# Lecture dirigée : Aspects mathématiques et physiques de la mécanique quantique

Matthieu Cornillault et Antoine Médoc
Encadrant : Quentin Chauleur

Avril 2020

Ce sujet s'appuie sur l'étude des premiers chapitres de l'ouvrage « Mathematical Concepts of Quantum Mechanics » de S. J. Gustafson et de I. M. Sigal [1]

**Résumé :** L'insuffisance de la description classique conduit au XX^e siècle au développement de la mécanique quantique en 1.1. On s'intéresse, dans ce rapport, à certains des outils mathématiques utiles dans ce cadre de la mécanique quantique et à leur manipulation dans des cas simples.

Dans la partie 1, on commence à présenter le formalisme mathématique utilisé dans la suite, notamment l'**équation de Schrödinger** en 1.3, et le problème de Cauchy associé, dont la résolution constitue notre problème central.

Dans la partie 2, on débute avec l'étude de la **conservation de la probabilité** pour ensuite donner des conditions suffisantes pour que l'opérateur de Schrödinger soit **auto-adjoint** en 2.2, critère essentiel pour montrer l'**existence** et l'**unicité de la solution** du problème de Cauchy à l'aide du théorème (2.7). On termine par la résolution explicite de ce problème dans le cas de la particule libre.

Dans la partie 3, on s'intéresse à la notion d'**observable**, qui fait le lien entre grandeurs physiques classiques comme la position et la quantité de mouvement en 3.1 et opérateurs auto-adjoints. On regarde ensuite la **conservation** de celles-ci en 3.3 et on mentionne enfin l'exemple du spin, propre à la mécanique quantique en 3.5.

Dans la partie 4, on introduit le **principe d'incertitude de Heisenberg** en 4.1 et un principe d'incertitude affiné en 4.4. On applique ce dernier à l'étude de la **stabilité des atomes** en 4.3.

En partie 5, on étudie le **spectre** de l'opérateur de Schrödinger 5.1 et on voit deux exemples non exhaustifs de spectres associés à deux types de potentiels en 5.2 en distinguant **spectre essentiel** et **spectre discret**.

Finalement, dans la partie 6, on donne quelques annexes utiles et des outils nous permettant de travailler avec des applications linéaires en **dimension infinie** en 6.1. On fait aussi une petite étude de leur spectre en 6.2 et on introduit la définition de leur exponentielle en 6.3. On y trouve également une définition de la **transformation de Fourier** adaptée à la mécanique quantique en 6.4. On se réfère à cette partie pour les définitions, notations et propriétés utilisées dès la partie 2.

# Table des matières

# 1 Introduction physique et mise en place du problème

## 1.1 Insuffisance de la description classique

La mécanique quantique est une branche de la physique théorique qui étudie les phénomènes qui ont lieu aux échelles atomique et subatomique. Elle s'est développée au XX$^{\text{e}}$ siècle afin de pallier à certaines lacunes de la physique dite classique (théories développées avant le XIX$^{\text{e}}$ siècle). Cette dernière n'arrive pas à expliquer l'existence de raies spectrales, le rayonnement du corps noir ou encore l'effet photo-électrique. C'est la résolution par M. PLANCK du problème du corps noir en 1901 qui marque le début de la mécanique quantique. Il a supposé que l'énergie à l'échelle atomique était quantifiée dans son expérience. A. EINSTEIN reprit cette idée de quantification pour expliquer l'effet photoélectrique en 1905.

On choisit ici de s'intéresser à la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER.

## 1.2 Fonction d'onde

DÉFINITION 1.1. Un *espace d'état*, à un instant $t$ donné, est l'espace de tous les états possibles d'une particule.

L'espace d'état d'une particule est l'espace de HILBERT suivant

$$\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) := \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x < \infty \right\},$$

muni du produit scalaire hermitien usuel $\langle\,.\,,\,.\,\rangle$ défini par

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x.$$

DÉFINITION 1.2. On appelle *fonction d'onde* une fonction $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ prenant en argument un couple $(x,t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ avec $x$ la position dans l'espace et $t$ le temps telle que

$$\forall t \in \mathbb{R},\ \psi(\,\cdot\,, t) \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3).$$

Elle permet de décrire l'état d'une particule : la probabilité que cette particule soit dans la région $\Omega \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^3)$ à l'instant $t$ est $\mathbb{P}(\Omega) = \int_\Omega |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$. Ceci requière la condition de normalisation

$$\forall t \in \mathbb{R},\ \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 1.$$

On dit alors que *la probabilité est conservée.*

Pour les besoins de certaines preuves dans les parties suivantes, on va introduire des notations plus commodes.

DÉFINITION 1.3. On définit $\mathcal{FO}$ par le $\mathbb{C}$-espace vectoriel suivant

$$\mathcal{FO} := \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid \forall t \in \mathbb{R},\ \psi(\,\cdot\,, t) \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \right\}$$

et, pour $\psi \in \mathcal{FO}$, l'application $\mathcal{I}(\psi)$ par

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \mathcal{I}(\psi)(t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x.$$

En particulier, si $\psi$ est une fonction d'onde alors $\psi \in \mathcal{FO}$ et pour tout $t \in \mathbb{R}$, $\mathcal{I}(\psi)(t) = 1$.

## 1.3 Équation de Schrödinger

En 1925, le physicien autrichien E. Schrödinger développe l'une des équations fondamentales de la mécanique quantique, celle-ci jouant le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique. Elle décrit le mouvement d'une particule massique non relativiste. Elle doit respecter trois propriétés :

1. Principe de *causalité* : L'état $\psi(\cdot, t_0)$ doit déterminer l'état $\psi(\cdot, t)$ pour $t > t_0$
2. Principe de *superposition* : Si $\psi(\cdot, t)$ et $\varphi(\cdot, t)$ décrivent deux évolutions d'états alors pour tous $\alpha$, $\beta$ dans $\mathbb{C}$, $\alpha\psi(\cdot, t) + \beta\varphi(\cdot, t)$ doit aussi décrire l'évolution d'un état.
3. Principe de *correspondance* : La mécanique quantique doit être « proche » de la mécanique classique.

Une fonction d'onde $\psi$ vérifie l'équation de Schrödinger, équation aux dérivées partielles linéaire, si, pour tout $(x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$,

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)} \tag{1.1}$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ désigne la constante de Planck réduite, $m$ est la masse de la particule dont $\psi$ est la fonction d'onde et $V$ est le potentiel auquel la particule est soumise.

▷ Exemples. On donne ici quelques exemples de potentiels

1. Particule libre : $V = 0$.
2. Marche de potentiel : $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si}\, x < 0 \\ V_0 & \text{si}\, x \geqslant 0 \end{cases}$ (défini sur $\mathbb{R}$).
3. Puits de potentiel infini : $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < a \\ \infty & \text{si } |x| \geqslant a \end{cases}$.
4. Oscillateur harmonique : $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2|x|^2$ où $m$ désigne la masse de la particule et $\omega$ est une pulsation, appelée « pulsation propre du système ». Ce potentiel quadratique peut être obtenu en première approximation d'un potentiel au voisinage d'un minimum (qui correspond à une position d'équilibre stable).
5. Potentiel de Coulomb : $V(x) = \frac{\alpha}{|x|}$ caractéristique de l'atome d'hydrogène.

Définition 1.4. On appelle *opérateur de Schrödinger* l'opérateur linéaire

$$\boxed{H := \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(x).}$$

Ainsi, l'équation (1.1) peut se réécrire

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi. \tag{1.2}$$

◇ Remarque. Dans la suite, on note $H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta$.

# 2 Résolution de l'équation de Schrödinger

Le but de cette partie est de montrer l'existence et l'unicité du problème de Cauchy suivant

$$\boxed{\left\{\begin{array}{c} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \\ \psi|_{t=0} = \psi_0 \end{array}\right. .} \tag{2.1}$$

## 2.1 Conservation de la probabilité

Dans cette sous-partie, on ne va pas considérer seulement les fonctions d'onde mais toutes les fonctions de $\mathcal{FO}$. De plus, pour $A$ un opérateur sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, on considère l'équation suivante d'inconnue $\psi \in \mathcal{FO}$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = A\psi. \tag{2.2}$$

Théorème 2.1. *$A$ est symétrique si et seulement si pour toute solution $\psi$ de (2.2), l'application $\mathcal{I}(\psi)$ est constante.*

*Preuve* Tout d'abord, supposons que $H$ symétrique. Soit $\psi$ solution de (2.2). On a pour $t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\mathcal{I}(\psi)}{\partial t}(t) &= \left\langle \frac{\partial\psi}{\partial t}(\,\cdot\,,t), \psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle + \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), \frac{\partial\psi}{\partial t}(\,\cdot\,,t) \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{i\hbar}A\psi(\,\cdot\,,t), \psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle + \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), \frac{1}{i\hbar}A\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left[\langle \psi(\,\cdot\,,t), A\psi(\,\cdot\,,t)\rangle - \langle A\psi(\,\cdot\,,t), \psi(\,\cdot\,,t)\rangle\right] = 0.
\end{aligned}$$

D'où, par connexité de $\mathbb{R}$, $\mathcal{I}(\psi)$ est constante.

Supposons maintenant que pour toute solution $\psi$ de (2.2), $\mathcal{I}(\psi)$ est constante. Donc

$$\forall\varphi \in \mathrm{D}(A),\quad \langle A\varphi, \varphi\rangle = \langle\varphi, A\varphi\rangle$$

(car on peut prendre $\varphi = \psi_0$). Soit $(\varphi,\psi) \in \mathrm{D}(A)^2$. On a

$$\begin{aligned}
\langle\varphi, A\psi\rangle &= \langle\varphi, A\varphi\rangle + \langle\varphi, A\psi - A\varphi\rangle \\
&= \langle\varphi, A\varphi\rangle + \langle\varphi - \psi, A\psi - A\varphi\rangle + \langle\psi, A\psi - A\phi\rangle \\
&= \langle\varphi, A\varphi\rangle + \langle\varphi - \psi, A(\psi - \varphi)\rangle + \langle\psi, A\psi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle \\
&= \langle A\varphi, \varphi\rangle - \langle A(\psi - \varphi), \psi - \varphi\rangle + \langle A\psi, \psi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle .
\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}
\langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle &= \langle A\varphi, \varphi\rangle - \langle A(\psi - \phi), \psi - \varphi\rangle + \langle A(\psi - \varphi), \psi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle \\
&= \langle A\varphi, \varphi\rangle + \langle A(\psi - \varphi, \cancel{\psi - \psi} + \varphi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle \\
&= \langle A(\cancel{\varphi} + \psi - \cancel{\varphi}, \varphi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle \\
&= \langle A\psi, \varphi\rangle - \langle\psi, A\varphi\rangle \\
&= \overline{\langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle}.
\end{aligned}$$

On en déduit

$$\forall(\varphi,\psi) \in \mathrm{D}(A)^2,\quad \langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle \in \mathbb{R}.$$

On cherche enfin à montrer que cette quantité est nulle. Soit $(\varphi,\psi) \in \mathrm{D}(A)^2$. On a $i\psi \in \mathrm{D}(A)$ donc $\langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle \in \mathbb{R}$ et $\langle\varphi, A(i\psi)\rangle - \langle A\varphi, i\psi\rangle \in \mathbb{R}$, ie $\langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle \in \mathbb{R}$ et $i(\langle\varphi, A(\psi)\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle) \in \mathbb{R}$ ie $\langle\varphi, A\psi\rangle - \langle A\varphi, \psi\rangle = 0$. On en déduit

$$\forall(\varphi,\psi) \in \mathrm{D}(A)^2,\quad \langle\varphi, A\psi\rangle = \langle A\varphi, \psi\rangle$$

c'est-à-dire A symétrique. $\square$

## 2.2 Conditions suffisantes pour que $H$ soit auto-adjoint

Le caractère auto-adjoint de l'opérateur de SCHRÖDINGER va être crucial pour la suite. On verra en dernière sous-partie que cette condition est nécessaire et suffisante pour avoir existence et unicité de la solution du problème de CAUCHY (2.1).

