

Espace des états de position et opérateurs associés

Un neo-TeXnicien

18 février 2019

1 États de position

Comme nous venons de le voir dans les chapitres précédents, le formalisme quantique est fondé sur des principes plutôt intuitifs. Dans un référentiel donné, l'univers peut être décrit par un ordonnancement dans le temps d'une succession d'états instantanés. Par linéarité des lois physiques, l'ensemble des états possibles d'un système est un espace de Hilbert séparable, sur lequel tout opérateur hermitien est équivalent à une grandeur physique observable. L'évolution d'un système est linéaire et unitaire : deux états initiaux différents ne peuvent pas évoluer vers un même état final. Cette évolution étant continue, cela nous a permis de mettre en évidence un opérateur hermitien appelé Hamiltonien, qui engendre l'opérateur d'évolution et correspond à l'énergie du système. En déterminant les vecteurs et valeurs propres de l'Hamiltonien, il est alors possible de décrire l'évolution de n'importe quel état du système.

1.1 Espace géométrique et états de position

Il est temps d'entrer dans le monde physique à trois dimensions...
Choisissons un référentiel (\mathfrak{R}) et un repère de projection $(O, \vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$.
La position d'une particule est associée à une grandeur physique distance dans ce repère. Et si certains états auront une valeur bien définie de la position, l'ensemble des états possibles n'aura pas en général de valeur bien définie de la position. En mécanique quantique, il nous faudra renoncer à localiser précisément une particule dans l'espace.

1.2 États à position bien définie

La difficulté principale concernant l'opérateur position est que son spectre est constitué d'un continuum de valeurs. Ceci constitue un obstacle mathématique surmontable, mais qui va modifier le formalisme.

Prenons un cas simple à une dimension.

L'existence d'une base d'états hilbertienne est assurée dès que l'espace des états est séparable, c'est-à-dire qu'il contient une famille dénombrable dense.

Dans le cas où les états ayant une position bien définie sont dénombrables, l'opérateur position \hat{X} est défini par $\hat{X} | x_i \rangle = x_i | x_i \rangle$ où $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ est une base orthonormée d'états propres. Ainsi, un état quelconque est défini par une série convergente de la forme $|\Phi\rangle = \sum_1^\infty \alpha_i | x_i \rangle$ (qui est bien un état par complétude) et on retrouve toutes les propriétés obtenues jusqu'ici. Ainsi on a encore $\alpha_i = \langle x_i | \Phi \rangle$ par exemple, qui possède l'interprétation physique suivante : $\alpha_i(t)^2 = |\langle x_i(t) | \Phi \rangle|^2$ est la probabilité (à l'instant t) d'obtenir comme résultat de la mesure de la grandeur physique position la valeur α_i .

Dans le cas d'un continuum I de valeurs réelles possibles pour la position, un état quelconque sera défini à l'aide du continuum d'états propres $|x\rangle$ et d'une intégrale de la manière suivante : $|\Phi\rangle = \int_I \phi(x) |x\rangle dx$, expression dans laquelle ϕ désigne la **fonction d'onde**, qui joue le rôle des α_i du cas discret. Par analogie, on souhaiterait donc obtenir le résultat suivant : $\langle y | \Phi \rangle = \Phi(y)$.

Mais ces états bien définis existent-ils véritablement ?

1.3 Existence des états à position bien définie

Supposons que l'on puisse définir l'opérateur position par $\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle$ et prenons deux états propres $|x\rangle$ et $|y\rangle$. On doit bien entendu exiger que $\langle x | y \rangle = 0$ si $x \neq y$ et $\langle x | x \rangle = 1$ sinon.

Partant d'un état quelconque $|\Phi\rangle = \int_I \phi(x) |x\rangle dx$, on aura pour tout état $|y\rangle$: $\langle y | \Phi \rangle = \int_I \phi(x) \langle y | x \rangle dx = 0$, ce qui signifie que cet état est l'état nul, et qu'il ne permettrait aucune mesure de la position. En réalité cela tient au fait que $\langle y | x \rangle$ ne doit pas être une fonction, mais la distribution de Dirac $\delta(x - y)$ comme nous allons le voir maintenant.

1.4 Distributions

On évalue habituellement une fonction en calculant sa valeur en un point. Toutefois cette méthode fait jouer un rôle considérable aux irrégularités (discontinuités par exemple) de la fonction. L'idée sous-jacente à la théorie des distributions est qu'il existe un meilleur procédé d'évaluation : calculer une moyenne des valeurs de la fonction dans un domaine de plus en plus resserré autour du point d'étude.

En envisageant des moyennes pondérées, on est donc conduit à examiner des expressions de la forme $I_f(\varphi) = \int_{\mathbb{R}} f(x)\varphi(x) dx$ dans laquelle la fonction à évaluer $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ est une fonction localement intégrable et $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ est une fonction appelée « fonction test », indéfiniment dérivable et identiquement nulle en dehors d'un ensemble borné.

L'intégrale $I_f(\varphi)$ est un nombre réel qui dépend de façon linéaire et continue de φ . On voit donc que l'on peut associer à une fonction intégrable f une forme linéaire continue sur l'espace des fonctions test. Deux fonctions localement intégrables f et g qui donnent la même forme linéaire continue sont égales presque partout. Ce qui signifie qu'il revient au même de connaître f ou la forme linéaire d'évaluation des fonctions test associées.

Si T est une distribution et φ une fonction test de $\mathcal{D}(\Omega)$, le nombre $T(\varphi)$ est noté $\langle T, \varphi \rangle$.