deux ondes sont au contraire superposables : les interférences.

Mais plus généralement, comment imaginer un système S qui se manifeste parfois comme A, parfois comme B alors que A et B sont deux choses différentes ? On peut voir S comme n'étant ni A ni B mais comme quelque chose de plus général, que l'on ne peut (sait ?) toutefois visualiser dans sa totalité.

Pour donner un exemple, on pourrait s'imaginer vivre dans un monde bi-dimensionnel et essayer de décrire un cylindre : suivant une certaine projection, c'est un cercle, suivant une autre, c'est un rectangle, alors qu'un cylindre n'est ni l'un ni l'autre !

### 0.1.3 La fonction d'onde selon Schrödinger

On définit l'état d'une particule en mécanique classique comme la donnée de son vecteur quantité de mouvement  $p$  (donc indirectement sa vitesse) et de son vecteur position  $x$ . L'ensemble des états possibles est un espace à 6 dimensions appelé *espace des phases* (qu'on généralise à un système de  $N$  particules en un espace à  $6N$  dimensions). Lorsque le temps varie, l'état de la particule, représenté par un point, décrit une *orbite* dans l'espace des phases. Concrètement, l'état d'un système est l'information minimum que l'on doit connaître pour déterminer exactement ce système. En effet, la trajectoire d'une particule classique est solution d'une équation différentielle du second ordre munie de conditions initiales (pour affirmer son unicité par Cauchy-Lipshitz) : sa position et sa vitesse initiale. C'est la véracité de ce formalisme qui fait de notre monde un univers *déterministe* : il existe un rapport de cause à effet nous permettant de prédire avec précision les phénomènes physiques.

Par analogie, Schrödinger définit l'état d'une particule quantique en introduisant la *fonction d'onde*. A la grande différence de la mécanique classique, il voit la particule comme une onde en vertu de la dualité onde-corpuscule, et son extension est donnée (comme toute onde en général) par :

$$\begin{cases} \psi : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{C} \\ \psi(x, t) = \Psi_0(x, t)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p \cdot x)} \end{cases}$$

Schrödinger pense à l'époque que les particules ne nous apparaissent comme ponctuelles que parce que nous les observons à trop grande échelle, alors qu'en réalité elles sont de minuscules paquets d'ondes. Il met aussi rapidement en place une équation régissant le mouvement des particules quantiques, l'*équation de Schrödinger*, dont la construction est relativement intuitive, mais qui deviendra la pierre angulaire de la physique quantique moderne. Il réussit même à montrer que dans le cas d'un oscillateur harmonique, le paquet d'onde associé ne s'étale pas et reste donc sous "forme de particule".

Il est à noter que de son côté, Heisenberg met en place une théorie en compétition avec la *mécanique ondulatoire* que vient de développer Schrödinger : la *mécanique des matrices*, dont les résultats sont conformes à ceux de Schrödinger. Cette nomination vient du fait qu' Heisenberg remplace les gran-



deurs physiques par des *observables*, mathématiquement représentées par des matrices. Dirac (Paul) montre peu de temps après l'équivalence de ces deux théories.

Mais, rapidement, la conception ondulatoire de Schrödinger se heurte à des difficultés techniques qui ont conduit à son abandon. Par exemple, nous savons maintenant que l'oscillateur harmonique est l'un des rares cas qui voit son paquet d'onde associé rester compact. Aussi, lors d'une collision, l'onde de Schrödinger se répartit dans toutes les directions, comme le ferait la vague d'un caillou tombant dans de l'eau, alors qu'expérimentalement, la particule suit une direction précise. Cependant, les prédictions apportées par la fonction d'onde et l'équation de Schrödinger restent jusqu'à présent satisfaisantes ! La physique quantique ressemble actuellement à un immeuble dont le dernier étage reste en place alors que les étages inférieurs se sont effondrés...

Exposons maintenant le formalisme de la mécanique quantique pour comprendre les problèmes de façon plus précise.

# 1 Énoncé des postulats

Nombre de cours de physique commencent par énoncer, une fois l'introduction historique passée, les postulats de la mécanique quantique. Ainsi, une fois l'axiomatique posée, il reste à exhiber les propriétés qui en découlent et tenter d'en trouver une interprétation physique. A contrario, nous tenterons d'expliquer la provenance de cette axiomatique : ces postulats n'en ont souvent que le nom et il existe des cheminements logiques permettant de les retrouver, bien que partiellement.

Il est à noter que ces postulats n'ont pas exactement le même statut qu'en mathématiques : une fois l'axiomatique posée, la branche ainsi contruite des mathématiques se veut autonome (quitte à être incohérente) alors que l'axiomatique que nous développerons ici sera toujours tributaire de la réalité physique que nous essayons de décrire.

**Postulat 1** *La connaissance de l'état d'un système à un instant  $t$  est complètement contenue dans un vecteur appelé vecteur d'état, habituellement noté  $|\psi(t)\rangle$ . L'espace auquel appartient ce vecteur est un  $\mathbb{C}$ -espace de Hilbert (un  $\mathbb{C}$ -espace vectoriel complet muni d'un produit hermitien),  $\mathcal{H}$ , appelé espace des états.*

Il pose l'existence du vecteur d'état ainsi que son essence.

Nous introduirons le vecteur d'état grâce à Schwinger durant toute la partie 2.2 et nous dégageront progressivement la structure de son espace, mais nous aurons ensuite besoin de quelques précisions sur le monde quantique ainsi modélisé avant d'introduire la structure de  $\mathbb{C}$ -espace vectoriel de l'espace des états en 2.5.

**Remarque :** ce postulat ne précise en rien la dimension de l'espace des états.

**Postulat 2** *Toute grandeur physique est représentée par un opérateur hermitien, appelé observable, agissant sur les vecteurs de  $\mathcal{H}$ . La valeur moyenne, espérée, d'une observable  $A$  agissant sur un vecteur d'état  $|\psi\rangle$  est donné par :*

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle .$$

Il formalise la notion d'observable et donne son mode d'emploi vis-à-vis de la fonction d'onde.

L'introduction des observables sera également faite en suivant le point de vue de Schwinger en 2.3.4 et expliquera la provenance de ce postulat à l'exception de l'hermité. En 2.4, nous nous consacrerons à l'étude des observables : la démonstration de l'hermité des observables et de quelques propriétés cruciales.

**Postulat 3** *L'évolution en temps d'un système fermé est gouverné par l'équation de Schrödinger :*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = H(t) | \psi(t) \rangle$$

où  $H(t)$  est l'opérateur (dit Hamiltonien) associé à l'énergie du système.

Equation principale de la mécanique quantique qui donne l'évolution en temps des systèmes.

La partie 3 sera entièrement consacrée à la démonstration de cette équation.

## 2 Vecteurs d'état et observables selon Schwinger.

L'introduction de la fonction d'onde par Schrödinger n'est pas mathématiquement valable, en raison des imprécisions et des contradictions dues à son interprétation. Schwinger propose quant à lui une introduction de ce qui remplacera la fonction d'onde, le vecteur d'état, un peu artificielle, puisqu'il va tout axer sur une symbolique, mais qui a le mérite d'être mathématiquement correcte.

C'est son point de vue que nous développerons ici et nous permettra d'expliquer la provenance des postulats 1 et 2.

### 2.1 L'expérience de Stern-Gerlach (1922)

Le principe de cette expérience est de mesurer le moment magnétique d'une particule exposée à l'action mécanique d'un champs magnétique.

Depuis un four, des atomes d'argent sont émis, restreints en un faisceau grâce à des fentes, puis traversent un aimant pour au final impacter un écran nous permettant de visualiser le résultat de l'expérience (cf. schéma suivant). En effet, le moment magnétique (qu'on notera  $m.m$ ) de la particule va complètement déterminer sa trajectoire dans la mesure où elle n'est soumise à aucune autre force et sa localisation sur l'écran nous donnera directement une mesure du  $m.m$ . Pour simplifier, considérons cette expérience à une dimension i.e un champs magnétique n'ayant qu'une composante (suivant  $z$  pour fixer les idées). Intuitivement, les atomes devraient se répartir suivant quelque chose comme une courbe de Gauss répartie entre deux valeurs extrémales du  $m.m$ , mettons  $+m.m$  et  $-m.m$  puisque le champs est uniforme. Il n'en est rien! Les atomes sont uniquement déviés aux deux positions extrémales  $+m.m$  et  $-m.m$  et aucun atome n'atterrit au milieu. Ceci est un exemple de la quantification qui régit beaucoup de phénomènes quantiques (d'où la terminologie au passage), comme le niveau d'énergie des noyaux, dont on ne détaillera pas ici la substance. Nous nous servirons de cette expérience comme archétype pour construire une forme de logique quantique basée sur l'expérimentation.

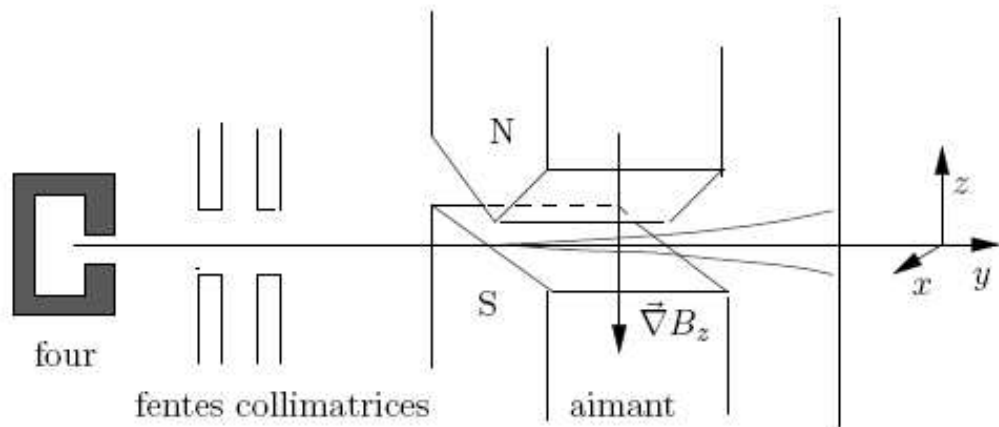
On peut créer un *sélecteur* de moment qui ne va laisser passer qu'un atome dans l'état  $+m.m$ , ou au choix  $-m.m$ .

Mais comment déterminer si un état est pur? i.e qu'un atome dans l'état  $+m.m$  n'est pas en même temps dans l'état  $-m.m$ ? Il suffit de mettre en

série deux sélecteurs, une fois deux + et de recommencer avec un sélecteur + et un - :

1. L'atome passe deux sélecteurs + : c'est un  $+m.m$
2. L'atome ne passe pas les deux sélecteurs + et - : ce n'est pas un  $-m.m$

donc c'est un pur  $+m.m$ .



## 2.2 Quelques jeux de notations

### 2.2.1 Une algèbre de mesures

Généralisons maintenant cet exemple à une propriété physique  $A$  ayant pour valeurs possibles  $a_1, \dots, a_n$ .

On peut définir de la même façon un sélecteur qui mesure  $A$  et ne retient que  $a_i$ , ce que Schwinger va noter symboliquement  $| a_i a_i |$ .

$| a_i a_i |$  représente donc l'action de mesurer la propriété  $A$  sur un système sous entendu et de sélectionner l'état  $A = a_i$ .

Pourquoi cette redondance ? Pour rappeler pour rappeler que dans un test sélectif, il faut une fois avoir fait une mesure, la vérifier ; tout comme nous avons fait dans le cas du  $+m.m$  pour nous assurer qu'il n'était pas non plus un  $-m.m$ . On peut noter que l'action de mesurer  $A$ , et pas  $B$ , est implicitement contenue dans l'écriture  $a_i$  (et pas  $b_i$ ).

Nous introduisons également deux autres symboles :

- la sélection “accepter tout”  $\rightarrow 1$
- la sélection “refuser tout”  $\rightarrow 0$ .

Nous allons construire une algèbre sur ces symboles.