THÉORÈME 2.2. $H_0$ est un opérateur auto-adjoint hermitien sur $\mathrm{H}^2(\mathbb{R}^3)$.

*Preuve* En utilisant la continuité de la transformation de FOURIER, on montre que $H_0$ est fermé. Ainsi, d'après la proposition (6.10), il faut et il suffit de montrer que $H_0$ est symétrique et $\mathrm{Im}(H_0 \pm i\mathrm{Id}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Tout d'abord, comme $\mathcal{D}(\mathbb{R}^3) \subset \mathrm{D}(H_0) \subset \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et en utilisant la densité de $\mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$ dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, il suffit de montrer la symétrie pour $\psi$, $\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$. On considère $\psi$, $\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$.

$$\begin{aligned}\langle \Delta\psi, \varphi\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Delta\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_1^2\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_2^2\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_3^2\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

Donc par double intégration par parties par rapport à $x_1$ et comme $\varphi$ et $\psi$ sont à support compact, on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_1^2\psi}(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi}(x)\partial_1^2\varphi(x)\,\mathrm{d}x.$$

De même sur les deux autres intégrales. On obtient $\langle \Delta\psi, \varphi\rangle = \langle \psi, \Delta\varphi\rangle$, d'où la symétrie de $H_0$.

Ensuite, montrons que $\mathrm{Im}(H_0 + i\mathrm{Id}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. On montrera dans le même temps que $\mathrm{D}(H_0) \subset \mathrm{H}^2(\mathbb{R}^3)$. L'autre inclusion est immédiate du fait de la définition du Laplacien. Soit $f \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. On cherche donc à résoudre

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + i\psi = f$$

qui, en utilisant la transformation de FOURIER, est équivalent à $\left(\frac{|k|^2}{2m} + i\right)\hat{\psi}(k) = \hat{f}(k)$. D'une part, en passant au module dans cette expression, on observe que

$$\sqrt{1 + \left(\frac{|k|^2}{2m}\right)^2}\,|\psi(\hat{k})| = |\hat{f}(k)| \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3).$$

Donc par la proposition (6.25), $\psi \in \mathrm{H}^2(\mathbb{R}^3)$.
D'autre part, en utilisant la formule d'inversion de FOURIER, la fonction suivante convient

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{ik\cdot x/\hbar} \frac{\hat{f}(k)}{|k|^2 + i}\,\mathrm{d}k.$$

On fait de même pour montrer que $\mathrm{Im}(H_0 - i\mathrm{Id}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Enfin, montrons le caractère hermitien. Soit $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$. On a

$$\langle -\Delta\psi, \psi\rangle = -\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_1^2\psi}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x - \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_2^2\psi}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x - \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_3^2\psi}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x.$$

En intégrant par parties la première intégrale par rapport à $x_1$, comme $\psi$ est à support compact, on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_1^2\psi}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x = -\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\partial_1\psi}(x)\partial_1\psi(x)\,\mathrm{d}x = -\int_{\mathbb{R}^3} |\partial_1\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x.$$

En faisant de même sur les deux autres intégrales, on obtient

$$\langle -\Delta\psi, \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_1\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_2\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_3\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x \geqslant 0.$$

On conclut ensuite par densité. □

◇ Remarque. Les opérateurs de multiplication sont clairement fermés. Donc, $H$ est fermé.

Théorème 2.3. Si $V$ est une fonction potentielle réelle bornée alors $\mathrm{D}(H) = \mathrm{D}(H_0)$ et $H$ est auto-adjoint.

*Preuve* L'égalité des domaines est évidente car $V$ est borné. Le caractère symétrique de $H$ est évident car $H_0$ l'est et on rajoute une multiplication par $V(x)$ qui est aussi symétrique. Donc, il faut et il suffit de montrer que $\mathrm{Im}(H \pm i\mathrm{Id}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. D'après le premier point de la proposition (6.11), comme $H$ est symétrique, il suffit de montrer qu'il existe $\lambda$ non nul tel que pour tout $f \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, l'équation suivante a une solution

$$(H + i\lambda\mathrm{Id})\psi = f. \tag{2.3}$$

Par le deuxième point de la proposition (6.11), comme $H_0$ est auto-adjoint, pour tout $\lambda \in \mathbb{R}^*$, $H_0 + i\lambda\mathrm{Id}$ est inversible et $\|(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\| \leqslant |\lambda|^{-1}$. Donc l'équation (2.3) est équivalente à

$$\psi + F(\lambda)\psi = g$$

où $F(\lambda) = (H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}V(x)$ et $g = (H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}f$. Ainsi, pour $|\lambda| > \|V\|_\infty$, $\|F(\lambda)\| < 1$ et par la proposition (6.3), $\mathrm{Id} + F(\lambda)$ est inversible. Donc l'équation précédente est équivalente à, pour $|\lambda| > \|V\|_\infty$,

$$\psi = (\mathrm{Id} + F(\lambda))^{-1}g$$

ce qui conclut. □

Ce théorème ne s'applique que dans le cas des potentiels bornés. Cependant, dans le cas des potentiels non bornés, on peut étendre le théorème précédent en rajoutant une hypothèse sur la fonction potentielle :

Théorème 2.4. S'il existe $a < 1$ et $b \in \mathbb{R}$ tel que pour tout $\psi_0 \in \mathrm{D}(H_0)$

$$\|V(x)\psi\| \leqslant a\|H_0\psi\| + b\|\psi\|$$

alors $\mathrm{D}(H) = \mathrm{D}(H_0)$ et $H$ est auto-adjoint.

*Preuve* L'égalité des domaines vient directement de l'inégalité supposée. Pour le reste, cette preuve suit le même parcours que la preuve du théorème (2.3). Il suffit juste de montrer qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}^*$ tel que $\|(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}V(x)\| < 1$. Comme l'opérateur est une multiplication par $V(x)$, ceci est équivalent à montrer qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}^*$ tel que $\|V(x)(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\| < 1$.

Soit $\psi \in \mathrm{D}(H)$. Par hypothèse, on a

$$\|V(x)(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\| \leqslant a\|H_0(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\| + b\|(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\|.$$

Or

$$\begin{aligned}\|H_0\psi + i\lambda\psi\|^2 &= \|H_0\psi\|^2 + |\lambda|^2\|\psi\|^2 + 2\,\mathrm{Re}(\langle H_0\psi, i\lambda\psi\rangle) \\ &= \|H_0\psi\|^2 + |\lambda|^2\|\psi\|^2 \text{ car } \langle H_0\psi, \psi\rangle \geqslant 0 \text{ et } \lambda \in \mathbb{R}^* \\ &\geqslant \|H_0\psi\|^2.\end{aligned}$$

Donc $\|H_0(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\| \leqslant \|\psi\|$. De plus, $\|(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\| \leqslant |\lambda|^{-1}\|\psi\|$. Ainsi,

$$\|V(x)(H_0 + i\lambda\mathrm{Id})^{-1}\psi\| \leqslant (a + |\lambda|^{-1}b)\|\psi\|$$

Donc, comme $a < 1$, on peut choisir $\lambda$ tel que $a + |\lambda|^{-1}b < 1$, ce qui termine la preuve. □

▷ Exemple. Application au potentiel de Coulomb $V(x) = \frac{\alpha}{|x|}$.

On écrit $V = V_1 + V_2$ avec $V_1 = V\mathbb{1}_{[0,1]} \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et $V_2 = V\mathbb{1}_{]1,+\infty[} \in \mathrm{L}^\infty(\mathbb{R}^3)$. Soit $\psi \in \mathrm{D}(H)$. Tout d'abord $\|V_2(x)\psi\| \leqslant \|V_2\|_\infty \|\psi\|$. Ensuite, pour majorer $\|V_1(x)\psi\|$, il faut faire une étude spectrale assez longue de $H_0$ que l'on va admettre ici : on obtient que pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $\eta > 0$ tel que $\|V_2(x)\psi\| \leqslant \varepsilon\|\Delta\psi\| + \varepsilon\eta\|\psi\|$, ce qui conclut. [2]

Théorème 2.5. Si $V$ est une fonction cœrcive (c'est-à-dire $\|V(x)\| \to +\infty$ quand $|x| \to +\infty$), continue et positive sur $\mathbb{R}^3$ alors $H$ est un opérateur auto-adjoint.

*Preuve* On va également admettre ce théorème ici car la preuve est assez technique. Elle demande une étude poussée et des outils comme l'inégalité de Kato [2]. □

▷ Exemple. Application à l'oscillateur harmonique :

Le potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2|x|^2$ est bien positif, cœrcif et continu. Donc $H := \frac{\hbar}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m|x|^2$ est auto-adjoint.

## 2.3 Existence et unicité de la solution du problème de Cauchy

Définition 2.6. On dit que *la dynamique existe* si pour tout $\psi_0 \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, le problème de Cauchy (2.1) admet une unique solution.

Théorème 2.7. La dynamique existe si et seulement si $H$ est auto-adjoint.

Ce théorème est extrêmement important et constitue le cœur de notre problème. On ne montrera que l'implication réciproque, qui donne donc une condition suffisante d'existence d'une unique solution, conséquence immédiate du théorème suivant. On peut trouver l'implication directe dans [4].

Théorème 2.8. Si $H$ est un opérateur auto-adjoint alors il existe une unique famille $(U(t))_{t\in\mathbb{R}}$ d'opérateurs bornés ayant les propriétés suivantes :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1.\ \forall t \in \mathbb{R},\ i\hbar\dfrac{\partial U}{\partial t}(t) = HU(t) = U(t)H. \\ 2.\ U(0) = \mathrm{Id}. \\ 3.\ \forall (t,s) \in \mathbb{R}^2,\ U(t)U(s) = U(t+s). \\ 4.\ \forall t \in \mathbb{R},\ \|U(t)\psi\| = \|\psi\|. \end{array}}$$

Cette famille est donnée par, pour tout $t \in \mathbb{R}$, $U(t) := \exp(-itH/\hbar)$.

◇ Remarques.
— La famille d'opérateurs $(U(t))_{t\in\mathbb{R}}$ est appelée *propagateur* ou *opérateur d'évolution de l'équation de Schrödinger*.
— La propriété 3 est une propriété de groupe, la 4 une propriété d'isométrie. Ainsi, pour tout $t \in \mathbb{R}$, $U(t)$ est inversible et est même unitaire. La famille $(U(t))_{t\in\mathbb{R}}$ est un groupe unitaire à un paramètre généré par l'opérateur linéaire $-iH/\hbar$.
— Ce théorème nous donne bien l'implication qui nous intéresse. En effet, $\psi(t) = U(t)\psi_0$ est l'unique solution du problème de Cauchy (2.1) et conserve la probabilité. L'unicité provient de l'égalité suivante :

$$\forall t \in \mathbb{R},\quad \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_0(x)|^2 \,\mathrm{d}x.$$

En effet, si $\psi$ et $\varphi$ sont deux solutions de même condition initiale $\psi_0$ alors $\psi - \varphi$ est également solution de l'équation de Schrödinger et de condition initiale 0. Donc pour tout $t \in \mathbb{R}$, $\|\psi(\cdot\,,t) - \varphi(\cdot\,,t)\| = 0$ et $\psi = \varphi$.

*Preuve* Tout d'abord, supposons que $H$ est borné. Pour $t \in \mathbb{R}$, on pose $U(t) := \exp(-itH/\hbar)$. Comme $H$ est borné, on va utiliser le développement en série entière de $U(t)$

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-itH}{\hbar} \right)^n .$$

1. Soit $t \in \mathbb{R}$.
$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H \left( \frac{-itH}{\hbar} \right)^{n-1} = HU(t) = U(t)H$$
car on peut dériver sous le signe $\sum$ par convergence uniforme sur tout compact et $H$ commute avec $H^k$.
2. Clairement, $U(0) = \mathrm{Id}$
3. Soient $t, s \in \mathbb{R}$.
$$\begin{aligned} U(t)U(s) &= \left( \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \frac{-itH}{\hbar} \right)^k \right) \left( \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left( \frac{-isH}{\hbar} \right)^l \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k+l=n} \frac{1}{k!l!} \left( \frac{-itH}{\hbar} \right)^k \left( \frac{-isH}{\hbar} \right)^l \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{iH}{\hbar} \right)^n \sum_{k+l=n} \frac{t^k s^l}{k!l!} = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{iH}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} t^k s^{n-k} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{iH(t+s)}{\hbar} \right)^n = U(t+s). \end{aligned}$$
Le produit de Cauchy est bien définie car la famille indexée par $(k, l) \in \mathbb{N}^2$ est bien sommable.
4. Soient $t \in \mathbb{R}$ et $\psi \in \mathrm{D}(H)$. On a
$$\|U(t)\psi\|^2 = \langle U(t)\psi, U(t)\psi \rangle = \langle \psi, U(t)^* U(t)\psi \rangle .$$
Or comme H est auto-adjoint donc
$$U(t)^* = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \overline{\frac{-itH}{\hbar}} \right)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \frac{itH}{\hbar} \right)^k = U(-t).$$
D'où, d'après les deux énoncés précédents, $U(t)^* U(t) = \mathrm{Id}$. Ainsi, $\|U(t)\psi\| = \|\psi\|$.

On va maintenant revenir au cas général. D'après la proposition (6.20), il existe $(A_n)$ suite d'opérateurs auto-adjoints bornés telle que pour tous $\psi \in \mathrm{D}(H)$ et $t \in \mathbb{R}$, $A_n\psi \xrightarrow[n \to +\infty]{} H\psi$ et $\exp(-itA_n/\hbar)\psi \xrightarrow[n \to +\infty]{} \exp(-itH/\hbar)\psi$. On pose, pour $t \in \mathbb{R}$ et $n \in \mathbb{N}$, $U(t) := \exp(-itH/\hbar)$ et $U_n(t) := \exp(-itA_n/\hbar)$.

1. Soient $\psi_0$, $\varphi \in \mathrm{D}(H)$. Soit $n \in \mathbb{N}$. D'après ce qui précède, on sait que
$$\left\langle \varphi, i\hbar \frac{\partial U_n}{\partial t}(t)\psi_0 \right\rangle = \langle \varphi, A_n U_n(t)\psi_0 \rangle = \langle A_n\varphi, U_n(t)\psi_0 \rangle .$$
Or
   - $A_n\varphi \xrightarrow[n \to +\infty]{} H\varphi$,
   - Pour tout $t \in \mathbb{R}$, $U_n(t)\psi_0 \xrightarrow[n \to +\infty]{} U(t)\psi_0$,
   - Pour tous $t \in \mathbb{R}$ et $n \in \mathbb{N}$, $\|A_n\varphi U_n(t)\psi_0\| = \|A_n\varphi\psi_0\|$ par le point 4 dans le cas borné et la fonction $A_n\varphi\psi_0$ est intégrable sur $\mathbb{R}^3$ car $A_n\varphi$ et $\psi_0$ sont dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Donc par convergence dominée,

$$\langle A_n\varphi, U_n(t)\psi_0\rangle \xrightarrow[n\to+\infty]{} \langle H\varphi, U(t)\psi_0\rangle = \langle \varphi, HU(t)\psi_0\rangle \,.$$

De même,

$$\left\langle \varphi, i\hbar\frac{\partial U_n}{\partial t}(t)\psi_0\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \varphi, U_n(t)\psi_0\rangle$$

et

$$\langle \varphi, U_n(t)\psi_0\rangle \xrightarrow[n\to+\infty]{} \langle \varphi, U(t)\psi_0\rangle \,.$$

D'où

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \varphi, U(t)\psi_0\rangle = \left\langle \varphi, i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}(t)\psi_0\right\rangle = \langle \varphi, HU(t)\psi_0\rangle \,.$$

De plus, comme $\mathrm{D}(H)$ est dense dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, cette dernière égalité est valable pour tout $\varphi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Ainsi, on a

$$\forall t\in\mathbb{R},\ i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}(t) = HU(t).$$

De même, on obtient

$$\forall t\in\mathbb{R},\ i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}(t) = U(t)H.$$

2. Comme pour tout $n\in\mathbb{N}$ $U_n(0)=\mathrm{Id}$, pour tout $\psi_0\in\mathrm{D}(H)$, $U(0)\psi_0=\psi_0$ et $U(0)=\mathrm{Id}$.
3. Soient $\varphi$, $\psi\in\mathrm{D}(H)$ et $t,s\in\mathbb{R}$. On sait que pour tout $n\in\mathbb{N}$

$$\langle \psi, U_n(t+s)\varphi\rangle = \langle \psi, U_n(t)U_n(s)\varphi\rangle = \langle U_n(t)^*\psi, U_n(s)\varphi\rangle \,.$$

Or $U_n(t)^*\psi = U_n(-t)\psi \xrightarrow[n\to+\infty]{} U(-t)\psi = U(t)^*\psi$ par unicité de la limite. Donc, en utilisant le même genre d'argument que dans le point 1, on a $U(t+s)=U(t)U(s)$.
4. Soient $\psi\in\mathrm{D}(H)$ et $t\in\mathbb{R}$. On sait que pour tout $n\in\mathbb{N}$, $\|U_n(t)\psi\| = \|\psi\|$. Donc, en faisant tendre $n$ vers l'infini, on obtient $\|U(t)\psi\|=\|\psi\|$.

On a donc montré l'existence de cette famille. L'unicité provient du lemme suivant avec comme générateur $-iH/\hbar$. □

Lemme 2.9. Si $U(t)$ et $V(t)$ sont deux groupes de même générateur $A$ alors $U(t)=V(t)$. [3]

*Preuve* Soient $t\in\mathbb{R}$ et $\psi\in\mathrm{D}(A)$. On considère $f : x\in[0,1]\mapsto U(xt)V((1-x)t)\psi$. D'après ce qui précède, $f$ est dérivable sur $[0,1]$ et pour tout $x\in[0,1]$,

$$f'(x) = tAU(xt)V((1-x)t) - tAU(xt)V((1-x)t) = 0$$

Ainsi, $f$ est constante sur $[0,1]$ et $f(0)=f(1)$, c'est-à-dire $V(t)=U(t)$. □

## 2.4 Propagation libre

Nous terminons cette partie par la recherche des propagateurs libres $(U(t))_{t\in\mathbb{R}} = (e^{-iH_0t/\hbar})_{t\in\mathbb{R}}$, ie les propagateurs pour l'équation de Schrödinger en absence de potentiel $V$.

Ici, $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ est défini sur l'espace vectoriel $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Nous utiliserons dans cette partie la transformation de Fourier $\mathcal{F}$, outil défini dans la section 6.4 (on y rappelle également quelques propriétés de $\mathcal{F}$).

### 2.4.1 Calcul de l'opérateur

Soit $a \in \mathbb{C}^*$ tel que $\mathrm{Re}(a) \geqslant 0$. On considère la gaussienne $g : k \in \mathbb{R}^3 \mapsto e^{-a|k|^2/2} \in \mathbb{C}$ et l'opérateur $p = -i\hbar\nabla$. On a $g$ bornée donc, pour toute $\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$, $g\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. On peut donc définir l'opérateur $g(p)$ par (6.23). Soit $\psi_0 \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Pour tout $x \in \mathbb{R}^3$,

$$(g(p)\psi_0)(x) = (2\pi a\hbar^2)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{|x-y|^2}{2a\hbar^2}} \psi_0(y)\, \mathrm{d}y.$$

Or on a $|p|^2 = -\hbar^2\Delta$ donc l'égalité ci-dessus donne

$$\forall x \in \mathbb{R}^3,\ \left(e^{a\hbar^2\Delta/2}\psi_0\right)(x) = (2\pi a\hbar^2)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{|x-y|^2}{2a\hbar^2}} \psi_0(y)\, \mathrm{d}y.$$

Ainsi, pour $t \in \mathbb{R}_+^*$ et en prenant $a = \frac{it}{m\hbar}$, on a $a \in i\mathbb{R}^*$ et on déduit de l'égalité ci-dessus l'expression suivante, pour l'opérateur d'évolution de Schrödinger $e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$ avec $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ l'hamiltonien d'une particule libre :

$$\forall x \in \mathbb{R}^3,\ \left(e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\psi\right)(x) = \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}} \psi(y)\, \mathrm{d}y. \tag{2.4}$$

### 2.4.2 Domination des solutions de condition initiale intégrable

Un passage au module dans la relation (2.4) et l'inégalité triangulaire donnent, pour toute $\psi_0 \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathrm{L}^1(\mathbb{R}^3)$ et pour tous $x \in \mathbb{R}^3$ et $t > 0$

$$\left|\left(e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\psi_0\right)(x)\right| \leqslant \left(\frac{2\pi\hbar t}{m}\right)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_0(y)|\, \mathrm{d}y.$$

◇ Remarque. Le membre de droite tend vers 0 avec $t \to +\infty$. Physiquement, le paquet d'onde « s'écrase ».

### 2.4.3 Connexion entre la mécanique quantique et la mécanique classique

Une autre conséquence de l'expression (2.4) est une connexion possible entre l'évolution d'une particule donnée par l'équation de Schrödinger libre et celle donnée par la mécanique classique.

Soit $\psi_0 \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. En utilisant la relation $\forall x, y \in \mathbb{R}^3, |x-y|^2 = |x|^2 - 2x\cdot y + |y|^2$ et, en sortant de l'intégrale les constantes par rapport à $y$, on obtient pour tous $x \in \mathbb{R}^3$ et $t > 0$

$$\left(e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\psi_0\right)(x) = \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-3/2} e^{\frac{im|x|^2}{2\hbar t}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\left(\frac{mx}{t}\cdot y\right)/\hbar} \left(e^{\frac{im|y|^2}{2\hbar t}}\psi_0(y)\right) \mathrm{d}y.$$

Pour $t > 0$ et $x \in \mathbb{R}^3$, on reconnaît dans la relation ci-dessus la transformation de Fourier évaluée en $\frac{m}{t}x$ de la fonction $\psi_t : y \in \mathbb{R}^3 \mapsto e^{\frac{im|y|^2}{2\hbar t}}\psi_0(y) \in \mathbb{C}$ (on rappelle que la constante devant l'intégrale de la transformation de Fourier en dimension 3 est $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$) :

$$\left(e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\psi_0\right)(x) = \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} e^{\frac{im|x|^2}{2\hbar t}} \widehat{\psi_t}\left(\frac{m}{t}x\right). \tag{2.5}$$

◇ Remarque. On peut montrer que (on ne le fera pas ici) si $\widehat{\psi_0}(k)$ est localisée au voisinage de $p_0 \in \mathbb{R}^3$, pour $t > 0$ suffisamment grand, $\widehat{\psi_t}(k)$ est localisé au voisinage de ce même vecteur $p_0$.