La première opération, notée multiplicativement, représentera une succession de mesures sélectives. Suivant la logique booléenne, elle représente la conjonction ET. Il vient logiquement :

$$| a_i a_i || a_j a_j | = \delta_{ij} | a_i a_i |$$

ainsi que :

$$1 | a_i a_i | = | a_i a_i | 1 = | a_i a_i |$$

$$| a_i a_i | 0 = 0 | a_i a_i | = 0$$

$$11 = 1$$

$$10 = 01 = 0$$

$$00 = 0$$

Ensuite on associe le + à la conjonction OU :

$$| a_i a_i | + | a_j a_j | = | a_j a_j | + | a_i a_i |$$

qui correspond à l'action : “mesurer  $(A - a_i)(A - a_j)$  et trouver 0”.

En effet, “mesurer  $A$  et trouver  $a$ ” est équivalente à “mesurer  $A - a$  et trouver 0”.

On a aussi :

$$| a_i a_i | + 0 = 0 + | a_i a_i | = | a_i a_i |$$

$$1 + 0 = 0 + 1 = 1$$

$$0 + 0 = 0$$

On généralise facilement aux sommes à  $m$  éléments et on a l'égalité (intuitive) :

$$\sum_{i=1}^n | a_i a_i | = 1$$

$n$  étant le nombre total de valeurs que peut prendre  $A$ . Egalité qui peut se retrouver grâce à :

$$\forall i, \left( \sum_{i=1}^n |a_i a_i\rangle \right) |a_i a_i\rangle = |a_1 a_1\rangle |a_i a_i\rangle + \dots + |a_n a_n\rangle |a_i a_i\rangle = |a_i a_i\rangle + 0 + 0 + \dots = |a_i a_i\rangle .$$

La notation  $|a_i a_i\rangle$  reste tout de même une invitation à la symbolique  $|a_i a_j\rangle$  avec  $i \neq j$ . Mais quel en serait le sens ? Nous avons implicitement supposé dans l'expérience de Stern-Gerlach que le champ était stationnaire. Si nous créons un champ qui change pendant le temps de passage de l'atome du sélecteur + au sélecteur - de manière à ce que l'atome entre dans le premier sélecteur dans un état, change entre les deux sélecteurs, puis aie la possibilité de ressortir grâce à son changement d'état.

On obtiendrait par exemple un état  $|+-\rangle$ .

Pour des mesures successives nous avons ainsi :

$$|a_i a_j\rangle |a_k a_l\rangle = \delta_{jk} |a_i a_l\rangle$$

**Remarque 1 :** *cette algèbre n'est pas commutative.*

En effet, si  $a_i \neq a_j$ , on a :

$$|a_i a_j\rangle |a_j a_i\rangle = |a_i a_i\rangle$$

et :

$$|a_j a_i\rangle |a_i a_j\rangle = |a_j a_j\rangle$$

donc :

$$|a_i a_i\rangle \neq |a_j a_j\rangle .$$

**Remarque 2 :** *elle n'est pas intègre.*

Si  $a_i \neq a_j$ , on a

$$| a_i a_i || a_j a_j | = 0$$

même si  $| a_i a_i | \neq 0$ .

Maintenant, réfléchissons un peu plus au sens de  $| a_i a_j |$ . Seul un atome qui a la valeur  $a_i$  pour la propriété A, un  $a_i$ -atome, peut entrer dans l'appareil de mesure et un  $a_j$ -atome en sort. On pourrait imaginer qu'au coeur de l'appareillage le  $a_i$ -atome se détruit et qu'un  $a_j$ -atome apparaisse. On symbolisera cette destruction/création de la manière suivante :

$$| a_i a_j | := | a_i \rangle \langle a_j | .$$

$| . \rangle$  symbolise donc la destruction et  $\langle . |$  la création.

Pour vérifier l'égalité vue précédemment :

$$| a_i a_j || a_k a_l | = \delta_{jk} | a_i a_l |$$

i.e :

$$| a_i \rangle \langle a_j || a_k \rangle \langle a_l | = \delta_{jk} | a_i \rangle \langle a_l |$$

qu'on notera pour simplifier :

$$| a_i \rangle \langle a_j | a_k \rangle \langle a_l | = \delta_{jk} | a_i \rangle \langle a_l |$$

il faut que la symbolique vérifie :

$$\langle a_j | a_k \rangle = \delta_{jk}$$

ce qui veut dire "créer un  $a_j$ -atome" puis "détruire un  $a_k$ -atome".

Dans la mesure où nous voyons les actes de création/destruction comme des actes isolés, cette égalité conserve un sens physique logique : créer un  $a_j$ - atome puis le détruire est possible, représenté par 1 : "oui", alors que créer un  $a_j$ -atome et détruire un  $a_k$ -atome,  $k \neq j$ , ne l'est pas, représenté par 0 : "non".



### 2.2.2 Introduction du vecteur d'état

L'analogie avec la caractéristique d'une base d'un espace euclidien est frappante : si nous notons  $\langle . | . \rangle$  le produit scalaire associé à cet espace et  $(e_i)_i$  sa base, alors nous aurons l'égalité :

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Nous considèrerons la famille  $(| a_i \rangle)_i$  comme étant une base d'un espace euclidien que nous appèlerons  $\mathcal{H}$  ( et donc nous nous accordons à donner aux  $| a_i \rangle$  le statut de vecteur). Nous démontrerons en 2.5 que la structure d'espace vectoriel est justifiée et que cet espace est construit sur le corps  $\mathbb{C}$ .

Remarque : La dimension de  $\mathcal{H}$  est exactement le nombre de valeurs que peut prendre la propriété A.

Nous avons vu précédemment la relation :

$$\sum_{i=1}^n | a_i \rangle \langle a_i | = 1$$

qui s'écrit avec nos nouvelles notations :

$$\sum_{i=1}^n | a_i \rangle \langle a_i | = 1.$$

Cette égalité (qu'on appelle une *décomposition de l'identité*) viens renforcer l'idée que nous venons de développer.

En effet, si  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  (donc combinaison linéaire des  $| a_i \rangle$ ), alors nous avons :

$$|\psi\rangle = 1 |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle$$

qui correspond bien à la décomposition suivant une base au sens où nous l'entendons.

Mais quel serait alors le sens de ce vecteur  $|\psi\rangle$  ?

Nous interprétons généralement ce vecteur comme étant l'état d'un système : il représente ici la somme de tous les vecteurs représentant les différentes valeurs possibles d'une grandeur physique A pondérées par des

coefficients. Nous verrons un peu plus loin que  $\langle a_i | \psi \rangle$  contribuera à traduire la sensibilité qu'aura le système dans l'état  $|\psi\rangle$  à prendre la valeur  $a_i$  une fois la propriété A mesurée.

Nous appelons  $|\psi\rangle$  le *vecteur d'état* d'un système.

**Remarque 1 :** si nous avons considéré une propriété physique A possédant un nombre fini de valeurs possibles, il faudra généraliser notre formalisme pour prendre en compte nombre de propriétés qui prennent un nombre infini de valeurs, dénombrables ou non.

Nous sommes alors amenés à considérer non plus des espaces euclidiens (complets par finitude de leur dimension au passage) mais des espaces pré-hilbertiens.

Pour des raisons pratiques, nous supposerons que ces espaces sont complets pour la norme issue du produit scalaire, c'est à dire des *espaces de Hilbert*. Cette hypothèse n'est physiquement pas aberrante et n'est pour l'instant sujette à aucune contradiction.

**Remarque 2 :** comme nous l'avons souligné précédemment, ces espaces de Hilbert sont construits sur  $\mathbb{C}$ .

Le produit scalaire usuel est alors remplacé par un produit scalaire hermitien i.e une forme sesquilinéaire à symétrie hermitienne définie positive (le surlignage représente la conjugaison complexe) :

- $\langle \phi | \psi + \lambda\varphi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle + \lambda \langle \phi | \varphi \rangle$  (linéaire à droite)
- $\langle \psi + \lambda\varphi | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle + \bar{\lambda} \langle \varphi | \phi \rangle$  (antilinéaire à gauche).
- $\langle \phi | \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi | \phi \rangle}$  (à symétrie hermitienne)
- $\langle \phi | \phi \rangle \geq 0$  (positive)
- $\langle \phi | \phi \rangle = 0 \Leftrightarrow \phi = 0$  (définie)

### 2.2.3 Un peu de dualité

Mais si nous admettons une structure d'espace de Hilbert pour l'ensemble des vecteurs  $|\psi\rangle$ , quelle est la signification des objets  $\langle a_i |$  ?

Pour un espace de dimension infinie, un espace de Hilbert possède des propriétés topologiques qui le rend très souple à manier (c'est entre autre

pour cette raison que nous avons supposé notre espace complet, la physique quantique étant déjà suffisamment compliquée comme ça !).

Ici nous nous intéresserons exclusivement aux propriétés de son dual.

Dans le cas de la dimension finie, un espace et son dual sont toujours isomorphes (il est facile d'exhiber une base du dual de même cardinal que la dimension de l'espace et il existe toujours une injection canonique de l'espace dans son dual, cf.suite) mais nombre d'espaces de dimension infini diffèrent complètement de leurs duals, ces derniers étant beaucoup plus "gros".

Nous allons voir que dans le cas d'un espace de Hilbert, son dual lui est curieusement isomorphe.

Considérons  $\mathcal{H}^*$  l'espace *dual topologique* associé à  $\mathcal{H}$  (l'ensemble des formes linéaires continues de  $\mathcal{H}$ ).

Il est facile de plonger  $\mathcal{H}$  dans  $\mathcal{H}^*$  grâce à l'injection linéaire suivante :

$$x \in \mathcal{H} \rightarrow f_x \in \mathcal{H}^*$$

avec :

$$f_x : y \rightarrow \langle x | y \rangle .$$

C'est bien une injection puisque si  $f_x = 0$  alors en particulier  $f_x(x) = \|x\|^2 = 0$  et donc  $x = 0$ .

Remarquons que les  $f_x$  sont bien continus en vertu de l'inégalité de Cauchy-Schwarz.

Nous allons maintenant montrer que, dans un espace de Hilbert, cette injection est en fait un isomorphisme :

### **Théorème 1 (de représentation de Riesz)**

$x \rightarrow f_x$  est un isomorphisme.

Nous aurons besoin du lemme 1 pour démontrer ce théorème.

Autant dans le cas d'espaces euclidiens ce lemme est trivial, autant en dimension infini il est impressionnant ! Pour expliquer sa provenance, nous

donnons simplement pour connaissance le lemme 2, indispensable à la démonstration du lemme 1, qui donne une idée du fonctionnement “géométrique” des espaces de Hilbert (rappelons que par définition même, un sous-espace vectoriel est un espace convexe).

Ces lemmes sont donnés sans démonstration.

**Lemme 1** Si  $F$  est un sous-espace vectoriel fermé d'un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ , alors  $F \oplus F^\perp = \mathcal{H}$ .

**Lemme 2 (de projection orthogonale sur un convexe fermé)**

Soit  $C \subset \mathcal{H}$  un convexe fermé. Si  $x \in \mathcal{H}$ , il existe un unique élément  $x_C \in C$  tel que  $\|x - x_C\| = d(x, C) = \inf_{z \in C} \|x - z\|$ .  $x_C$  est alors appelé projection orthogonale de  $x$  sur  $C$  et est caractérisé par : Remarquons que l

$$\forall z \in C, \langle z - x_C \mid x - x_C \rangle \leq 0.$$

**Démonstration du théorème :**

Reste à montrer la surjectivité.

Soit  $L \in \mathcal{H}^*$ , si  $L = 0$  alors  $L = f_0$  et c'est terminé.

Sinon,  $\text{Ker} L = L^{-1}(\{0\})$  est un sous-espace vectoriel (stricte) de  $\mathcal{H}$ , fermé par continuité de  $L$ .

D'après le Lemme 2, on a :  $\text{Ker}(L) \oplus \text{Ker}(L)^\perp = \mathcal{H}$ .

Si  $L$  était nulle sur  $\text{Ker}(L)^\perp$  alors  $L$  serait nulle sur  $\mathcal{H}$ , ce qui est absurde par hypothèse. Donc il existe  $a \in \text{Ker}(L)^\perp$  tel que  $L(a) \neq 0$ .