Or $|\widehat{\psi}|^2$ donne la localisation de la quantité de mouvement dans $\mathbb{R}^3$ de la particule (cf remarque suivant la proposition (3.5)). Pour une telle quantité de mouvement $p_0$, le second membre de l'équation est localisé au voisinage de la position $x_0 = v_0 t$ où $v_0 = \frac{p_0}{m}$ c'est-à-dire au voisinage de la trajectoire classique d'une particule libre de quantité de mouvement $p_0$.

# 3 Observable

DÉFINITION 3.1. Une *observable* est l'équivalent en mécanique quantique d'une grandeur physique en mécanique classique comme la position, le moment, l'énergie, le spin... Mathématiquement, l'observable prend la forme d'un opérateur auto-adjoint sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

## 3.1 Position et quantité de mouvement

DÉFINITION 3.2. Pour $j \in \{1,2,3\}$, on définit deux opérateurs : $x_j$, la multiplication par la coordonnée $x_j$, et $p_j := -i\hbar\partial_j$. On notera par la suite $\nabla_j := \partial_j$. Ils correspondent respectivement à la *position* et à la *quantité de mouvement* selon la $j^e$ coordonnée.

PROPOSITION 3.3. Ces deux opérateurs sont auto-adjoints. De plus,

$$\mathrm{D}(x_j) = \{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \mid x_j\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)\} \text{ et } \mathrm{D}(p_j) = \{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \mid \nabla_j\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)\}.$$

*Preuve* Pour montrer le caractère auto-adjoint de ces deux opérateurs, on va utiliser la propriété (6.10). Ces deux opérateurs sont fermés (en utilisant la transformation de FOURIER pour $p_j$). Tout d'abord, $x_j$ est clairement symétrique car pour $\varphi, \psi \in \mathrm{D}(x_j)$,

$$\langle \varphi, x_j\psi\rangle = \int_{R^3} \varphi(x)x_j\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{R^3} x_j\varphi(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x = \langle x_j\varphi, \psi\rangle\,.$$

Et pour $\varphi, \psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$,

$$\begin{aligned}
\langle \varphi, p_j\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\varphi(x)}(-i)\hbar(\nabla_j\psi)(x)\,\mathrm{d}x \\
&= -i\hbar\left[\overline{\varphi(x)}\psi(x)\right]_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\nabla_j\varphi(x)}\psi(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{-i\hbar\nabla_j\varphi(x)}\psi(x)\,\mathrm{d}x = \langle p_j\varphi, \psi\rangle\,.
\end{aligned}$$

car $\psi$ et $\varphi$ sont à support compact. On conclut ensuite par densité de $\mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$ dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et par l'inclusion $\mathcal{D}(\mathbb{R}^3) \subset \mathrm{D}(p_j) \subset \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Ensuite, il faut montrer que $x_j + i\mathrm{Id}$ et $p_j + i\mathrm{Id}$ sont surjectives. Soit $\varphi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Pour le premier, cela revient à chercher $\psi \in \mathrm{D}(x_j)$ tel que $x_j\psi + i\psi = \varphi$. En passant au module au carré, on observe que $(x_j^2+1)|\psi|^2 \in \mathrm{L}^1(\mathbb{R}^3)$, ce qui conduit à $\mathrm{D}(x_j) = \{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \mid x_j\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)\}$ et comme $x_j \in \mathbb{R} \mapsto x_j + i$ ne s'annule pas, pour tout $x \in \mathbb{R}^3$,

$$\psi(x) = \frac{\varphi(x)}{x_j + i}.$$

Pour le second, cela revient à chercher $\psi \in \mathrm{D}(p_j)$ tel que $-i\hbar\nabla_j\psi + i\psi = \varphi$ donc on en déduit directement que $\mathrm{D}(p_j) = \{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \mid \nabla_j\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)\}$. De plus, en utilisant la transformation de FOURIER, on a $(k_j + i)\hat{\psi} = \hat{\varphi}$ et en passant à l'inverse de FOURIER, pour tout $x \in \mathbb{R}^3$,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}^3} e^{i\frac{k\cdot x}{\hbar}}\frac{\hat{\varphi}(k)}{k_j + i}\,\mathrm{d}k.$$

De même, on obtient $\mathrm{Im}(x_j - i\mathrm{Id}) = \mathrm{Im}(p_j - i\mathrm{Id}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$. □

◇ REMARQUES. Pour $A$ un opérateur linéaire et $\psi \in \mathrm{D}(A)$, on note $\langle A\rangle_\psi := \langle \psi, A\psi\rangle$ et correspond moralement à la valeur moyenne de $A$ si $\psi$ correspond à une mesure à densité.

Proposition 3.4. Soient $A$ une observable et $\psi$ solution de l'équation de Schrödinger. Pour tout $t \in \mathbb{R}$,

$$\frac{\mathrm{d}\,\langle A\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}}{\mathrm{d}t}(t) = \left\langle \frac{i}{\hbar}[H,A] \right\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}$$

où $[H,A] := HA - AH$ est le commutant de $H$ et de $A$.

*Preuve* Il suffit de calculer.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\,\langle A\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}}{\mathrm{d}t}(t) &= \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t}(\,\cdot\,,t), A\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle + \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), A\frac{\partial \psi}{\partial t}(\,\cdot\,,t) \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{i\hbar}H\psi(\,\cdot\,,t), A\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle + \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), \frac{1}{i\hbar}AH\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle \\
&= \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), \frac{i}{\hbar}HA\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle - \left\langle \psi(\,\cdot\,,t), \frac{i}{\hbar}AH\psi(\,\cdot\,,t) \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{i}{\hbar}[H,A] \right\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}.
\end{aligned}$$

□

A partir de cette relation, on peut en déduire deux autres qui ont des équivalents connus en mécanique classique.

Proposition 3.5. Soit $\psi$ solution de l'équation de Schrödinger.

$$\boxed{m\frac{\mathrm{d}\,\langle x_j\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}}{\mathrm{d}t} = \langle p_j\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)} \quad \text{et} \quad \frac{\mathrm{d}\,\langle p_j\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}}{\mathrm{d}t} = \langle -\nabla_j V(x)\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}\,.}$$

*Preuve* Il suffit de calculer $[H,x_j]$ et $[H,p_j]$. Soit $\psi$ solution de l'équation de Schrödinger. Tout d'abord,

$$\begin{aligned}
[H,x_j]\psi = Hx_j\psi - x_jH\psi &= \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta(x_j\psi) + \cancel{V(x)x_j\psi} - x_j\Delta\psi - \cancel{x_jV(x)\psi} \\
&= \frac{-\hbar^2}{m}\nabla_j\psi \quad \text{car} \quad \Delta(x_j\psi) = x_j\Delta\psi + 2\nabla_j\psi.
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\frac{i}{\hbar}[H,x_j] = -\frac{i\hbar}{m}\nabla_j = \frac{1}{m}p_j.$$

Ensuite,

$$\begin{aligned}
[H,p_j]\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}[\Delta,p_j]\psi + [V,p_j]\psi \\
&= -i\hbar V(x)\nabla_j\psi + i\hbar\nabla_j(V(x)\psi) \\
&= i\hbar\nabla_jV(x)\psi
\end{aligned}$$

car $\Delta$ et $\nabla_j$ commutent. On en déduit

$$\frac{i}{\hbar}[H,p_j] = -\nabla_jV(x).$$

□

◇ Remarque. Soit $\psi$ une solution de l'équation de Schrödinger. La valeur moyenne de $x_j$ à l'instant $t$ est donnée par $\langle x_j\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}$ et celle de $p_j$ par $\langle p_j\rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)}$ qui est égal à $\langle k_j\rangle_{\hat{\psi}(\,\cdot\,,t)}$. Ceci montre que $|\hat{\psi}|^2$ est une distribution de probabilité pour la quantité de mouvement.

## 3.2 Représentation de Heisenberg

Dans les parties précédentes, on utilisait la *représentation de Schrödinger*. Chronologiquement, la mécanique quantique a d'abord été formulée avec la *représentation de Heisenberg*, équivalente à la représentation de Schrödinger, que l'on définit maintenant.

Définition 3.6. Soit $A$ une observable. On définit

$$A(t) := e^{\frac{itH}{\hbar}} A e^{-\frac{itH}{\hbar}}.$$

Cette notation est très pratique et permet de condenser les formules précédentes. Soit $\psi$ solution de l'équation de Schrödinger de condition initiale $\psi_0$. Alors pour tout $t \in \mathbb{R}$, $\langle A \rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)} = \langle A(t) \rangle_{\psi_0}$. On en déduit l'équation de Heisenberg de l'évolution temporelle de l'observable $A$

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)].$$

En prenant $x$ et $p$ à la place de $A$, on obtient la forme équivalente des équations de la mécanique classique

$$\boxed{m\dot{x}_j(t) = p_j(t) \quad \text{et} \quad \dot{p}_j(t) = -\nabla_j V(x(t)).}$$

## 3.3 Lois de conservation

La conservation des grandeurs rencontrées, et notamment l'énergie, est un problème récurrent et fondamental en physique et nécessite que l'on s'y intéresse ici.

Définition 3.7. On dit qu'une observable $A$ (ou plus précisément la quantité physique représentée par cette observable) est *conservée* si sa moyenne est indépendante du temps pour n'importe quel état d'évolution, c'est-à-dire

$$\langle A \rangle_{\psi(\,\cdot\,,t)} = \langle A(t) \rangle_{\psi_0} = \langle A \rangle_{\psi_0}$$

où $\psi$ est solution de l'équation de Schrödinger de condition initiale $\psi_0$.

Ainsi, une observable $A$ est conservée si et seulement si $t \in \mathbb{R} \mapsto A(t)$ est constante, ce qui est équivalent à $[H, A] = 0$, c'est-à-dire $H$ et $A$ commutent.

Proposition 3.8. On peut regarder la conservation de quatre grandeurs physiques très importantes. Celles-ci proviennent de symétries du système quantique.

1. S'il y a *invariance par translation temporelle* (V indépendant de $t$) alors l'*énergie* est conservée (grandeur caractérisée par $H$)
2. S'il y a *invariance par translation spatiale* (V indépendant de $x$) alors la *quantité de mouvement* est conservée (grandeur caractérisée par $p = -i\hbar\nabla$)
3. S'il y a *invariance par rotation spatiale* (V invariant par rotation) alors le *moment cinétique* est conservée (grandeur caractérisée par $L := x \times p$)
4. S'il y a *invariance de jauge* (invariance de l'équation par la transformation $\psi \mapsto e^{i\alpha}\psi$) alors la *probabilité* (ou plutôt la *densité de probabilité*) est conservée (grandeur caractérisée par $\rho = |\psi|^2$)

On peut enfin montrer que chaque symétrie est associée à un groupe d'opérateurs unitaires (comme dans la résolution de l'équation de Schrödinger). Pour l'invariance de jauge ou par translation temporelle, ce groupe est à un paramètre et pour l'invariance par translation ou rotation spatiale, ce groupe est à trois paramètres du fait des dimensions de temps et d'espace.

## 3.4 Courant de probabilité

Définition 3.9. Soit $\psi$ une fonction d'onde. On définit le *courant de probabilité* $j(\psi)$ par

$$j(\psi) := \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}(\overline{\psi}\nabla\psi).$$

Proposition 3.10. Soit $\psi$ une fonction d'onde. $j(\psi)$ satisfait l'équation de continuité

$$\boxed{\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div}(j(\psi)) = 0.}$$

Cette équation traduit la conservation locale de la probabilité. Celle-ci est analogue à l'équation que l'on peut observer pour la conservation locale de la charge en électromagnétisme ou pour la conservation locale de la masse en mécanique des fluides.

*Preuve* Calculons

$$\begin{aligned}\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial\overline{\psi}\psi}{\partial t} &= \overline{\frac{1}{i\hbar}H\psi}\psi + \overline{\psi}\frac{1}{i\hbar}H\psi \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\Delta\overline{\psi}\psi + \cancel{\frac{i}{\hbar}V(x)\overline{\psi}\psi} + \frac{i\hbar}{2m}\overline{\psi}\Delta\psi - \cancel{\frac{i}{\hbar}V(x)\overline{\psi}\psi} \\ &= \frac{i\hbar}{2m}(-\Delta\overline{\psi}\psi + \overline{\psi}\Delta\psi)\end{aligned}$$

En observant que $-\Delta\overline{\psi}\psi + \overline{\psi}\Delta\psi = \operatorname{div}(\overline{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\overline{\psi})$, on en déduit alors le résultat. □

Enfin, si on écrit $\psi$ une fonction d'onde sous la forme $\psi = ae^{\frac{iS}{\hbar}}$ où $a$ et $S$ sont des fonctions à valeurs réelles ($S$ étant homogène à une énergie), dans la limite $\hbar \to 0$ (limite classique), on peut montrer que $j = \rho v$ où $\rho := a^2$ est la densité de probabilité et $v = \frac{\nabla S}{m}$ la vitesse de la particule. On obtient aussi, avec $\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = (\partial_t + v\cdot\nabla)v$ la dérivée particulaire, $m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\nabla V$.

## 3.5 Spin

En mécanique quantique, les particules possèdent des degrés de libertés supplémentaires qui n'apparaissent pas en mécanique quantique dont l'un d'entre eux est le *spin*. Expérimentalement, on peut scinder les particules en deux groupes : les *fermions*, particules de spin demi-entier, et les *bosons*, particules de spin entier. En particulier, les électrons, protons et neutrons sont des fermions de spin $\frac{1}{2}$ et les photons sont des bosons de spin 1.

L'espace des phases d'une particule de spin $r$ est $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^{2r+1})$. Les observables du spin $S_1$, $S_2$, $S_3$ vérifient la relation suivante :

$$[S_k, S_l] = i\hbar\varepsilon^{klm}S_m$$

où $\varepsilon^{klm}$ est le symbole de Levi-Civita qui peut prendre trois valeurs différentes : $-1$, 0 et 1. Il vaut 0 s'il y a deux indices égaux. Sinon, il vaut la signature de la permutation $(k\ l\ m)$.

Dans le cas $r = \frac{1}{2}$, on peut écrire $S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$ où $\sigma_1$, $\sigma_2$ et $\sigma_3$ sont les matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

De plus, $(i\sigma_j)_{j\in\{1,2,3\}}$ forme une base du groupe spécial linéaire complexe $SU(2)$. En notant $s = \pm\frac{1}{2}$ et, pour $\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^{2r+1})$, $\psi(x,s) = (\psi(x,\frac{1}{2}), \psi(x,-\frac{1}{2}))$, on obtient les relations suivantes :

$$S_1\psi(x,s) = \hbar|s|\psi(x,-s),\ S_2\psi(x,s) = -i\hbar s\psi(x,-s),\ S_3\psi(x,s) = \hbar s\psi(x,s).$$

# 4 Principe d'incertitude et stabilité

Le principe d'incertitude est fondamental en mécanique quantique. Il précise qu'il existe une limite fondamentale sur la précision en dessous de laquelle on ne peut pas mesurer deux quantités dites « complémentaires », comme la position et la quantité de mouvement ou l'énergie et le temps, contrairement à la mécanique classique. Ce principe a été énoncé pour la première fois pour la position et la quantité de mouvement en 1927 par le physicien allemand W. Heisenberg.

## 4.1 Principe d'incertitude de Heisenberg

Définition 4.1. Soit $\psi \in \mathrm{D}(x_j) \cap \mathrm{D}(p_j)$. Les écarts types de $x_j$ et de $p_j$ dans l'état $\psi$ sont respectivement

$$(\Delta x_j)^2 := \left\langle \left(x_j - \langle x_j \rangle_\psi\right)^2 \right\rangle_\psi \text{ et } (\Delta p_j)^2 := \left\langle \left(p_j - \langle p_j \rangle_\psi\right)^2 \right\rangle_\psi .$$

Théorème 4.2. *Principe d'incertitude de Heisenberg* : Pour tout $\psi \in \mathrm{D}(x_j) \cap \mathrm{D}(p_j)$,

$$\boxed{\Delta x_j \Delta p_j \geqslant \frac{\hbar}{2}.}$$

Lemme 4.3. Soient $A$, $B$ deux opérateurs auto-adjoints. Pour tout $\psi \in \mathrm{D}(A) \cap \mathrm{D}(B)$,

$$\langle i[A,B] \rangle_\psi = -2 \operatorname{Im} \langle A\psi, B\psi \rangle .$$

*Preuve*

$$\begin{aligned}
\langle i[A,B] \rangle_\psi &= \langle \psi, i(AB - BA)\psi \rangle \\
&= \langle \psi, iAB\psi \rangle - \langle \psi, iBA\psi \rangle = i(\langle A\psi, B\psi \rangle - \langle B\psi, A\psi \rangle) \\
&= i(\langle A\psi, B\psi \rangle - \overline{\langle A\psi, B\psi \rangle}) \\
&= -2 \operatorname{Im} \langle A\psi, B\psi \rangle .
\end{aligned}$$

□

*Preuve* Preuve du théorème (4.2)

Soit $\psi \in \mathrm{D}(x_j) \cap \mathrm{D}(p_j)$. Montrons tout d'abord que $\frac{i}{\hbar}[p_j, x_k]\psi = \delta_{jk}\psi$.

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}[p_j, x_k]\psi &= -i\hbar \nabla_j (x_k \psi) + i\hbar x_k \nabla_j \psi \\
&= -i\hbar \delta_{jk} \psi \cancel{- i\hbar x_k \nabla_j \psi} + \cancel{i\hbar x_k \nabla_j \psi} \\
&= -i\hbar \delta_{jk}.
\end{aligned}$$

D'où le résultat. Sans perte de généralité, on peut supposer que $\langle x_j \rangle_\psi = \langle p_j \rangle_\psi = 0$. Ainsi, comme $\|\psi\| = 1$, on a

$$\begin{aligned}
1 = \langle \mathrm{Id} \rangle_\psi = \left\langle \frac{i}{\hbar}[p_j, x_j] \right\rangle_\psi &= -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \langle p_j\psi, x_j\psi \rangle \\
&\leqslant \frac{2}{\hbar} | \langle p_j\psi, x_j\psi \rangle | \leqslant \|p_j\psi\| \|x_j\psi\| = \frac{2}{\hbar} (\Delta p_j)(\Delta x_j).
\end{aligned}$$

□

Regardons maintenant le cas d'égalité. On cherche donc les états qui minimisent le principe d'incertitude de HEISENBERG. D'après le calcul précédent, cela est équivalent à chercher $\psi$ telle que pour tout $j \in \{1,2,3\}$, $-\operatorname{Im}\langle p_j\psi, x_j\psi\rangle = \|p_j\psi\|\|x_j\psi\|$ ce qui est équivaut au fait que pour tout $j \in \{1,2,3\}$, il existe $\mu_j > 0$ tel que

$$p_j\psi = i\mu_j x_j\psi. \tag{4.1}$$

Cherchons $\psi$ à variables séparées c'est-à-dire pour tout $x \in \mathbb{R}^3$, $\psi(x) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$. En supposant que $\psi$ est non nul, on obtient alors que pour tout $j \in \{1,2,3\}$,

$$\frac{\mathrm{d}\psi_j}{\mathrm{d}x_j}(x_j) = -\frac{x_j\mu_j}{\hbar}\psi_j(x_j).$$

Ainsi, pour tout $j \in \{1,2,3\}$,

$$\psi_j(x_j) = C_j e^{-\frac{\mu_j x_j^2}{2\hbar}}.$$

Pour obtenir $C_j$, on utilise la condition de normalisation sur $\psi_j$ et on obtient $C_j = \left(\frac{2\mu_j}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$. Donc, en notant $\psi_\mu$ la fonction d'onde qui donne la condition d'égalité (4.1) pour tout $j \in \{1,2,3\}$,

$$\psi_\mu(x) = \left(\frac{8\mu_1\mu_2\mu_3}{(\pi\hbar)^3}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2\hbar}\sum_{j=1}^{3}\mu_j x_j^2\right).$$

De plus, en translatant cet état en coordonnée et en quantité de mouvement, on obtient tous les états $\psi_{y,q,\mu,\varphi}$ — centré en $y$ pour la position, en $q$ pour la quantité de mouvement, possédant une phase $\varphi$ et dépendant de $\mu$ comme précédemment — qui minimisent le principe d'incertitude, qu'on appelle *états cohérents*

$$\psi_{y,q,\mu,\varphi}(x) = \left(\frac{8\mu_1\mu_2\mu_3}{(\pi\hbar)^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{q\cdot x+\varphi}{\hbar}} \exp\left(\frac{1}{2\hbar}\sum_{j=1}^{3}\mu_j(x_j-y_j)^2\right).$$

On obtient tous ces états en translatant et en dilatant la gaussienne $\phi(x) = (\pi\hbar)^{-\frac{3}{4}}e^{-\frac{|x|^2}{2\hbar}}$ en appliquant l'opérateur $T_{yq} := e^{i\frac{q\cdot x - p\cdot y}{\hbar}}$ et en multipliant ensuite par $e^{i(q\cdot y+\varphi)}$. On peut montrer avec quelques lignes de calculs les résultats suivants

$$\langle\psi_{y,q,\mu,\varphi}, x_j\psi_{y,q,\mu,\varphi}\rangle = y_j, \qquad \langle\psi_{y,q,\mu,\varphi}, p_j\psi_{y,q,\mu,\varphi}\rangle = q_j,$$

$$\langle\psi_{y,q,\mu,\varphi}, (x_j-y_j)^2\psi_{y,q,\mu,\varphi}\rangle = \tfrac{\hbar}{2\mu_j}, \quad \langle\psi_{y,q,\mu,\varphi}, (p_j-q_j)^2\psi_{y,q,\mu,\varphi}\rangle = \tfrac{\hbar\mu_j}{2}.$$

## 4.2 Principe d'incertitude affiné

◇ REMARQUE. On rappelle que pour deux opérateurs $A$ et $B$, on écrit $A \geqslant 0$ si pour tout $\psi \in \mathrm{D}(A)$, $\langle\psi, A\psi\rangle \geqslant 0$ et $A \geqslant B$ si $A - B \geqslant 0$.