Montrons que  $\text{Ker}(L)^\perp = \text{Vect}(a)$ . Soit  $v \in \text{Ker}(L)^\perp$ .

On pose  $w = v - \frac{L(v)}{L(a)}a$  qui vérifie  $L(w) = L(v) - L(\frac{L(v)}{L(a)}a) = 0$ .

Donc  $w \in \text{Ker}(L)$ .

Par ailleurs,  $w$  est combinaison linéaire d'éléments de  $\text{Ker}(L)^\perp$  et  $w \in \text{Ker}(L) \cap \text{Ker}(L)^\perp = \{0\}$ . Nous avons  $v = \frac{L(v)}{L(a)}a \in \text{Vect}(a)$  et on a bien  $\text{Ker}(L)^\perp = \text{Vect}(a)$ .

Ceci étant, posons  $b = \frac{L(a)}{\|a\|^2}a$ .

– Pour tout  $x \in \text{Ker}(L)$ , on a  $f_b(x) = \langle b \mid x \rangle = \frac{L(a)}{\|a\|^2} \langle a \mid x \rangle = 0$  car  $a \in \text{Ker}(L)^\perp$ .

– Si  $x \in \text{Ker}(L)^\perp$ , alors il existe  $\lambda \in \mathbb{C}$  tel que  $x = \lambda a$  donc

$$f_b(x) = \lambda f_b(a) = \lambda \frac{L(a)}{\|a\|^2} \langle a | a \rangle = \lambda L(a) = L(x)$$

Nous avons montré l'égalité de  $f_b$  et de  $L$  sur deux espaces supplémentaires donc  $f_b = L$ , d'où la surjectivité désirée.

CQFD.

Du coup, si nous interprétons les  $\langle a_i |$  comme des formes linéaires :

$$\langle a_i | : | \psi \rangle \rightarrow \langle a_i | \psi \rangle,$$

il existe donc une façon de passer des vecteurs création à ceux de destruction (et inversement) que nous appellerons *conjugaison hermitique* :

$$\dagger : \begin{cases} | \psi \rangle \rightarrow | \psi \rangle^\dagger = \langle \psi | \\ \langle \psi | \rightarrow \langle \psi |^\dagger = | \psi \rangle \end{cases}$$

**Remarque 1 :** pour cette raison, il nous arrive d'écrire une forme linéaire de la manière suivante :  $f(x) = \langle f | x \rangle$ , notation dite du *crochet de dualité*.

**Remarque 2 :** le créateur de la notation vectorielle  $| \psi \rangle$  est Dirac qui la baptisa non sans humour notation du "Bra-Ket" ("Cro-Chet" en français) :

- $\langle \psi |$  : ceci est un *Bra*
- $| \psi \rangle$  : ceci est un *Ket*
- $\langle \psi | \psi \rangle$  : et ceci est un *Braket* !

**Remarque 3 :** de ce point de vue, l'objet  $| a_i a_i \rangle = | a_i \rangle \langle a_i |$  représente un projecteur sur la droite vectorielle engendrée par  $| a_i \rangle$ .

#### 2.2.4 Différentes représentations des états

Nous avons construit l'état d'un système comme un vecteur d'un espace de Hilbert muni d'une base de vecteurs intimement liés aux différentes valeurs possibles d'une propriété physique.

Nous démontrerons bientôt qu'en physique quantique, nous représentons une grandeur physique par un *opérateur* hermitien (c'est à dire un endomorphisme autoadjoint d'un espace de Hilbert) agissant sur les vecteurs

d'état et que les seules valeurs permises pour une grandeur sont les valeurs propres de cet opérateur.

Les vecteurs propres associés forment une famille orthogonale et dans certains cas une base (le cas de la dimension fini est trivial, mais la dimension infinie nous réserve bien des surprises) et les  $| a_i \rangle$  représentent alors les vecteurs propres associés aux valeurs possibles de la grandeur  $A$ .

Du coup pour chaque grandeur physique possédant une base de vecteurs propres, nous pouvons décomposer le vecteur d'état de différentes façons.

On appelle une décomposition selon une base de vecteurs propres d'un opérateur  $A$  une *A-représentation*.

La représentation la plus utilisée est celle associée à l'opérateur position  $Q$  possédant pour chaque position  $x$  un vecteur propre associé  $| x \rangle$  et on note :

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle .$$

Pour une propriété plus quelconque, il arrive aussi d'écrire :

$$\langle a_i | \psi \rangle = \psi(a_i).$$

**Remarque :** depuis le début nous travaillons à  $t$  fixé et il serait plus juste d'écrire  $| \psi(t) \rangle$  et donc  $\psi(x, t)$  ou  $\psi(a_i, t)$ , mais nous conserverons nos notations par soucis de simplicité d'écriture.

C'est de cette représentation que Schrödinger est parti à l'origine : la fonction d'onde énoncée dans l'introduction historique prend formellement la place de notre  $x$ -représentation en mécanique ondulatoire.

Aucune interprétation claire de la fonction d'onde n'a été exhibée à ce jour mais on peut recenser deux courants extrêmes traitant de sa nature :

il y a ceux qui pensent que la fonction d'onde représente textuellement les propriétés physiques d'un système, et qui rejoignent donc l'interprétation de Schrödinger, malheureusement fautive comme nous l'avons vue précédemment ; et puis il y a ceux qui pensent que la fonction d'onde n'a aucune essence physique mais qu'elle est une entité mathématique pure représentant la connaissance que nous avons d'un système.

Ce point de vue est également délicat : si deux observateurs possèdent des informations différentes du même système, ce système possède-t-il deux

fonctions d'onde différentes? Quel serait alors la description mathématique absolue de ce système, indépendante de l'observateur?

Il apparaît que la fonction d'onde est un mélange subtil de ces deux extrêmes.

La construction que nous avons faite de la fonction d'onde, la structure de son lieu de vie et son interprétation comme étant l'information que nous pouvons avoir d'un système conduit au premier postulat de la physique quantique (modulo la structure de  $\mathbb{C}$ -espace vectoriel qui est provisoirement admise).

### 2.3 Comment on en arrive à un monde probabiliste

Devant l'impossibilité d'interpréter la fonction d'onde comme Schrödinger l'aurait souhaité, Born (Max) propose une interprétation probabiliste.

Il obtient expérimentalement que la densité de probabilité de trouver la particule en  $x$  est proportionnelle à l'amplitude de la fonction d'onde en ce point :

$$|\psi(x)|^2 = \overline{\psi(x)}\psi(x).$$

C'est à dire que la probabilité de trouver la particule entre  $x$  et  $x + dx$  est égale à  $|\psi(x)|^2 dx$ .

Elle rend maintenant plausible l'existence de fonctions d'onde d'extension infinie (ce qui n'était pas le cas avec l'interprétation de Schrödinger).

**Remarque :** ici le sens de cette probabilité est vue comme la limite du rapport :

$$\frac{\text{Nombre d'expériences où l'on trouve la particule entre } x \text{ et } x + dx}{\text{Nombre d'expériences total}}$$

pour un nombre d'expériences tendant vers l'infini.

Bien sûr, cette définition de la probabilité est sujète à controverses, du type quel est le sens de "à un temps fixé, la probabilité qu'il fasse beau à Strasbourg est ..."? Dans la mesure où l'on ne peut réitérer l'expérience, on met en défaillance la cohérence de la définition.

Mais comment définir ce qu'est une probabilité est un sujet qui dépasse largement le cadre de ce mémoire et on se contentera modestement de ce model, couramment utilisé par les physiciens.

Schwinger va maintenant rendre compte de cette interprétation de la fonction d'onde (qui est une réalité expérimentale !) en conservant ses notations.

### 2.3.1 Un exemple

Dans l'expérience de Stern-Gerlach, pour sélectionner un  $+m.m$  il faut orienter le champs magnétique d'une certaine façon, que nous prendrons comme origine de notre graduation à  $0^\circ$ .

Pour avoir un  $-m.m$ , l'orientation devra être opposée, donc de  $180^\circ$ . Imaginons maintenant qu'une fois avoir franchis le premier sélecteur (un  $+m.m$  pour fixer les idées), on en place un deuxième orienté différemment. Que se passe-t-il si nous orientons le champs vers  $90^\circ$ ? Pour imaginer la conséquence de positions intermédiaires, on peut imaginer une rotation progressive dans le temps du champs de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  dont le temps de passage dans les différentes zones est pondéré par l'orientation que l'on veut donner au système. Ainsi, pour  $\theta = 90^\circ$ , on peut imaginer qu'une moitié de particule va être déviée en haut ( $+m.m$ ), et l'autre en bas ( $-m.m$ ). Mais que va-t-il se passer individuellement pour chaque atome? Nous n'avons aucun moyen de contrôler, ni de prévoir, ce que fera chaque atome individuellement. Nous pouvons simplement être sûr de ce qu'il se passera en moyenne sur un grand nombre d'atomes.

Par exemple :

- $\theta = 0^\circ \rightarrow$  Tous les atomes dans l'état  $+m.m \rightarrow$  Moyenne : +1
- $\theta = 90^\circ \rightarrow$  50% des atomes dans l'état  $+m.m$  et 50% des atomes dans l'état  $-m.m \rightarrow$  Moyenne : 0
- $\theta = 180^\circ \rightarrow$  Tous les atomes dans l'état  $-m.m \rightarrow$  Moyenne : -1

Généralisons ce principe à une angulaison moins particulière. Intuitivement, la moyenne correspond au projeté du vecteur angulaison sur l'axe orienté ( $180^\circ, 0^\circ$ ), ce qui s'applique bien aux cas particuliers que nous avons vu précédemment. La pondération qui oriente la particule en direction de l'état  $+m.m$  ou  $-m.m$  peut être vu comme une probabilité grâce au grand



nombre d'atomes présents dans l'expérience :

$$\cos\theta = (+1)P(+, +) + (-1)P(+, -).$$

où, par exemple,  $Prob(+, -)$  est la probabilité que l'atome entrant dans l'état  $+m.m$  change ensuite son état en  $-m.m$ .

Vu que logiquement nous avons :

$$Prob(+, -) + Prob(+, +) = 1$$

On obtient les formules :

$$\begin{cases} Prob(+, +) = \frac{1+\cos\theta}{2} = \cos^2(\frac{1}{2}\theta) \\ Prob(+, -) = \frac{1-\cos\theta}{2} = \sin^2(\frac{1}{2}\theta) \end{cases}$$

Si le premier sélecteur était un  $-m.m$ , il suffit de remplacer dans les calculs  $\theta$  par  $\pi - \theta$  d'où les résultats :

$$\begin{cases} Prob(-, +) = \sin^2(\frac{1}{2}\theta) \\ Prob(-, -) = \cos^2(\frac{1}{2}\theta) \end{cases}$$

### 2.3.2 Généralisation

Plus généralement, si nous mesurons une propriété A sur un atome et sélectionnons l'état  $A = a$ , nous symboliserons ceci par la création d'un a-atome :  $\langle a |$ . Continuons maintenant en considérant une autre propriété B. Nous pouvons la mesurer sur le a-atome, sans spécifier quel type de mesure pour rester le plus général possible, action qu'on notera  $M(B)$  :  $\langle a | M(B)$ . Enfin la détection de cet atome provoque l'annihilation de son état :  $\langle a | M(B) | a \rangle$ . En effet, comme nous le verrons bientôt, la mesure perturbe le système d'étude et le a-atome change d'état, symbolisé par une destruction.

Nous obtenons donc le nombre :

$$P(a, M(B)) = \langle a | M(B) | a \rangle .$$

Pour clarifier les idées, une mesure de B pourra être par exemple :

- "sélectionner l'état  $B = b$ " :  $M(B) = |b\rangle\langle b|$
  - "sélectionner plusieurs états  $b, b', \dots$ " :  $M(B) = |b\rangle\langle b| + |b'\rangle\langle b'| + \dots$
- On notera respectivement  $Prob(a, b)$  et  $Prob(a, b + b' + \dots)$ .