THÉORÈME 4.4. Sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$,

$$\boxed{-\Delta \geqslant \frac{1}{4|x|^2}.}$$

*Preuve* On va démontrer ce résultat en prenant $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$. On conclura ensuite par densité de $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ dans $\mathrm{D}(-\Delta) \cap \mathrm{D}(\frac{1}{|x|^2})$ et en prenant $d = 3$.

Soit $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ de norme 1. D'après le lemme et le calcul de la preuve du théorème (4.2),

$$\begin{aligned}\hbar d \| |x|^{-1}\psi\|^2 &= \left\langle \hbar d (|x|^{-2}\right\rangle_\psi = \left\langle |x|^{-1} \sum_{j=1}^d i[p_j, x_j] |x|^{-1} \right\rangle_\psi \\ &= \left\langle \sum_{j=1}^d i[|x|^{-1}p_j|x|^{-1}, x_j] \right\rangle_\psi = -2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d \left\langle |x|^{-1}p_j|x|^{-1}\psi, x_j\psi \right\rangle.\end{aligned}$$

Or $p_j|x|^{-1} = |x|^{-1}p_j + [p_j, |x|^{-1}]$, on rappelle que $|x| = (x_1^2 + \cdots + x_d^2)^{\frac{1}{2}}$ et

$$[p_j, |x|^{-1}]\psi = -i\hbar\nabla_j(|x|^{-1}\psi) + i\hbar|x|^{-1}\nabla_j\psi = i\hbar\frac{x_j}{|x|^3}\psi.$$

Donc

$$\begin{aligned}\hbar d\| |x|^{-1}\psi\|^2 &= -2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d \left\langle |x|^{-2}p_j\psi, x_j\psi \right\rangle - 2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d \left\langle |x|^{-1} i\hbar \frac{x_j}{|x|^3}\psi, x_j\psi \right\rangle \\ &= -2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d \left\langle p_j\psi, \frac{x_j}{|x|^2}\psi \right\rangle + 2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d i\hbar \left\langle \frac{x_j}{|x|^4}\psi, x_j\psi \right\rangle.\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} \sum_{j=1}^d i \left\langle \frac{x_j}{|x|^4}\psi, x_j\psi \right\rangle &= \operatorname{Im} i \sum_{j=1}^d \left\langle \frac{x_j}{|x|^2}\psi, \frac{x_j}{|x|^2}\psi \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^d \left\| \frac{x_j}{|x|^2}\psi \right\|^2 = \sum_{j=1}^d \int_{\mathbb{R}^3} \frac{x_j^2}{|x|^4} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|^2} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = \| |x|^{-1}\psi\|^2.\end{aligned}$$

Donc

$$\hbar(d-2)\| |x|^{-1}\psi\|^2 = -2 \operatorname{Im} \sum_{j=1}^d \left\langle p_j\psi, \frac{x_j}{|x|^2}\psi \right\rangle.$$

Or par l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$\left| \sum_{j=1}^d \left\langle p_j\psi, \frac{x_j}{|x|^2}\psi \right\rangle \right| \leqslant \sqrt{\sum_{j=1}^d \langle p_j\psi, p_j\psi \rangle} \sqrt{\sum_{j=1}^d \left\langle \frac{x_j}{|x|}\psi, \frac{x_j}{|x|}\psi \right\rangle} \leqslant \sqrt{\langle |p|^2 \rangle_\psi} \sqrt{\langle |x|^{-2} \rangle_\psi}.$$

en faisant un calcul similaire à ce qui précède. Ainsi, comme $|p|^2 = p_1^2 + \cdots p_d^2 = -\hbar^2\Delta$, $\hbar^2(d-2)^2 \langle |x|^{-2} \rangle_\psi \leqslant 4 \langle -\Delta \rangle_\psi$ et avec $d = 3$, on obtient le résultat. □

## 4.3 Application : stabilité des atomes

En mécanique classique, les atomes et les molécules ne sont pas stables : en effet, les électrons « orbitent » autour du noyau et donc selon la théorie classique, les électrons rayonnent, perdent de l'énergie et s'effondrent sur le noyau. La mécanique quantique permet de prouver que les atomes et les molécules sont stables, ce qui est exprimé par le fait que l'hamiltonien $H$ (et donc l'énergie) est minoré.

### 4.3.1 Cas de l'atome d'hydrogène

L'opérateur de SCHRÖDINGER qui agit sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ s'écrit dans ce cas

$$H_{hyd} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{|x|}$$

où $m$ est la masse de l'électron et $e$ est la charge réduite telle que $e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ avec $q_e$ la charge de l'électron et $\varepsilon_0$ la permittivité du vide. Ainsi, d'après le théorème (4.4), $H_{hyd} \geqslant \frac{\hbar^2}{8m|x|^2} - \frac{e^2}{|x|}$. En faisant une étude d'équivalent en 0 et en $+\infty$, on observe que le terme de droite admet un minimum atteint en $r_0$ et en dérivant, on obtient $r_0 = \frac{4me^2}{\hbar}$ (qui correspond à quatre fois le rayon de BOHR ou le rayon pour le nombre quantique $n = 2$) et

$$\boxed{H_{hyd} \geqslant -\frac{2me^4}{\hbar^2}.}$$

### 4.3.2 Cas général de l'atome ou de l'ion

On considère un atome ou un ion de numéro atomique $Z$ et possédant $N$ électrons. Ainsi, l'opérateur de SCHRÖDINGER qui agit sur $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ s'écrit

$$H_{at} = \sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{x_j} - \frac{e^2 Z}{|x_j|}\right) + \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}\frac{e^2}{|x_j - x_k|}$$

où $x_j$ est le vecteur de $\mathbb{R}^3$ qui correspond aux coordonnées de l'électron $j$. Le dernier terme correspond aux interactions de COULOMB répulsives électron-électron et le deuxième aux interactions de COULOMB attractives électron-noyau.

En omettant dans un premier temps que les électrons sont des fermions, on peut faire une minoration assez grossière

$$H_{at} \geqslant \sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{x_j} - \frac{e^2 Z}{|x_j|}\right).$$

Ainsi, de même que pour l'atome d'hydrogène,

$$H_{at} \geqslant -N\frac{2m(e^2Z)^2}{\hbar^2}.$$

◇ REMARQUE. Dans ce qui suit, les aspects théoriques sont abordés dans d'autres chapitres que ceux étudiés. On énonce cependant certains résultats car ils relèvent d'aspects importants de la mécanique quantique.

On peut améliorer cette minoration en considérant les électrons comme des fermions de spin $\frac{1}{2}$. On peut montrer, en faisant une étude spectrale plus poussée, que, dans le cas où $N$ est pair (le cas $N$ impair demande quelques modifications) l'énergie du niveau fondamental du système est donnée par $2\sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} E_j$ où $E_1$, ..., $E_{\frac{N}{2}}$ correspondent aux $\frac{N}{2}$ niveaux d'énergie le plus bas. D'où

$$\sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{x_j} - \frac{e^2 Z}{|x_j|}\right) \geqslant 2\sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} E_j$$

où les énergies $E_j$ sont de l'ordre de $-\frac{m(e^2Z)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{j^2}$. Il est assez difficile d'évaluer $2\sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} E_j$. Cela nécessite une étude poussée et des inégalités comme celle de LIEB-THIRRING, qui demande une étude spectrale approfondie de l'opérateur de SCHRÖDINGER.

# 5 Spectre et dynamique

## 5.1 Introduction et motivation

Pour une observable quantique $A$, on cherche les valeurs que A peut prendre pour les différents états du système. On utilisera ici l'annexe 6.1. Nous avons vu en remarque dans la partie 3.1 l'interprétation de $\langle \psi, A\psi \rangle$ comme valeur moyenne de l'observable $A$ dans l'état $\psi$ (interprétation validée par l'expérience). Celle-ci nous mène aux valeurs recherchées : il s'agit du spectre de l'opérateur $A$.

L'observable « la plus importante » est l'énergie, donc l'opérateur de Schrödinger $H$ d'un système. En effet, les valeurs propres de $H$ nous donnent les différents niveaux d'énergie atteignables par la particule.

Dans ce chapitre, on présentera quelques techniques non exhaustives pour déterminer le spectre d'un opérateur de Schrödinger (défini sur un espace vectoriel de dimension infinie), au travers des exemples des potentiels convergeant vers 0 pour $|x| \to +\infty$ et des potentiels cœrcifs.

▷ Exemples. Le potentiel de l'oscillateur harmonique $V : x \in \mathbb{R}^3 \mapsto \frac{1}{2}m\omega^2|x|^2$ est cœrcif.

Le potentiel nul est réel, continu et converge vers 0 en $+\infty$.

## 5.2 Spectre de l'opérateur de Schrödinger

Dans cette partie, nous cherchons à caractériser le spectre essentiel d'opérateurs auto-adjoints au travers de l'exemple des opérateurs de Schrödinger. Ici on aura $d \in \mathbb{N}^*$.

On commence par définir une notion importante pour la suite.

Définition 5.1. Soit $A$ un opérateur sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$. Une suite $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est appelée *suite d'étalement* pour $A$ et $\lambda \in \mathbb{C}$ si elle vérifie

1. $\forall n \in \mathbb{N}, \|\psi_n\| = 1$,
2. Pour tout ensemble borné $B \subset \mathbb{R}^d$, il existe $N \in \mathbb{N}$ tel que $\forall n \geqslant N, \operatorname{supp}(\psi_n) \cap B = \emptyset$,
3. $\|(A - \lambda \mathrm{Id})\psi_n\| \xrightarrow[n\to+\infty]{} 0$.

◇ Remarque. Une suite constante égale à $\psi$ vecteur propre de $A$ associé à $\lambda$ vérifie les hypothèses 1 et 3 des suites d'étalement pour $A$ et $\lambda$.

Cette notion trouve une application pour le résultat important suivant.

Théorème 5.2. (Admis) Si $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ est un opérateur de Schrödinger avec $V : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ un potentiel réel continu et minoré, on a

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \text{il existe une suite d'étalement pour } H \text{ et } \lambda\}.$$

On cherche à présent à décrire le spectre $\sigma(H)$ de l'opérateur de Schrödinger $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$. Nous avons vu des théorèmes permettant de montrer que $H$ est auto-adjoint pour différentes fonctions $V$ dans la partie 2.2.

Voyons un premier résultat dans le cas où le potentiel $V$ tend vers 0 en $+\infty$. On a vu dans le théorème (2.3) que $H$ est alors auto-adjoint.

Proposition 5.3. Soit $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ continu et tendant vers 0 en l'infini. On a $\sigma_{\text{ess}}(H) = \mathbb{R}_+^*$.

En particulier, $H$ ne peut avoir que des valeurs propres isolées négatives (qui pourraient posséder un point d'accumulation en 0).

*Preuve* Soit $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite d'étalement pour $H$ et $\lambda \in \mathbb{C}$. Par inégalité triangulaire,

$$\forall n \in \mathbb{N},\ \|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| - \|V\psi_n\| \leqslant \left\|\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \lambda\mathrm{Id}\right)\psi_n\right\| \leqslant \|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| + \|V\psi_n\|.$$

Montrons que $(\|V\psi_n\|)_{n\in\mathbb{N}}$ tend vers 0 en $n \to +\infty$.

Soit $\varepsilon > 0$. Comme $V$ tend vers 0 en l'infini, il existe $R > 0$ tel que pour tout $x \in \mathbb{R}^d \backslash B(0,R)$, $\|V(x)\| \leqslant \varepsilon$. Or par l'hypothèse 2 de la définition (5.1), il existe $N \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n \geqslant N, \mathrm{supp}(\psi_n) \cap B(0,R) = \emptyset$. Ainsi, pour $n \geqslant N$ et pour $x \in \mathbb{R}^d$, si $x \notin \mathrm{supp}(\psi_n)$ alors $(V\psi_n)(x) = 0$ et si $x \in \mathrm{supp}(\psi_n)$ alors $x \notin B(0,R)$ et $|V(x)| \leqslant \varepsilon$. Donc pour tout $n \geqslant N$,

$$\begin{aligned}
\|V\psi_n\| &= \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)\psi_n(x)|^2 \,\mathrm{d}x \\
&= \int_{\mathrm{supp}(\psi_n)} |V(x)|^2 \times |\psi_n(x)|^2 \,\mathrm{d}x \\
&\leqslant \varepsilon^2 \int_{\mathrm{supp}(\psi_n)} |\psi_n(x)|^2 \,\mathrm{d}x \\
&\leqslant \varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\psi_n(x)|^2 \,\mathrm{d}x \leqslant \varepsilon^2 \text{ car } \|\psi_n\| = 1.
\end{aligned}$$

On en déduit la convergence vers 0 de $(\|V\psi_n\|)_{n\in\mathbb{N}}$. Ainsi $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite d'étalement pour $-\frac{\hbar}{2m}\Delta$ par l'inégalité de début de preuve.

Soit $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite d'étalement pour $-\frac{\hbar}{2m}\Delta$ et $\lambda \in \mathbb{C}$. De même, par l'inégalité suivante également obtenue par inégalité triangulaire pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| - \|V\psi_n\| \leqslant \left\|\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \lambda\mathrm{Id}\right)\psi_n\right\| \leqslant \|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| + \|V\psi_n\|.$$

on montre que $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est d'étalement pour $H$ et $\lambda$. Ainsi $H$ et $-\frac{\hbar}{2m}\Delta$ ont les mêmes suites d'étalements.

Comme $V$ est continue et que $V(x) \xrightarrow[|x|; \to +\infty]{} 0$, elle est en particulier minorée. Donc, par le théorème (5.2), ces deux opérateurs ont le même spectre essentiel. Or $\sigma_{\mathrm{ess}}(-\Delta) = [0, +\infty[$ et, comme $\frac{\hbar}{2m} > 0$, $\sigma_{\mathrm{ess}}\left(-\frac{\hbar}{2m}\Delta\right) = \sigma_{\mathrm{ess}}(-\Delta)$. Ainsi $\sigma_{\mathrm{ess}}(H) = [0, +\infty[$. □

◇ Remarque. La borne inférieure 0 de $\sigma_{\mathrm{ess}}(H)$ est appelée *seuil d'ionisation* : au dessus de cette énergie, la particule n'est plus localisée et se déplace librement.
On voit ici un intérêt physique à distinguer $\sigma_{ess}(H)$ et $\sigma_H$).

La proposition suivante traite du cas des potentiels de norme divergente vers $+\infty$ avec $|x|$. On a vu avec le théorème (2.5) que $H$ est alors auto-adjoint.

Proposition 5.4. Soit $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}_+$ une fonction continue réelle positive et cœrcive sur $\mathbb{R}^d$. Le spectre $\sigma(H)$ est constituée de valeurs propres isolées (donc dénombrables), notées $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$. Cette famille de réels n'est pas bornée.

*Preuve* Sans perte de généralité, pour simplifier les notations, on peut supposer $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$. On a donc $H = -\Delta + V$. On détaillera dans cette preuve la vacuité du spectre essentiel de $H$.

Tout d'abord, montrons que $\sigma_{\mathrm{ess}}(H) = \emptyset$. Supposons qu'il existe $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(H)$. Il existe alors $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite d'étalement pour $H$ et $\lambda$. On a, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$\forall n \in \mathbb{N}, |\langle \psi_n, (H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\rangle| \leqslant \|\psi_n\| \|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| \leqslant \|(H-\lambda\mathrm{Id})\psi_n\| \xrightarrow[n\to+\infty]{} 0.$$

Or, dans la preuve du théorème (2.2), on a vu par intégration par parties successives qu'en dimension 3, pour $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$,

$$\langle \psi, -\Delta\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_1 \psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_2 \psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x + \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_3 \psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi|^2.$$

ce qui peut s'étendre à la dimension $d$ qui nous intéresse ici. On a donc

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}, \langle \psi_n, (H - \lambda \mathrm{Id})\psi_n \rangle &= \langle \psi_n, -\Delta \psi_n \rangle + \langle \psi_n, V\psi_n \rangle - \lambda \cancel{\|\psi_n\|} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi_n|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} V|\psi_n|^2 - \lambda \\ &\geqslant 0 + \left( \inf_{y \in \mathrm{supp}(\psi_n)} V(y) \right) \cancel{\|\psi_n\|} - \lambda \end{aligned}$$

Montrons que $\inf_{y \in \mathrm{supp}(\psi_n)} V(y) \xrightarrow[n \to +\infty]{} +\infty$.

Soit $M > 0$. Par cœrcivité de $V$, il existe $R > 0$ tel que pour tout $x \in \mathbb{R}^d \backslash B(0, R)$, $V(x) \geqslant M$. Or $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est d'étalement donc il existe $N \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n \geqslant N$, $\mathrm{supp}(\psi_n) \cap B(0, R) = \emptyset$. Donc pour tous $n \geqslant N$, $y \in \mathrm{supp}(\psi_n), V(y) \geqslant M$ c'est-à-dire pour tout $n \geqslant N$, $\inf_{y \in \mathrm{supp}(\psi_n)} V(y) \geqslant M$. On en déduit que $\inf_{y \in \mathrm{supp}(\psi_n)} V(y) \xrightarrow[n \to +\infty]{} +\infty$.

Finalement on a montré que

$$\langle \psi_n, (H - \lambda \mathrm{Id})\psi_n \rangle \xrightarrow[n \to +\infty]{} 0 \text{ et } \langle \psi_n, (H - \lambda \mathrm{Id})\psi_n \rangle \xrightarrow[n \to +\infty]{} +\infty$$

ce qui est absurde. On en déduit que $\sigma_{\mathrm{ess}}(H) = \emptyset$.

Il reste donc à montrer que $H$ admet une infinité de valeurs propres de multiplicité finie qui divergent vers $+\infty$. En supposant que $H$ n'admet qu'un nombre fini de telles valeurs propres $(\lambda_k)_{k \in [\![1,n]\!]}$ deux à deux distinctes, on peut définir

$$F = \mathrm{Ker}(H - \lambda_1 \mathrm{Id}) \bigoplus \mathrm{Ker}(H - \lambda_2 \mathrm{Id}) \bigoplus \cdots \bigoplus \mathrm{Ker}(H - \lambda_n \mathrm{Id}).$$

qui se trouve être de dimension finie (donc fermé) par hypothèse et, par le théorème du supplémentaire orthogonal dans un Hilbert, on a $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d) = F \bigoplus F^\perp$. Ainsi comme $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ est de dimension infinie, $F^\perp \neq \{0\}$ et il existe $f \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ non nulle et orthogonale à tous les vecteurs propres associés aux valeurs propres. On en déduit pour tout $z \in \mathbb{C}$ l'unicité dans $F^\perp$ de la solution de l'équation $(H - z\mathrm{Id})\psi_z = f$ d'inconnue $\psi_z$.
Or la proposition (6.11) nous donne l'inégalité $\|(H - z\mathrm{Id})^{-1} f\| \leqslant \frac{1}{|\mathrm{Im}(z)|}\|f\|$ pour $z \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z) \neq 0$. L'analyse complexe nous permet de conclure $(H - z\mathrm{Id})^{-1} f = 0$ ce qui est une contradiction. On ne détaille pas ici cette étape de la preuve.

Finalement, $\sigma(H)$ est constitué d'une infinité de valeurs propres isolées de multiplicité finie. Comme $\sigma(H)$ est fermé (propriété (6.14)), s'il est borné, il est compact dans $\mathbb{C}$ et, comme il est discret, il est alors fini (ce qui n'est pas le cas). Donc $\sigma(H)$ n'est pas borné. □

◇ Remarque. Il existe d'autres descriptions des spectres des opérateurs de Schrödinger associés par exemple à des potentiels continus sur un cube de $\mathbb{R}^3$ ou des potentiels avec certaines propriétés de périodicité. Nous ne les mentionnons pas ici.

# 6 Annexes

## 6.1 Quelques propriétés des opérateurs linéaires

Dans les trois sous-parties suivantes, $\mathcal{H}$ désigne un espace de Hilbert muni de la norme $\|\cdot\|$ et de la topologie induite par cette norme. On considère $A$ un opérateur linéaire sur $\mathcal{H}$.

Définition 6.1. Le *domaine de* $A$ est

$$\mathrm{D}(A) := \{\psi \in \mathcal{H} \,|\, A\psi \in \mathcal{H}\}.$$

Définition 6.2. On dit que $A$ est *borné* si

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\| < \infty.$$

Proposition 6.3. Si $A$ est un opérateur borné avec $\|A\| < 1$ alors $I_d + A$ admet un inverse borné.

*Preuve* On considère la série $\sum_{k\geqslant 0}(-A)^k$. Cette série est bien définie car $\|A\| < 1$ donc la série $\sum_{k=0}^{\infty} \|A\|^k$ converge dans $\mathbb{R}$. Ainsi, comme $\mathcal{H}$ est complet et que la série $\sum_{k\geqslant 0}(-A)^k$ converge absolument (car $\|\cdot\|$ est une norme d'algèbre), elle converge. Ainsi,

$$\forall n \in \mathbb{N},\ (\mathrm{Id} + A)\sum_{k=0}^{n}(-A)^k = \mathrm{Id} + (-1)^n A^n.$$

D'où,

$$(\mathrm{Id} + A)\sum_{k=0}^{\infty}(-A)^k = \lim_{n\to\infty}(\mathrm{Id} + A)\sum_{k=0}^{n}(-A)^k = \mathrm{Id}.$$

Par conséquent, $\mathrm{Id} + A$ est inversible et $\|(\mathrm{Id} + A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|}$. □

Corollaire 6.4. Si $A$ est un opérateur inversible et $B$ est un opérateur tels que $\|BA^{-1}\| < 1$ alors $A+B$, définie sur $\mathrm{D}(A+B) = \mathrm{D}(A)$, est un opérateur inversible. Ceci provient de l'égalité $A + B = (\mathrm{Id} + BA^{-1})A$.