On remarquera au passage que :

- On a la propriété :

$$Prob(a, b + b') = \langle a | (|b\rangle\langle b| + |b'\rangle\langle b'|) | a \rangle = \langle a | b \rangle\langle b | a \rangle + \langle a | b' \rangle\langle b' | a \rangle = Prob(a, b) + Prob(a, b')$$

- Si B n'est autre que A, on a :

$$Prob(a, a') = \langle a | a' \rangle\langle a' | a \rangle = \delta_{aa'}$$

- Si le mesure de B est  $M(B) = \sum_b |b\rangle\langle b| = 1$  alors

$$Prob(a, M(B)) = Prob(a, 1) = \sum_b Prob(a, b) = \langle a | 1 | a \rangle = 1$$

Ces propriétés sont rassurantes quant à penser que  $Prob(a, b)$  représente une probabilité, en l'occurrence celle de trouver un a-atome dans l'état b après une mesure de la propriété B.

**Remarque :** souvenons nous de la symétrie hermitienne de  $\langle | \rangle$  : nous pouvons écrire plus simplement  $Prob(a, b) = |\langle a | b \rangle|^2$ .

### 2.3.3 La mesure perturbe les systèmes !

Considérons maintenant trois observables A, B, C. Nous pouvons de la même façon définir  $Prob(a, M(B), c) = |\langle a | M(B) | c \rangle|^2$  qui reproduit la même construction que précédemment sauf que nous remplaçons le détecteur final sélectionnant  $A = a$  par un autre sélectionnant  $C = c$ .

Par exemple, si

$$M(B) = |b\rangle\langle b|,$$

nous obtenons :

$$Prob(a, M(B), c) = |\langle a | b \rangle\langle b | c \rangle|^2 = Prob(a, b)Prob(b, c)$$

et le résultat est conforme à l'interprétation puisque nous superposons deux étapes de sélection : "le a-atome est-il dans l'état  $B = b$ ?" si oui, "le b-atome est-il dans l'état  $C = c$ ?"

Si nous considérons maintenant une mesure de B n'engendrant aucune sélection, ce qui revient virtuellement à trier les différents états, vu comme un gain d'information, mais sans les sélectionner physiquement, le résultat obtenu se veut être égal à la somme de toutes les probabilités de chaque choix de  $b$  parmi toutes les valeurs que peut prendre B :

$$Prob(a, M(B)_{sans\ selection}, c) = \sum_b Prob(a, b) Prob(b, c).$$

Nous disons que *la mesure déforme le système* en physique quantique puisqu'on a souvent :

$$Prob(a, M(B)_{sans\ selection}, c) \neq Prob(a, 1, c).$$

Par exemple, considérons une mesure du *m.m* dans l'expérience de Stern-Gerlach suivant un axe  $z$ , A, une suivant un axe perpendiculaire, B, et une troisième suivant l'axe  $-z$ , C.

Nous avons :

$$Prob\left(\begin{matrix} + \\ a \end{matrix}, M(B)_{sans\ selection}, \begin{matrix} + \\ c \end{matrix}\right) =$$

$$Prob\left(\begin{matrix} + \\ a \end{matrix}, \begin{matrix} + \\ b \end{matrix}\right) Prob\left(\begin{matrix} + \\ b \end{matrix}, \begin{matrix} + \\ c \end{matrix}\right) + Prob\left(\begin{matrix} + \\ a \end{matrix}, \begin{matrix} - \\ b \end{matrix}\right) Prob\left(\begin{matrix} + \\ b \end{matrix}, \begin{matrix} + \\ c \end{matrix}\right) = \frac{1}{2} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{2} = \frac{1}{2},$$

dans la mesure où les seuls résultats possibles pour B sont + et - et que toutes les probabilités considérées sont égales à  $\frac{1}{2}$  puisque :

$$Prob(+, +) = \cos^2\left(\frac{1}{2}90\right) = \sin^2\left(\frac{1}{2}90\right) = Prob(+, -) = \frac{1}{2}.$$

Par contre,

$$Prob\left(\begin{matrix} + \\ a \end{matrix}, 1, \begin{matrix} + \\ c \end{matrix}\right) = Prob\left(\begin{matrix} + \\ a \end{matrix}, \begin{matrix} + \\ c \end{matrix}\right) = 0$$

pour des raisons logiques : le *m.m* ne peut être suivant la direction + de l'axe  $z$  et la direction + de l'axe  $-z$  en même temps .

La mesure, qu'on peut plus généralement appeler *interaction avec l'extérieur*, soulève beaucoup de questions en physique quantique. On pourrait se demander par exemple si la place de l'observateur rentre en compte dans

la nature du monde. Existe-t-il une réalité objective ? Indépendante de ses habitants ? Faut-il un niveau de conscience minimum pour interférer avec notre monde, puisque ne serait-ce vivre est une grande quantité d'actions de mesure ? Ainsi, un chat, un arbre, un caillou influe-t-il sur le monde par les mesures inconscientes qu'il engendre ? La liste d'interrogations est longue, mais ce qui est sûr, c'est que la nature du monde est loin de ressembler à l'image classique que nous en avons.

### 2.3.4 Introduction des observables

La symbolique que nous utilisons nous amène à poser la question suivante : existe-t-il un symbole représentant propriété physique fixée ? La nature probabiliste du monde quantique a pour conséquence de nous interdire de dire telle propriété a telle valeur en ce moment précis. Il est même des fois où la nature nous interdit d'obtenir de l'information de certains systèmes sous certaines conditions (cf. 2.4.4 - principe d'incertitude). Pour ces raisons, nous donnerons aux grandeurs physiques que nous mesurons en physique quantique le nom d'*observable* (a contrario « d'observée » faisant référence à un monde plus déterministe).

Si nous considérons une observable B comme une variable aléatoire, à l'aide de la notion d'espérance mathématique, nous pouvons définir la *valeur moyenne*, ou *valeur espérée*, obtenue en mesurant B sur un a-atome :

$$\langle B \rangle_a = \sum_b \text{Prob}(a, b) b$$

On remarquera que

$$\sum_b \text{Prob}(a, b) b = \sum_b \langle a | b \rangle \langle b | a \rangle b = \langle a | \left( \sum_b | b \rangle \langle b | \right) | a \rangle .$$

Grâce au formalisme précédent, on peut identifier ce que nous sommes en train de mesurer, l'observable B, à sa mesure de la manière suivante :

$$B := \sum_b | b \rangle \langle b |$$

et on a alors l'égalité :

$$\langle B \rangle_a = \langle a | B | a \rangle .$$

Considérons plus généralement un état  $|\psi\rangle$ , vecteur engendré par la base  $(|a_i\rangle)_i$  :

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle a_i | \psi \rangle |a_i\rangle .$$

Nous étendrons la définition précédente de la manière suivante :

$$\langle B \rangle_\psi = \langle \psi | B | \psi \rangle$$

où  $\langle B \rangle_\psi$  représente la valeur moyenne de l'observable B mesurée sur un système dans l'état  $\psi$ .

Donnons maintenant une représentation plus concrètement utilisable de ces observables :

$$\begin{aligned} B &= 1B1 = \left( \sum_a |a\rangle\langle a| \right) B \left( \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| \right) \\ &= \sum_{a,a'} |a\rangle\langle a| B |a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a,a'} \langle a | B | a' \rangle |a\rangle\langle a'| . \end{aligned}$$

B est ainsi défini par  $n^2$  actes de mesure, chacun caractérisés par les nombres  $\langle a_i | B | a_j \rangle$  que nous pouvons disposer en matrices :

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | B | a_1 \rangle & \cdots & \langle a_1 | B | a_n \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle a_n | B | a_1 \rangle & \cdots & \langle a_n | B | a_n \rangle \end{pmatrix}$$

Ainsi, à chaque observable nous pouvons associer une matrice (dans le cas de la dimension finie seulement, mais cela se généralise aisément en dimension infini, bienque nous perdons le formalisme matriciel). Une observable est donc un objet qui agit sur les vecteurs d'état (puisque'une matrice représente une fonction linéaire) : les observables sont représentables par des *opérateurs linéaires* agissant sur l'espace des états.

Tout l'art du physicien sera ensuite de déterminer quel opérateur pourra représenter telle propriété physique et ce pour le plus grand nombre de systèmes possibles (corps isolé, N-corps, corps à spin ...).

Il est possible de les déterminer en utilisant des arguments évoqués dans la partie 3, mais ce ne sera pas ici le centre de notre intérêt.

Nous venons de montrer qu'une observable  $B$  est représentable par un opérateur (linéaire, que maintenant nous omettrons de le préciser) dont la valeur moyenne relativement à un état  $|\psi\rangle$  est  $\langle B \rangle_\psi = \langle \psi | B | \psi \rangle$ .

Le sens de l'écriture  $\langle \psi | B | \psi \rangle$  devient alors le suivant :

On fait agir  $B$  sur  $|\psi\rangle$ ,  $B|\psi\rangle = |\phi\rangle := |B\psi\rangle$ , puis nous calculons le produit scalaire  $\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle$ .

Ainsi il ne reste plus qu'à prouver l'hermiticité de ces opérateurs (cf. 2.4.2) pour finir de démontrer le deuxième postulat de la physique quantique.

Mais au fait qu'est-ce que l'hermiticité ?

**Remarque 1 :** le théorème de représentation de Riesz (cf. 2.2.3) pourrait nous permettre de démontrer l'existence et l'unicité d'un opérateur  $B^\dagger$  dit *adjoint de  $B$*  vérifiant :

$$\forall |\psi\rangle, B|\psi\rangle = |\phi_1\rangle, B^\dagger|\psi\rangle = |\phi_2\rangle, \langle \psi | \phi_1 \rangle = \langle \phi_2 | \psi \rangle.$$

Nous appelons *hermitien* ou *autoadjoint* un opérateur  $B$  qui vérifie  $B^\dagger = B$ .

On peut voir l'opérateur  $B$  comme « agissant à gauche » :

$$\langle \psi | B | \psi \rangle = \langle \psi | B\psi \rangle = \langle \psi B | \psi \rangle$$

où  $\langle \psi B |$  est la forme inéaire :  $\langle \psi B | : |\phi\rangle \rightarrow \langle \psi | B | \phi \rangle$ .

**Remarque 2 :** dès maintenant (mais nous le démontrerons proprement un peu plus tard) nous pouvons voir que les  $|a_i\rangle$  sont des vecteurs propres. En effet si nous considérons l'observable  $A$  prenant pour valeurs les  $a_i$ ,  $A = \sum_i |a_i\rangle a_i \langle a_i|$  alors  $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$  qui est bien une équation aux valeurs propres.

### 2.3.5 Quelques remarques quant au produit hermitien

Bien que nous avons affirmé l'intervention d'un produit scalaire hermitien en physique quantique, à aucun moment nous avons précisé duquel s'agissait-il.

Considérons deux vecteurs d'état  $|\psi\rangle$  et  $|\phi\rangle$  et décomposons les dans une base de vecteurs propres d'une observable  $A$  prenant un nombre fini de valeurs (nous nous plaçons donc dans un espace de dimension finie) :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \langle a_i | \psi \rangle |a_i\rangle$$

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^n \langle a_i | \phi \rangle |a_i\rangle$$

et donc :

$$\langle \phi | = \sum_{i=1}^n \overline{\langle a_i | \phi \rangle} \langle a_i |$$

(la conjugaison hermitique transforme un coefficient complexe en son conjugué en vertu de la symétrie hermitique du produit hermitien)

alors :

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{i,j} \langle \phi | a_j \rangle \langle a_i | \psi \rangle \langle a_j | a_i \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \phi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^n \overline{\psi(a_i)} \psi(a_i)$$

qui correspond au produit hermitien le plus classique qui soit.

Considérons maintenant l'observable position  $Q$  qui prend une quantité non dénombrable de valeurs possibles. Nous avons donc le produit hermitien d'espace de Hilbert suivant :

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\phi(x)} \psi(x) dx^3.$$

**Remarque 1 :** le formalisme que nous utilisons impose une condition supplémentaire à la fonction d'onde : comme nous l'avons vu précédemment,

la probabilité de trouver dans le cube infinitésimal de volume  $dx^3$  centré en  $x$  au temps  $t$  s'écrit :

$$dP(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx^3$$

et plus généralement, la probabilité de trouver une particule dans une zone  $A$  de l'espace au temps  $t$  est :

$$P_A(t) = \int_A |\psi(x, t)|^2 dx^3.$$

Nous supposons donc la convergence de ces intégrales.

Attention, ceci n'est pas un postulat mais une obligation : nous faisons toujours l'hypothèse en physique (de quelque branche que ce soit) de l'existence de l'infini dans notre monde (au passage, l'existence de l'infini en mathématique est purement axiomatique !).

**Remarque 2 :** dans la mesure ou nous utilisons une probabilité, les résultats de cette dernière doivent être compris entre 0 et 1 et vérifier la relation :

$$P_{\mathbb{R}^3}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, t)|^2 dx^3 = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Avec cette condition,  $|\psi\rangle$  est dite *normalisée*.

Nous verrons (cf. 2.5.3 - stabilité par multiplication par un complexe) qu'un état multiplié par un nombre complexe représente le même état. Du coup, cette condition ne restreint pas l'ensemble des états possibles, dans la mesure où :

si  $|\psi\rangle$  est un état, alors  $\frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} |\psi\rangle$  lui est équivalent (en terme d'informations) et est normalisé.

Nous supposons du coup tous nos états normalisés.

## 2.4 Quelques développements quant aux observables

Nous sortons maintenant du cadre d'interprétation de Schwinger pour revenir à des cas plus généraux, le but étant de voir comment l'étude des observables nous permet de mieux comprendre le monde quantique.



### 2.4.1 Variantes du Postulat 2

La deuxième assertion du postulat 2 (La valeur moyenne, espérée, d'une observable  $A$  agissant sur un vecteur d'état  $\psi$  est donné par :  $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$ ) est équivalente à ces deux autres assertions, qui précisent un peu mieux la manière dont nous utiliserons les opérateurs :

**Postulat 2'** : La mesure d'une grandeur physique représenté par l'observable  $A$  ne peut fournir comme résultat que l'une des valeur propre de  $A$ .

**Postulat 2''** : Si une mesure de l'observable  $A$  est faite sur l'état  $|\psi\rangle$ , alors la probabilité d'obtenir la valeur propre particulière  $a_k$  comme résultat est

$$Prob(A = a_k; |\psi\rangle) = \langle \psi | P_k | \psi \rangle$$

où  $P_k$  est le projecteur sur l'espace propre associé à la valeur propre  $a_m$  :

$$P_k = \sum_{j=1}^{dim(k)} | a_{k,j} \rangle \langle a_{k,j} |$$

**Démonstration :**

–  $\Rightarrow$

L'idée sera de transformer la formule du résultat attendu, moyen, en une somme de résultats pondérés par des probabilités (ce qui revient à écrire une espérance mathématique à l'envers) puis d'isoler les termes.

On supposera pour simplifier que l'opérateur  $A$  possède une ensemble discret de valeurs propres  $(a_m)_m$  (mais le cas non discret se démontre de façon analogue).

On définit une fonction d'opérateur  $f(A)$ ,  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , comme :

$$f(A) = \sum_m f(a_m) P_m.$$

Cette définition est motivée par le fait que si  $a$  est valeur propre de  $A$ ,  $A | a \rangle = a | a \rangle$ , alors :

$$\forall P \in \mathbb{R}[X], P(A) | a \rangle = P(a) | a \rangle$$

et qu'on a la décomposition :

$$A = \sum_m a_m P_m.$$

En vertu de la définition de l'espérance mathématique, on a la formule :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_m c_m \text{Prob}(A = c_m; | \psi \rangle)$$

où  $(c_m)_m$  est l'ensemble des valeurs prises par A, et non nécessairement ses valeurs propres!

De la même façon :

$$\langle f(A) \rangle_\psi = \sum_m f(c_m) \text{Prob}(A = c_m; | \psi \rangle)$$

En définissant ensuite la fonction :

$$\chi_r : t \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{si } t=r \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On a l'égalité suivante (en supposant que  $r \in (c_m)_m$ ) :

$$\langle \chi_r(A) \rangle_\psi = \text{Prob}(A = r; | \psi \rangle).$$

Utilisons maintenant le *postulat 2* pour affirmer que :

$$\langle \chi_r(A) \rangle_\psi = \langle \psi | \chi_r(A) | \psi \rangle$$

mais comme  $\chi_r(A) = \sum_m \chi_r(a_m) P_m$ , par définition, on obtient :

$$\langle \chi_r(A) \rangle_\psi = \langle \psi | \sum_m \chi_r(a_m) P_m | \psi \rangle$$

Le second terme est toujours nul, et donc  $\text{Prob}(A = r; | \psi \rangle)$ , à moins que  $r$  ne soit une valeur propre de A (qui démontre le Postulat 2').

Dans le cas  $r = a_k$ , valeur propre de A, on a :

$$\langle \chi_{a_k}(A) \rangle_\psi = \langle \psi | \sum_m \chi_{a_k}(a_m) P_m | \psi \rangle = \langle \psi | P_k | \psi \rangle$$

qui démontre le Postulat 2''.

-  $\Leftarrow$

Reciproquement, on a (Postulat 2' et définition de l'esperance mathématique) :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_m a_m \text{Prob}(A = a_m; | \psi \rangle)$$

puis (Postulat 2'') :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_m a_m \langle \psi | P_m | \psi \rangle .$$

En utilisant l'égalité :

$$AP_m = a_m P_m,$$

on obtient :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_m \langle \psi | AP_m | \psi \rangle .$$

Enfin, grâce à l'équation de fermeture :  $\sum_m P_m = Id$  et la linéarité à droite du produit hermitien on retombe sur le postulat 2 :

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle .$$

CQFD.

Au final, nous avons trouvé une façon simple d'obtenir des prévisions de la fonction d'onde relativement à une observable A. Il suffit d'écrire la fonction d'onde dans une base *orthonormée* de vecteurs propres de A (A-représentation) :

$$| \psi \rangle = \sum_m \sum_{j=1}^{\dim(m)} c_{m,j} | a_{m,j} \rangle$$

où  $c_{m,j} = \langle a_{m,j} | \psi \rangle$  (i.e les composantes de  $| \psi \rangle$  dans la base de vecteurs propres) et la probabilité d'obtenir tel résultat en mesurant A est :

$$\text{Prob}(A = a_m; | \psi \rangle) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle = \sum_{j=1}^{\dim(m)} | c_{m,j} |^2$$

**Remarque** : c'est maintenant que la A-représentation prend tout son sens : si par exemple nous considérons la  $x$ -représentation,  $\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$ ,

où  $\langle x |$  est le conjugué hermitique du vecteur propre normé associé à la valeur propre  $x$  de l'opérateur position  $Q$  (que nous supposons non dégénéré), la signification sera :

$$Prob(Q = x; | \psi \rangle) = | \psi(x) |^2$$

c'est à dire qu'à  $t$  fixé, la probabilité de trouver le système dans l'état  $| \psi \rangle$  à l'endroit  $x$  est de  $| \psi(x) |^2$ .

Nous retrouvons de cette façon la prédiction de Born (qui est à la base empirique).

#### 2.4.2 Nécessité pour une observable d'être hermitique

Une observable est représentée par un opérateur, certes, mais tout opérateur représente-t-il une observable ? Nous allons maintenant montrer la nécessité pour une observable d'être un opérateur hermitique, et donc le reste non démontré du postulat 2.

Nous savons dorénavant que les seules valeurs possibles que peut prendre une observable sont ses valeurs propres. Vu que ce sont des mesure de propriétés, elles se doivent d'être réelle (parcequ'une vitesse égale à  $3 + \sqrt{2}i$  n'a pas vraiment de sens). Du coup, les valeurs moyennes des opérateurs sont aussi des nombres réels. Si  $A$  est une observable, on a donc :

$$\forall | \psi \rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi | A | \psi \rangle \in \mathbb{R} \text{ i.e } \langle \psi | A | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | A | \psi \rangle}$$

Rappel : un opérateur est dit *hermitien* s'il vérifie :  $A = A^\dagger$ .

Cette propriété est équivalente à :

$$\forall | \psi_1 \rangle \in \mathcal{H}, \forall | \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}$$

#### Démonstration :

-  $\Rightarrow$

$$\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A \psi_2 \rangle = \langle A \psi_1 | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}$$

-  $\Leftarrow$

$$\overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle} = \overline{\langle \psi_2 | A \psi_1 \rangle} = \langle A \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A^\dagger | \psi_2 \rangle$$

On a donc :

$$\forall | \psi_1 \rangle \in \mathcal{H}, \forall | \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A^\dagger | \psi_2 \rangle$$

i.e  $\langle \psi_1 | A - A^\dagger | \psi_2 \rangle = 0$  et  $A$  est bien hermitien.

CQFD.

Maintenant, nous allons montrer l'implication (l'équivalence est évidemment vraie, mais elle ne nous intéressera pas) :

$$\begin{aligned} & (\forall | \psi \rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi | A | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | A | \psi \rangle}) \Rightarrow \\ & (\forall | \psi_1 \rangle \in \mathcal{H}, \forall | \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}) \end{aligned}$$

**Démonstration :**

Soient  $| \psi_1 \rangle$  et  $| \psi_2 \rangle$  deux fonctions d'onde et  $a$  et  $b$  deux nombres complexes.

On pose  $| \psi \rangle = a | \psi_1 \rangle + b | \psi_2 \rangle$ .

On a donc :

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = |a|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |b|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle + \bar{a}b \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle + a\bar{b} \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle.$$

Comme  $\langle \psi | A | \psi \rangle$  est réel,

$$|a|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |b|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle$$

l'est aussi, et

$$\bar{a}b \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle + a\bar{b} \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle$$

est réel également.

Pour le choix particulier des variables complexes  $a = b = 1$ , nous obtenons :

$$\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle = \overline{\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle} + \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}.$$

Maintenant, choisissons le cas particulier  $a = 1, b = i$ , on trouve :

$$i(\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle - \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle) = -i(\overline{\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle} - \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}).$$

En sommant ces deux équations nous trouvons bien :  $\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle}$ .

CQFD.

Il est à noter que cette implication est fautive dans le cas de  $\mathbb{R}$ -espaces vectoriels.

Vu que les valeurs moyennes d'un opérateur  $A$  se doivent d'être réelles i.e

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \langle \psi | A | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | A | \psi \rangle},$$

l'implication que nous venons de démontrer entraîne ainsi l'hermiticité de l'opérateur.

### 2.4.3 Propriétés d'un opérateur hermitique

L'hermiticité des observables est d'une importance capitale :

- Premièrement, elle oblige l'opérateur à avoir des valeurs propres réelles, ce qui est plutôt rassurant, vu que les valeurs possibles prises par une observable sont justement ses valeurs propres :

Si  $|\psi\rangle$  est un vecteur propre (donc non nul) associé à la valeur propre  $a$ , on a grâce à l'hermiticité de  $A$  :

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | A | \psi \rangle}$$

et donc :

$$\langle \psi | a | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | a | \psi \rangle}$$

d'où :

$$a \langle \psi | \psi \rangle = \bar{a} \langle \psi | \psi \rangle$$

c'est à dire :

$$a = \bar{a}.$$

CQFD.

- Deuxièmement, les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes d'un opérateur hermitien forment une famille orthogonale :

Soit  $A | \psi_1 \rangle = a_1 | \psi_1 \rangle$  et  $A | \psi_2 \rangle = a_2 | \psi_2 \rangle$ .

L'hermiticité de A entraîne :

$$\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle} = 0$$

et donc :

$$a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \overline{a_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle} = 0$$

ce qui nous donne :

$$(a_1 - a_2) \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$$

soit :

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0.$$

CQFD.

On pourrait poser le problème des valeurs propres dégénérées mais il est toujours possible dans un espace de Hilbert (admis) de transformer une famille de vecteurs non-orthogonaux mais linéairement indépendants en une famille orthogonale de combinaisons linéaires des vecteurs précédents.

Aussi, dès que nous considérerons une base de vecteurs propres d'un opérateur, nous supposerons qu'elle est orthonormée, tant que tous ces vecteurs sont de norme finie.

Mais peut-on réellement parler de *base* ? Beaucoup de livres supposent la *complétude* de la famille de vecteurs propres i.e qu'elle engendre l'espace des états dans le cas de la dimension infinie. Mais certains contre-exemples, comme celui de l'opérateur quantité de mouvement  $-i \frac{\partial}{\partial x}$ , montrent qu'il existe des opérateurs n'engendrant pas de famille complète de vecteurs propres pour un espace de Hilbert. Il faudra s'y faire ...

#### 2.4.4 Principe d'incertitude de Heisenberg

Nous définissons le commutateur de deux opérateurs A et B comme  $[A, B] = AB - BA$ .

Savoir si deux observables commutent est très important en physique quantique. En fait, il sera possible d'obtenir une information détaillée de deux observables simultanément si et seulement si elles commutent !

En effet, deux opérateurs qui commutent (idem plusieurs opérateurs qui commutent deux à deux) possèdent un système de vecteurs propres en communs (nous admettrons cette propriété) et donc en décomposant un état sur cette base, nous obtenons à la fois les probabilités d'obtenir telle mesure de A mais aussi celles de B. On dit qu'ils sont *simultanément mesurables*.

Par exemple, les nombres quantiques utilisés dans la description de l'état de l'atome d'hydrogène  $n, l, m$ , et le spin, noté ici  $\lambda$ , permettent une description complète de son état : les opérateurs  $H$  (l'opérateur hamiltonien pour l'énergie),  $J^2$  (opérateur moment angulaire total),  $J_z$  (sa composante suivant  $z$ ) et  $S_z$  (opérateur spin projeté suivant  $z$ ) commutent deux à deux.

On trouve alors comme valeurs propres les résultats connus :

$$\begin{aligned}
 H |nlm\lambda\rangle &= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega |nlm\lambda\rangle, \quad n = 1, 2, \dots \\
 L^2 |nlm\lambda\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |nlm\lambda\rangle, \quad l = 0, 1, \dots, n-1 \\
 L_z |nlm\lambda\rangle &= m\hbar |nlm\lambda\rangle, \quad m = -l, \dots, l \\
 S_z |nlm\lambda\rangle &= \lambda\hbar |nlm\lambda\rangle, \quad \lambda = \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

A contrario, deux opérateurs qui ne commutent pas ne sont pas mesurables simultanément. Ce résultat provient du principe d'incertitude que nous allons démontrer. Premièrement, introduisons une façon de mesurer la précision de nos mesures, une façon de voir comment s'agencent nos mesures autour de la valeur réelle de l'observable à ce moment là (s'il en est une !) :

$$\Delta_\psi = (\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2)^{\frac{1}{2}} = (\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2)^{\frac{1}{2}} = \langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi$$

qui correspond à la notion d'écart-type en mathématiques.

**Remarque :** si  $|\psi\rangle$  est un vecteur propre de A associé à la valeur propre  $a$  alors  $\Delta_\psi A = 0$  et  $|\psi\rangle$  possède exactement la valeur  $A = a$  à ce moment là .

Nous allons montrer la relation d'incertitude suivante :



**Proposition 1 (Principe d'incertitude de Heisenberg)**

Soit  $O_1$  et  $O_2$  deux opérateurs, alors ils vérifient l'inégalité :

$$\Delta_\psi O_1 \Delta_\psi O_2 \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [O_1, O_2] | \psi \rangle|$$

**Démonstration :**

On pose :

$$A = O_1 - \langle O_1 \rangle_\psi Id$$

et :

$$B = O_2 - \langle O_2 \rangle_\psi Id.$$

Du coup, grâce à l'hermiticité de A :

$$(\Delta_\psi O_1)^2 = \langle A^2 \rangle_\psi = \langle \psi | A^2 \psi \rangle = \langle A\psi | A\psi \rangle = \| A\psi \|^2$$

où la dernière égalité vient de l'hermiticité de A, et enfin :

$$\Delta_\psi O_1 = \| A\psi \|$$

(nous ne considérons que des quantités positives).

Idem :

$$\Delta_\psi O_2 = \| B\psi \| .$$

Vu que l'identité commute avec tout opérateur, on a aussi :  $[O_1, O_2] = [A, B]$ . La relation d'incertitude est donc équivalente, avec nos notations, à :

$$\| A\psi \| \| B\psi \| \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| .$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz nous donne :

$$\| A\psi \| \| B\psi \| \geq |\langle A\psi | B\psi \rangle| = |\langle \psi | AB\psi \rangle| .$$

Si nous considérons l'anticommutateur  $[A, B]_+ = AB + BA$ , nous avons la relation :

$$AB = \frac{1}{2}([A, B]_+ + [A, B])$$

que nous réinséreront dans l'équation précédente :

$$\Delta_\psi O_1 \Delta_\psi O_2 \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B]_+ + [A, B] | \psi \rangle| .$$

Remarquons maintenant que  $[A, B]_+$  est hermitien alors que  $[A, B]$  est *antihermitien* :

$$[A, B]^\dagger = -[A, B]$$

puisque

$$(AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = -[A, B]$$

(même raisonnement pour  $[A, B]_+$ ).

Du coup le nombre  $\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle$  est imaginaire pur puisque :

$$\overline{\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle} = \overline{\langle \psi | [A, B] \psi \rangle} = \langle [A, B] \psi | \psi \rangle = - \langle \psi | [A, B] \psi \rangle = - \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle .$$

De la même façon,  $\overline{\langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle} = \langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle$

et  $\langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle$  est réel.

On a donc  $\langle \psi | [A, B]_+ + [A, B] | \psi \rangle$  de la forme  $a + ib$  et l'égalité

$$|a + ib|^2 = |a|^2 + |b|^2$$

nous permet de conclure :

$$\Delta_\psi O_1 \Delta_\psi O_2 \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B]_+ + [A, B] | \psi \rangle|$$

$$\Delta_\psi O_1 \Delta_\psi O_2 \geq \frac{1}{2} (|\langle \psi | [A, B]_+ | \psi \rangle|^2 + |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2)^{\frac{1}{2}} \geq$$

$$\frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | [O_1, O_2] | \psi \rangle| .$$

CQFD.

Par exemple, nous pourrions démontrer la relation de commutation entre l'opérateur position  $Q$  et l'opérateur impulsion  $P$ ,  $[Q, P] = i\hbar$ , qui conduit à la relation d'incertitude :

$$\Delta_\psi Q \Delta_\psi P \geq \frac{\hbar}{2} .$$

Ainsi, si nous cherchons à localiser une particule et que nous voulons à augmenter la précision de cette localisation, alors à partir d'une certaine

petitesse d'échelle, il nous sera impossible de déterminer précisément la vitesse de la particule.

En fait, si nous nous plaçons dans le cas le plus agréable :

$$\Delta_\psi Q \Delta_\psi P = \frac{\hbar}{2}$$

La précision de mesure de la position est inversement proportionnelle à celle de la mesure de la vitesse.

En conséquence, la structure même du monde quantique nous *interdit* de connaître simultanément la position et la vitesse d'une particule de façon précise ! Rappelons qu'en mécanique classique la connaissance précise de ces deux quantités est indispensable à la connaissance de l'état d'un système.

## 2.5 $\mathbb{C}$ -Espace vectoriel

Après avoir doucement esquissé les lois du monde quantique, nous allons maintenant étudier quelques propriétés nous conduisant à la structure de  $\mathbb{C}$ -espace vectoriel annoncée au postulat 1.

### 2.5.1 Une équation de conservation bien connue

Si en électromagnétisme, par exemple, l'usage des nombres complexes dans la fonction d'onde est d'un usage pratique, en mécanique quantique, c'est la structure même de l'univers qui impose d'avoir des fonctions d'onde à valeur complexe.

Dans la mesure où nous acceptons l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde, et donc que  $dP(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx^3$ ,  $|\psi(x, t)|^2$  est vue comme une densité de probabilité.

De la même façon que la charge, la masse, etc sont conservés, qui dit densité  $\rho$  (de systèmes fermés, comme nous considérons depuis le début) dit *équation de conservation* de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

où  $\vec{j}$  représente le *vecteur courant* de la quantité donc on considère la densité.

En prenant  $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \overline{\psi(x, t)}\psi(x, t)$ , nous cherchons un vecteur courant  $\vec{j}$  qui vérifie l'équation de conservation.

Nous allons utiliser l'équation de Schrödinger, provisoirement admise (sa démonstration constituera la dernière partie de ce mémoire), mais sous sa  $x$ -représentation (c'est à dire multiplié à gauche par  $\langle x |$ ):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t).$$

$H$ , l'hamiltonien, est l'opérateur associé à l'observable énergie et peut prendre la forme (admis) :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

En fait,  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$  est l'opérateur énergie cinétique. Nous simplifions donc ici la situation : toutes les contributions énergétiques d'un système ne sont pas uniquement dues à son énergie cinétique ! Mais cet exemple sera déjà suffisant pour confirmer la caractérisation complexe des fonctions d'onde : si quelques systèmes en ont besoin, alors c'est une condition nécessaire.

Nous utiliseront également sa forme conjuguée complexe :

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

La probabilité pour une particule d'être dans la zone d'espace  $\Omega$  est donnée par  $\int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx^3$ .

En dérivant cette expression nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \overline{\psi}\psi dx^3 = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \overline{\psi}}{\partial t} \psi + \overline{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx^3$$

En appliquant l'équation de Schrödinger et sa forme conjuguée complexe, on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho dx^3 = \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} (\overline{\psi}(\nabla^2 \psi) - \psi(\nabla^2 \overline{\psi})) dx^3 = \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \text{div}(\overline{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \overline{\psi}) dx^3$$

et vu que  $\Omega$  est quelconque, on peut extirper de cette équation une forme locale :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) = \text{div} \left( \frac{i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi}) \right).$$

On peut alors écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) + \text{div} \vec{j}(r, t) = 0$$

avec

$$\vec{j} = \frac{-i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi}).$$

On a bien exhibé un *vecteur courant, ou flux, de probabilité* qui convienne à une équation de conservation.

## 2.5.2 Un mouvement possible que dans un monde complexe

**Remarque :** dire que  $|\psi(t)\rangle$  est une fonction complexe est équivalent à dire que  $\psi(x, t)$  est un fonction du temps à valeur dans  $\mathbb{C}$  pour tout  $x$  fixé. Nous allons montrer que  $\psi(x, t)$  évolue de façon complexe quand  $t$  varie.

En se souvenant que pour  $z \in \mathbb{C}$ , on a :

$$\text{Im}(z) = \frac{z - \bar{z}}{2i},$$

le vecteur flux s'écrit de façon plus concise :

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi).$$

Si  $|\psi(t)\rangle$  est à valeur dans  $\mathbb{C}$ , on peut écrire :

$$\psi(x, t) = A(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} P(x, t)}$$

où  $A(x, t)$  et  $P(x, t)$  représentent respectivement l'*amplitude réelle* et la *phase* de la fonction d'onde. Supposons maintenant que  $\psi(x, t)$  évolue en temps de façon réelle : non pas que  $\psi(x, t)$  soit à valeur dans  $\mathbb{R}$  puisque comme nous l'avons vu, la multiplication par un nombre complexe ne change pas la fonction d'onde, mais telle que la phase soit indépendante du temps i.e telle que la contribution complexe de la fonction d'onde soit constante par rapport au temps.

On a donc (allégeons un peu les écritures) :

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}P} \text{ et } \bar{\psi} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}P}$$

on a ensuite :

$$\vec{\nabla}\psi = (\vec{\nabla}A)e^{\frac{i}{\hbar}P} + A\frac{i}{\hbar}(\vec{\nabla}P)e^{\frac{i}{\hbar}P}$$

et :

$$\bar{\psi}\vec{\nabla}\psi = A(\vec{\nabla}A) + A^2\frac{i}{\hbar}(\vec{\nabla}P).$$

Du coup :

$$\vec{j} = A^2\frac{1}{m}(\vec{\nabla}P) = 0.$$

En conclusion, nous obtenons une probabilité stationnaire : la fonction d'onde n'évoluera plus ( $\rho(r, t) = \text{constante}$  par rapport au temps). L'état ainsi engendré ne peut rendre compte de la réalité physique du système puisque sans évolution. Ainsi la fonction d'onde se doit d'être complexe pour traduire la réalité du monde quantique.

### 2.5.3 Le principe de superposition

Il affirme que toute combinaison linéaire à coefficients complexes d'états reste un état possible pour le système. C'est cette assertion qui donne une structure de  $\mathbb{C}$ -espace vectoriel à l'espace des états. D'après Dirac, c'est "l'idée fondamentale nouvelle de la physique quantique". Il est mathématiquement équivalent à la linéarité de l'équation de Schrödinger (on rappelle qu'en mécanique classique, les équations de Newton ne sont pas linéaires!).

#### Stabilité par multiplication par un complexe

Multiplions un état  $|\psi\rangle$  par un nombre complexe  $z$ .

Soit  $A$  une observable, appliquons les résultats de prédiction que nous avons mis en avant dans la partie 2.4.1 :

$$|z\psi\rangle = \sum_m \sum_{j=1}^{\dim(m)} z c_{m,j} |a_{m,j}\rangle$$

et du coup :

$$\begin{aligned}
\text{Prob}(A = a_m; | z\psi \rangle) &= \langle z\psi | P_m | z\psi \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{\dim(m)} | z c_{m,j} |^2 \\
&= | z |^2 \left( \sum_{j=1}^{\dim(m)} | c_{m,j} |^2 \right) \\
&= | z |^2 \text{Prob}(A = a_m; | \psi \rangle).
\end{aligned}$$

La distribution des probabilités est simplement multiplié par une constante  $| z |^2 \in \mathbb{R}$  qui n'influe pas la répartition en probabilité de chacun des résultats (en tolérant une probabilité totale différente de 1 ...). Vu que nous concevons la fonction d'onde comme donnant l'information que nous pouvons obtenir du système, ces deux fonctions sont donc *équivalentes*.

D'ailleurs, nous pourrions définir une relation d'équivalence :  $\psi \sim \phi \Leftrightarrow \exists z \in \mathbb{C} / \phi = z\psi$  et substituer la fonction d'onde par la classe de fonctions  $\frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} | \psi \rangle$  "normalisée".

### La stabilité par linéarité expliquée par les fentes d'young

La justification de la linéarité est expérimentale. Nous savons que le principe de superposition est déjà en vigueur en mécanique ondulatoire (en raison des interférences, deux ondes peuvent se superposer). Il reste à montrer que tout système possède une certaine nature ondulatoire à l'échelle quantique. Nous allons utiliser des fentes d'young en prenant pour source un faisceau d'électrons : On accélère des électrons à l'aide d'une différence de potentiel depuis une source en direction d'une plaque percée de deux fentes parallèles. On place ensuite derrière cette plaque un écran qu'on munit d'un détecteur qui peut compter les électrons impactant en tel lieu de l'écran (on considèrera un écran monodimensionnel pour simplifier : l'impact sera uniquement déterminé par son abscisse  $x$ ). On supposera le détecteur suffisamment sensible et le courant d'électrons d'intensité suffisamment faible pour le mesurer comme une pluie de particule et non comme une courant électrique : le détecteur donnera une suite de réponses discrètes dans le temps.

Après une longue exposition, nous allons reconstituer le nombre d'impact à  $x$  fixé :  $N(x)$ . En divisant par  $x$ , nous obtenons une distribution statistique qui, pour un nombre de coups tendant vers l'infini, tend vers la densité de probabilité  $P(x)$  de trouver l'électron en  $x$  (au sens où nous l'avons vu précédemment) :  $P(x)dx$  représente la probabilité de trouver un électron entre  $x$  et  $x + dx$ .

Supposons que nous ne croyions pas en la dualité onde-corpuscule et conservons notre vision purement mécanique de l'électron : l'électron passe par la fente 1 OU (au sens strict) la fente 2 avant d'impacter sur l'écran. Si nous obstruons la fente 2 (resp. 1) nous obtiendrons une densité de probabilité  $P_1(x)$  (resp.  $P_2(x)$ ) telle que  $P_1(x) + P_2(x) = P(x)$  (égalité logique imposée par la conjonction OU stricte).

Cependant, on trouve expérimentalement que  $P_1(x) + P_2(x) \neq P(x)$  ! Il y a donc interférence (destructive comme constructive) entre les faisceaux d'électron et l'assertion "l'électron passe par la fente 1 OU (au sens strict) la fente 2" est fausse. Cet exemple confirme l'hypothèse de Broglie quand à la dualité onde-corpuscule et affirme qu'en superposant deux états, on obtient un nouvel état.

**Remarque :** l'état 0 qui appartient bien à l'espace de Hilbert n'a aucune signification et n'est pas considéré comme un état possible en tant que tel, bien qu'il fasse partie de la structure.



### 3 L'équation de Schrödinger

#### 3.1 Opérateurs unitaires et changements de référentiels

Nous avons vu tout à l'heure le problème du référentiel d'observation, puisque l'observateur a un rôle important en physique quantique. Actuellement, nous voyons le monde comme possédant une structure d'espace-temps *homogène, isotropique et continu* dans la mesure où il est isolé d'actions extérieures (bien que la continuité soit de plus en plus douteuse : elle rend impossible à introduire la gravité en physique quantique). Cela nous amène à supposer que deux observateurs étudiant la *même* observable depuis deux endroits différents doivent obtenir les mêmes prédictions.

Mais comment définir des transformations qui préservent les prédictions probabilistes de la physique quantique ? La conservation de ses prédictions impose la règle  $|\langle a_n | \psi \rangle|^2 = |\langle a'_n | \psi' \rangle|^2$  où  $|a_n\rangle$  est un vecteur propre d'une observable quelconque et l'apostrophe indique l'état du système observé après déplacement de l'observateur i.e du référentiel d'étude.

Après les quelques définitions suivantes, nous utiliseront le théorème de Wigner (sans démonstration) :

**Définition 1** *Un opérateur linéaire  $U$  sur un  $\mathbb{C}$ -espace de Hilbert est dit unitaire s'il préserve le produit hermitien :  $\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \langle U\phi | U\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$ .*

Cette condition est équivalente à  $U^\dagger U = U U^\dagger = Id$ .

**Définition 2** *Un opérateur  $A$  sur un  $\mathbb{C}$ -espace de Hilbert est dit anti-unitaire s'il est antilinéaire (c'est à dire que  $A(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = \bar{a}A|\psi\rangle + \bar{b}A|\phi\rangle$ ) et si il vérifie  $\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \langle A\phi | A\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$ .*

Cet opérateur là ne sera donc pas supposé linéaire ! (a contrario de tout les autres).

**Remarque :** le carré d'un opérateur unitaire comme d'un anti-unitaire est un opérateur unitaire.

Un exemple classique d'opérateur anti-unitaires en mécanique ondulatoire est l'opérateur renversement du temps :  $(T\psi)(x) = \overline{\psi(x)}$  (cf. écriture de la

fonction d'onde dans l'introduction historique : la conjugaison complexe transforme la phase de l'onde en son opposé)

**Théorème 2 (de Wigner)**

Soit  $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$  une application d'un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  sur lui-même qui satisfait :

$$\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, |\langle \phi | \psi \rangle| = |\langle \phi' | \psi' \rangle|,$$

alors il existe un opérateur  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , unique au facteur de phase près, qui est soit unitaire soit anti-unitaire et qui vérifie :

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, |\psi'\rangle = U |\psi\rangle.$$

Au lieu de considérer un changement de référentiel i.e un déplacement des observateurs, nous pouvons considérer de façon équivalente des mouvements du système d'étude pour un observateur fixe.

C'est ce que nous ferons ici. Nous considérerons donc des transformations menant un état initial  $|\psi\rangle$  en un état déplacé  $|\psi'\rangle$ .

Notre façon de voir, dite *active* à contrario de la précédente dite *passive*, nous permettra de comprendre ce qu'il arrivera à un système si on lui applique des transformations géométriques, tel une translation dans le temps, et cette étude nous amènera directement à l'équation de mouvement d'une particule quantique : l'équation de Schrödinger.

D'abord, étudions un peu mieux les propriétés de ces opérateurs.

En fait, seuls les opérateurs unitaires nous intéresseront puisque nous ne considérerons que des transformations continues. En effet, si nous prenons l'opérateur  $U(l)$  qui déplace l'observable suivant un axe spatial d'une distance  $l$ , il est équivalent de faire cette transformation en deux fois (nous invoquons ici la continuité de l'espace-temps) :

$$U(l) = U\left(\frac{l}{2}\right)U\left(\frac{l}{2}\right) = U\left(\frac{l}{2}\right)^2.$$

Ainsi,  $\forall l \in \mathbb{R}_+, \exists A$ , opérateur unitaire ou anti-unitaire, tel que  $U(l) = A^2$  et toute transformation de l'espace-temps sera donc représentée par un opérateur unitaire en vertu de la remarque vue plus haut.

Ensuite, les observables elles-mêmes sont changées par ces transformations :

soit  $U$  une transformation telle que  $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ , soit  $A'$  (resp.  $A$ ) l'observable associée à  $|\psi'\rangle$  (resp.  $|\psi\rangle$ ).

Alors  $A'$  doit vérifier l'équation aux valeurs propres

$$A'|a'_n\rangle = a_n|a'_n\rangle$$

i.e

$$A'U|a_n\rangle = a_nU|a_n\rangle$$

et

$$U^{-1}A'U|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle.$$

L'équation aux valeurs propres de  $A$ ,

$$A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle,$$

entraîne

$$U^{-1}A'U = A,$$

puisque cette équation est valable pour toutes les valeurs propres.

Enfin :

$$A' = UAU^{-1}.$$

L'opérateur unitaire est donc bien adapté à décrire ces transformations : il revient à faire un changement de base (au moins de façon évidente en dimension finie).

**Remarque :** l'opérateur unitaire est l'équivalent pour un  $\mathbb{R}$ -espace vectoriel de l'endomorphisme orthogonal.

Considérons maintenant une famille d'opérateurs dépendant d'un paramètre  $U(s)$  telle que :

$$U(0) = Id$$

et que :

$$U(s_1)U(s_2) = U(s_1 + s_2).$$

On pourrait montrer qu'il est possible pour toute famille d'opérateurs à un paramètre d'obtenir ces conditions là en transformant le paramètre, mais ce ne sera pas nécessaire dans la mesure où les opérateurs que nous rencontrerons posséderont de façon évidente ces propriétés.

Si  $s$  est très petit, ce qui exprime une transformation infinitésimale, nous avons le développement limité suivant :

$$U(s) = Id + s \left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} + O(s^2)Id$$

Le fait que  $U$  soit unitaire s'exprime alors de la façon suivante :

$$U(s)U^\dagger(s) = Id + s \left[ \left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} + \left. \frac{dU^\dagger}{ds} \right|_{s=0} \right] + O(s^2)Id = Id.$$

Le terme en  $s$ ,  $\left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} + \left. \frac{dU^\dagger}{ds} \right|_{s=0}$ , s'annule et nous autorise à écrire :

$$\left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} = iK$$

avec  $K = K^\dagger$ , dans la mesure où  $\left. \frac{dU^\dagger}{ds} \right|_{s=0} = \left[ \left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} \right]^\dagger = -iK$ .

On appelle l'opérateur hermitien  $K$  le *générateur* de la famille d'opérateurs unitaires. Cette nomination vient du fait que  $K$  détermine entièrement la famille d'opérateurs. En effet, en différentiant l'égalité

$$U(x)U(y) = U(x + y),$$

nous obtenons :

$$\left. \frac{\partial}{\partial y} U(x + y) \right|_{y=0} = U(x) \left. \frac{\partial}{\partial y} U(y) \right|_{y=0} = iKU(x)$$

puis en posant  $s = x + y$ , nous trouvons :

$$\left. \frac{d}{ds} U(s) \right|_{s=x} = iKU(x)$$

qui est une équation différentielle du premier ordre et avec la condition initiale  $U(0) = Id$  et nous avons la solution unique :

$$U(s) = e^{iKs}.$$

### 3.2 Symétries préservant l'espace-temps

Nous appelons *symétrie* en physique toute transformation qui à un système associe un autre système soumis aux mêmes lois d'évolutions.

Par exemple, jetons une boule de neige. Avançons d'un pas, puis jetons à nouveau une boule de neige exactement de la même façon que la précédente. En supposant que les deux boules étaient identiques, et qu'aucun obstacle n'obstruait votre champ de vision, la deuxième boule s'écrasera exactement un pas plus loin que la précédente.

Si les lois du mouvement (de la boule de neige) sont ici préservées, c'est parce que la translation en espace est une symétrie.

En physique classique, l'ensemble des transformations qui préservent les équations de mouvements de systèmes relativistes forment un groupe appelé *groupe de Lorentz*. Si nous supposons la vitesse du système étudié faible devant celle de la lumière (ce qui est ici le toujours le cas) l'ensemble de ces transformations peut être remplacé par le *groupe galiléen* : le groupe qui préserve le référentiel d'inertie, c'est à dire l'ensemble des transformations qui envoient un référentiel galiléen sur un référentiel galiléen.

Il est composé de :

1. *L'ensemble des translations en espace.*
2. *L'ensemble des rotations d'espace.* Nous invoquons ici l'isotropie de l'univers : ce n'est pas parce que vous regardez suivant une direction spécifique que vous changerez les lois universelles du mouvement. (Cependant, certaines théories cosmologiques considèrent cela comme non trivial et même parfois faux). Attention, une rotation non constante dans le temps n'est plus une symétrie ! Elle rajoute au système des forces d'inerties.
3. *L'ensemble des accélérations rectilignes nulles .* (excusez moi je n'ai pas trouvé de meilleur nom). Ce sont les transformations qui confèrent au système une vitesse constante suivant une direction. Nous admettrons que ce sont des symétries.
4. *L'ensemble des translations dans le temps.* Si ces translation n'étaient pas des symétries, ou au moins de façon approchée, toute la physique et même la méthode scientifique s'effondreraient : une expérience faite aujourd'hui n'aurait pas les mêmes résultats qu'une expérience identique faite le lendemain. (Cependant, d'après Dirac, la dilatation de

l'espace-temps aurait une influence dans le temps sur les constantes cosmologiques et cela changerait le groupe de Lorentz).

Si nous appliquons deux symétries de suite, nous créons bien évidemment une nouvelle symétrie et on voit apparaître la structure de groupe.

L'effet général d'une transformation du groupe de Gallilée est du type :

$$\tau \begin{cases} x \rightarrow x' = Rx + vt + a \\ t \rightarrow t' = t + s \end{cases}$$

où  $x \in \mathbb{R}^3, R \in SO(3), v \in \mathbb{R}^3, a \in \mathbb{R}^3, s \in \mathbb{R}$  et on écrit  $\tau(R, a, v, s)$ .

**Remarque 1 :** seule la translation en temps nous sera utile pour démontrer l'équation de Schrödinger, mais la présentation plus générale du groupe de Gallilée pourra éclairer le fond du raisonnement.

De la même façon qu'en mécanique classique, les lois de la physique quantique non relativiste se doivent d'être invariante par ces transformations. Comme nous l'avons vu précédemment, une famille d'opérateurs unitaires à un paramètre peut décrire une transformation de référentiel. Du coup, nous représenterons les transformations du groupe de Gallilée en physique quantique grâce aux produits :

$$U(\tau) = \prod_{\mu=1}^{10} e^{iK_{\mu}s_{\mu}}$$

où  $\mu = 1, \dots, 10$  défini les 10 composantes (3 rotations, 3 translations d'espace, 3 déplacements à accélération nulle, 1 translation en temps) de la transformation  $\tau$  et  $\forall \mu, K_{\mu}$  est hermitien : ce sont les *générateur du groupe galliléen*.

L'étude de ces générateurs pourrait nous permettre de comprendre l'évolution des variables dynamiques du système.

Ainsi nous avons la transformation :

$$\begin{cases} |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U(\tau) |\psi\rangle \\ A \rightarrow A' = U(\tau) A U(\tau)^{-1} \end{cases}$$

**Remarque 2 :** si  $\tau_1\tau_2 = \tau_3$  alors  $U(\tau_1)U(\tau_2) | \psi \rangle$  et  $U(\tau_3) | \psi \rangle$  doivent représenter le même état , donc doivent être égaux à un facteur de phase près :

$$U(\tau_1)U(\tau_2) | \psi \rangle = e^{i\omega(\tau_1,\tau_2)}U(\tau_3) | \psi \rangle, \forall | \psi \rangle$$

i.e

$$U(\tau_1)U(\tau_2) = e^{i\omega(\tau_1,\tau_2)}U(\tau_3),$$

où  $\omega(\tau_1, \tau_2)$  est réel.

On pourrait penser que  $\omega(\tau_1, \tau_2)$  dépend aussi de  $| \psi \rangle$  mais dans ce cas nous obtiendrions une transformation non linéaire et nous savons d'après le théorème de Wigner que seul un opérateur linéaire peut représenter une transformation continue.

La structure de groupe, fondée en mécanique classique, ne perdure donc malheureusement plus en physique quantique.

Nous opterons pour les notations suivantes :

<i>Transformation</i>	<i>Opérateur</i>
$x \rightarrow R_n(\theta)(x)$	$e^{-i\theta_n J_n}$
$x_n \rightarrow x_n + a_n$	$e^{-ia_n P_n}$
$x_n \rightarrow x_n + v_n t$	$e^{iv_n G_n}$
$t \rightarrow t + s$	$e^{isH}$

où  $n, n = 1, 2, 3$ , représente le  $n^{ime}$  axe coordonné.

Ainsi  $x_n \rightarrow x_n + a_n$  représente un déplacement suivant le  $n^{ime}$  axe,  $x \rightarrow R_n(\theta)(x)$  représente une rotation autour du  $n^{ime}$  axe, etc.

Les – sont artificiellement introduits pour des raisons pratiques.

Nous pourrions donc écrire les dix opérateurs  $\{-J_n, -P_n, G_n, H, n = 1, 2, 3\}$  à la place des  $\{K_\mu, \mu = 1..10\}$  au besoin.

### 3.3 Mise en place de l'équation de Schrödinger.

Définissons plus proprement l'opérateur position  $Q$  comme  $Q = (Q_1, Q_2, Q_3)$  tel que les valeurs propres des  $Q_i$  soient exactement les valeurs possibles pour les coordonnées du système :  $Q_i | x \rangle = x_i | x \rangle$ .

Pour rendre cette opérateur utilisable, nous allons supposer que les  $Q_i$  commutent entre eux et donc qu'ils possèdent un ensemble de vecteurs propres communs :

$$Q | x \rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} | x \rangle = x | x \rangle$$

Définissons maintenant l'opérateur vitesse  $V$  de la même manière que nous l'avons défini en physique classique :

$$\langle V \rangle_\psi = \frac{d}{dt} \langle Q \rangle_\psi$$

et plus précisément :

$$\langle V \rangle_\psi = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) Q | \psi \rangle + \langle \psi | Q \left( \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right).$$

La vitesse d'un système fait donc intervenir des dérivées de fonctions d'ondes, caractérisant l'évolution du système dans le temps.

L'introduction de la vitesse étant un prétexte au calcul de ces dérivées, voyons maintenant ce qu'il en est.

Remarquons qu'en écrivant la translation en temps  $t \rightarrow t' = t + s$ , c'est à dire la transformation :

$$| \psi(t) \rangle \rightarrow e^{isH} | \psi(t) \rangle = | \psi(t - s) \rangle,$$

en prenant  $t = s$  nous avons :

$$| \psi(t) \rangle = e^{-itH} | \psi(0) \rangle$$

puis en dérivant cette expression, il vient :

$$\frac{d}{dt} | \psi \rangle = -iH e^{-itH} | \psi(0) \rangle = -iH | \psi \rangle$$

Expérimentalement, si l'on cherche à rapporter  $H$  à l'énergie du système, l'expression de la fonction d'onde :

$$| \psi(t) \rangle = e^{-itH} | \psi(0) \rangle$$



nous donne  $H$  comme la « fréquence » de l'onde imaginaire associée au système (qu'elle soit une réalité physique ou juste un objet théorique transportant l'information d'un système).

Aussi la relation de Planck-Einstein,  $E = h\nu$ , que nous avons utilisé dans le cas d'un photon mais qui est applicable à toute particule se comportant comme une onde d'après De Broglie, nous amène à la relation :

$$\frac{\text{Energie}}{H} = \hbar.$$

Aussi, nous assimilerons désormais l'opérateur Hamiltonien à l'énergie du système :

$$H \rightarrow \frac{H}{\hbar}.$$

L'équation de mouvement s'écrit alors sous la forme annoncée (*l'équation de Schrödinger*) :

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = H | \psi \rangle .$$

On pourrait alors nous reprocher de n'avoir déterminé clairement l'opérateur hamiltonien. Nous savons déjà qu'il existe un opérateur  $H$ , générateur de la translation en temps qui vérifie l'équation précédente i.e qui intervient dans l'évolution en temps de la fonction d'onde. Ensuite, il est possible avec des raisonnements faisant intervenir les symétries de déterminer l'opérateur hamiltonien au cas par cas (système isolé, système à  $N$  particules, particules avec spin, ...). Cette argumentation est trop longue pour notre exposé et nous nous contenterons de ce résultat général.

**Remarque 1 :** cette équation est d'une importance fondamentale en physique quantique, puisqu'elle permet de prédire l'évolution d'un système. En ce sens, la nature probabiliste supposée du monde quantique n'est pas si imprévisible qu'on pourrait le croire : l'équation de Schrödinger impose un certain déterminisme aux variations probabilistes d'un système.

**Remarque 2 :** nous aurions pu déterminer plus précisément les opérateurs pour chaque variable dynamique à l'aide de raisonnements utilisant les symétries du groupe de Galilée.

Si nous ne pouvons développer plus au risque de trop déborder du sujet que nous nous sommes imposés, mais nous donnerons tout de même quelques résultats pour le plaisir de remarquer l'analogie avec la mécanique classique : même si le formalisme change, les variables dynamiques

que nous utilisons bénéficient des mêmes contributions.

$$\begin{aligned} J &= Q \times P \\ H &= \frac{P \cdot P}{2M} + E_0 \\ P &= MV \end{aligned}$$

où  $M$  et  $E_0$  sont des multiples de l'identité.

### Remerciements

J'aimerais remercier Julian Schwinger pour avoir pris le contrepied du mouvement pessimiste de la physique quantique. Tout comme lui, je pense que nous n'avons tout simplement pas le droit de croire en une physique quantique obscure au point d'empêcher fatalement l'homme d'en avoir une compréhension globale. Ensuite, les écrits de L. Ballentine m'ont surpris par leur clarté, leur concision. Je lui doit la démonstration de l'équation de Schrödinger dans les grandes lignes. J'ai apprécié l'approche très mathématique et philosophique du livre de Chris J. Isham ainsi que les écrits de F. Laloë qui m'ont beaucoup éclairés en des moments où j'en avais vraiment besoin. Enfin, je remercie vivement Janos Polonyi pour tout le temps qu'il m'a consacré, et de n'avoir cessé d'éveiller ma curiosité.

## Bibliographie :

- *Quantum mechanics, symbolism of atomic measurement* de Julian SCHWINGER
- *Quantum mechanics - A modern development* de L. BALLENTINE
- *Consistent quantum theory* de Robert B. GRIFFITHS
- *Lectures on quantum theory* de Chris J. ISHAM
- *Mécanique quantique I* de Messiah
- *Comprenons nous vraiment la physique quantique ?* de F. LALOË
- *Symétries en mécanique quantique* - notes de cours de DEA de F. LALOË
- *Introduction à la physique statistique et à la physique quantique* de F. HELEIN et T. LEVY
- *Les maths en tête - Analyse* de Xavier GOURDON
- Cours de Claude ASLANGUL (Licence et Maitrise) , Université Pierre et Marie Curie (Paris 6)
- Wikipédia (encyclopédie sur internet)