Définition 6.5. On dit que $A$ est *fermé* si son graphe $\Gamma(A) := \{(x, Ax) \in \mathcal{H}\times\mathcal{H} \mid x \in \mathrm{D}(A)\}$ est fermé dans $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$. [2]

Définition 6.6. On dit que $A$ est *symétrique* si pour tous $\psi, \varphi \in \mathrm{D}(A)$,

$$\langle A\psi, \varphi\rangle = \langle \psi, A\varphi\rangle\,.$$

Proposition 6.7. Si $A$ est fermé et symétrique alors $\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id})$ est fermé. [2]

*Preuve* Soit $\varphi \in \overline{\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id})}$. Il existe $(\psi_n)$ suite de $\mathrm{D}(A)$ tel que

$$(A \pm i\mathrm{Id})\psi_n \xrightarrow[n\to+\infty]{} \varphi.$$

Or $A$ est symétrique donc pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}\|(A \pm i\mathrm{Id})\psi_n\|^2 &= \langle A\psi_n \pm i\psi_n, A\psi_n \pm i\psi_n\rangle \\ &= \|A\psi_n\|^2 + \|\psi_n\|^2 + \langle A\psi_n, \pm i\psi_n\rangle + \langle \pm i\psi_n, A\psi_n\rangle \\ &= \|A\psi_n\|^2 + \|\psi_n\|^2 \pm i(\cancel{\langle A\psi_n, \psi_n\rangle} - \cancel{\langle \psi_n, A\psi_n\rangle}) = \|A\psi_n\|^2 + \|\psi_n\|^2.\end{aligned}$$

Et $A$ est fermé donc il existe $\psi \in \mathcal{H}$ tel que $\psi_n \xrightarrow[n\,\to\,+\infty]{} \psi$ et $A\psi_n \xrightarrow[n\,\to\,+\infty]{} A\psi$ donc

$$\|(A \pm i\mathrm{Id})\psi_n\| \xrightarrow[n\,\to\,+\infty]{} \|(A \pm i\mathrm{Id})\psi\| \ \text{ et }\ (A \pm i\mathrm{Id})\psi_n \xrightarrow[n\,\to\,+\infty]{} (A \pm i\mathrm{Id})\psi.$$

D'où $(A \pm i\mathrm{Id})\psi_n \xrightarrow[n\,\to\,+\infty]{} (A \pm i\mathrm{Id})\psi$ et par unicité de la limite, $(A \pm i\mathrm{Id})\psi = \varphi$. □

Définition 6.8. L'*adjoint* de $A$ est l'opérateur $A^*$ défini par $\langle A^*\psi,\varphi\rangle = \langle \psi, A\varphi\rangle$ pour tous $\varphi \in \mathrm{D}(A)$ et $\psi$ dans le domaine

$$\mathrm{D}(A^*) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \exists C_\psi \in \mathbb{R}_+, \forall \varphi \in \mathrm{D}(A) \mid \langle \psi, A\varphi\rangle \mid \leqslant C_\psi \|\varphi\|\}\,.$$

◇ Remarque. Le théorème de Riesz assure l'existence et l'unicité de l'opérateur linéaire $A^*$.

Définition 6.9. On dit que $A$ est *auto-adjoint* si $A = A^*$, c'est-à-dire si $A$ est symétrique et $\mathrm{D}(A^*) = \mathrm{D}(A)$.

Proposition 6.10. Si $A$ est un opérateur fermé alors les deux propositions suivantes sont équivalentes : [2]

1. A est auto-adjoint
2. A est symétrique et $\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id}) = \mathcal{H}$.

*Preuve* Tout d'abord, si $A$ est auto-adjoint alors $\mathrm{D}(A^*) = \mathrm{D}(A)$ et $A$ est symétrique. Montrons que $A \pm iId$ est surjective. Comme $A$ est auto-adjoint, par la proposition (6.15), les valeurs propres de $A$ sont réelles. Donc $\mathrm{Ker}(A \pm i\mathrm{Id}) = \{0\}$ et $\overline{\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id})} = \mathcal{H}$ par un corollaire du théorème du supplémentaire orthogonal. Or par la proposition (6.7), $\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id})$ est fermé. Donc $\mathrm{Im}(A \pm i\mathrm{Id}) = \mathcal{H}$.

Réciproquement, supposons que $A$ est symétrique et $A \pm i\mathrm{Id}$ est surjective, il suffit de démontrer que $\mathrm{D}(A^*) = \mathrm{D}(A)$ . Comme $A$ est symétrique, $\mathrm{D}(A) \subset \mathrm{D}(A^*)$. Soit $\psi \in \mathrm{D}(A^*)$. On pose $\varphi = (A^* + i\mathrm{Id})\psi$. Par hypothèse, il existe $\psi' \in \mathrm{D}(A)$ tel que $\varphi = (A + i\mathrm{Id})\psi'$. De plus, comme $A$ est symétrique, $A\psi' = A^*\psi'$. Donc $(A^*+i\mathrm{Id})\psi = (A^*+i\mathrm{Id})\psi'$ et $(A^*+i\mathrm{Id})(\psi-\psi') = 0$. Or $\mathrm{Ker}(A + i\mathrm{Id}) = (\mathrm{Im}(A^* - i\mathrm{Id}))^\perp = \{0\}$. Donc $\psi = \psi' \in \mathrm{D}(A)$. □

Proposition 6.11. Si $A$ est symétrique et s'il existe $z \in \mathbb{C}$ avec $\mathrm{Im}(z) > 0$ tel que $A - zId$ est surjective alors pour tout $z \in \mathbb{C}$ avec $\mathrm{Im}(z) > 0$, $A - zId$ est surjective. De même avec $\mathrm{Im}(z) < 0$.

De plus, si $A$ est auto-adjoint alors pour tout $z \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z) \neq 0$, $A - z\mathrm{Id}$ est inversible. Dans les deux cas, $\|(A - z\mathrm{Id})^{-1}\| \leqslant \frac{1}{|\,\mathrm{Im}(z)|}$.

*Preuve* On suppose tout d'abord $A$ symétrique. Soit $z \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z) > 0$ tel que $A - zId$ est surjective. On écrit $z = x + iy$. Pour $u \in \mathcal{H}$, on a

$$\begin{aligned}
\|(A - z\mathrm{Id})u\|^2 &= \langle (A - z\mathrm{Id})u, (A - z\mathrm{Id})u\rangle \\
&= \|(A - x\mathrm{Id})u\|^2 + \langle (A - x\mathrm{Id})u, -iyu\rangle + \langle -iyu, (A - x\mathrm{Id})u\rangle + \|yu\|^2 \\
&= \|(A - x\mathrm{Id})u\|^2 - iy\,\langle (A - x\mathrm{Id})u, u\rangle + iy\,\langle u, (A - x\mathrm{Id})u\rangle + \|yu\|^2 \\
&= \|(A - x\mathrm{Id})u\|^2 + \|yu\|^2 \text{ car A est symétrique} \\
&\geqslant |y|^2\|u\|^2.
\end{aligned}$$

D'où, $\mathrm{Ker}(A - z\mathrm{Id}) = 0$. Or, comme $A - z\mathrm{Id}$ est surjective, $A - z\mathrm{Id}$ est inversible. De plus, d'après ce qui précède, pour $u \in \mathcal{H}$, $\|(A - z\mathrm{Id})^{-1}u\| \leqslant \frac{1}{|\,\mathrm{Im}(z)|}\|u\|$ ce qui donne

$$\|(A - z\mathrm{Id})^{-1}\| \leqslant \frac{1}{|\,\mathrm{Im}(z)|}.$$

Soit $z' \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z') > 0$. Avec le corollaire de la proposition (6.3), si $|z - z'| < |\,\mathrm{Im}(z)|$, $A - z'\mathrm{Id} = A - z\mathrm{Id} + (z - z')\mathrm{Id}$ est inversible. En raisonnant de proche en proche, on obtient l'inversibilité de $A - z\mathrm{Id}$ pour tout $z \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z) > 0$. On procède de même pour $\mathrm{Im}(z) < 0$.

De plus, si $A$ est auto-adjoint, par la proposition (6.10), comme $A \pm i\mathrm{Id}$ est surjective, pour tout $z \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Im}(z) \neq 0$, $A - z\mathrm{Id}$ est inversible et on obtient de même l'inégalité voulue. □

Proposition 6.12. Si $A$ est symétrique et borné alors $A$ est auto-adjoint.

*Preuve* Par les propositions (6.10) et (6.11), il suffit de montrer qu'il existe $\lambda > 0$ tel $A - i\lambda\mathrm{Id}$ soit surjective. Soit $\varphi \in \mathcal{H}$. Il faut donc trouver $\lambda > 0$ indépendant de $\varphi$ et $\psi \in \mathrm{D}(A)$ tels que $(A + i\lambda\mathrm{Id})\psi = \varphi$. Ceci est équivalent à $(\mathrm{Id} + (i\lambda)^{-1}A)\psi = (i\lambda)^{-1}\varphi$. En prenant $\lambda > \|A\|$, on obtient que $\mathrm{Id} + (i\lambda)^{-1}A$ est inversible par la proposition (6.3), ce qui conclut. □

## 6.2 Spectre d'un opérateur

Définition 6.13. Le *spectre* d'un opérateur $A$ sur un Hilbert $\mathcal{H}$ est l'ensemble défini par

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid A - \lambda\mathrm{Id} \text{ n'admet pas d'inverse borné}\}$$

et son ensemble résolu est le complémentaire de son spectre dans $C$ noté $\rho(A) = C\backslash\sigma(A)$. Pour $\lambda \in \rho(A)$, l'opérateur $(A - \lambda\mathrm{Id})^{-1}$ est bien défini et borné.

On commence par donner deux résultats importants à propos du spectre.

Proposition 6.14. Le spectre $\sigma(A)$ est fermé dans $\mathbb{C}$.

Proposition 6.15. Si $A$ est auto-adjoint alors les valeurs propres de $A$ sont réelles.

*Preuve* Soit $\lambda \in \mathrm{Sp}(A)$. Il existe $x$ non nul tel que $Ax = \lambda x$. Or

$$\langle Ax, x\rangle = \overline{\lambda}\|x\|^2 \text{ et } \langle x, Ax\rangle = \lambda\|x\|^2 \text{ et } \langle Ax, x\rangle = \langle x, Ax\rangle \text{ car } A = A^*.$$

Ainsi, $\lambda = \overline{\lambda}$ et $\lambda \in \mathbb{R}$. □

Une raison suffisante pour que $A - \lambda\mathrm{Id}$ avec $\lambda \in \mathbb{C}$ ne soit pas inversible est l'existence d'un vecteur non nul dans son noyau. On donne ainsi les définitions commodes suivantes :

Définition 6.16. S'il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ et $\psi \in \mathcal{H}\backslash\{0\}$ tels que $(A - \lambda\mathrm{Id})\psi = 0$ on a $\lambda \in \sigma(A)$ et on appelle $\lambda$ *valeur propre* de $A$ et $\psi$ *vecteur propre* de $A$.

On définit la *multiplicité* d'une valeur propre $\lambda$ par la dimension du sous-espace vectoriel $\mathrm{Ker}(A - \lambda\mathrm{Id})$ appelé *sous-espace propre* associé à $\lambda$.

◇ Remarque. On peut ici avoir une valeur propre de multiplicité infinie, contrairement au cas des opérateurs agissant sur des espaces de dimension finie.

Dans le spectre de $A$, on distinguera les valeurs isolées des autres.

Définition 6.17. On appelle *spectre discret* de $A$ l'ensemble

$$\sigma_d(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \text{ est une valeur propre isolée de } A \text{ de multiplicité finie}\} \subset \sigma(A)$$

où $\lambda \in \sigma(A)$ est dite isolée s'il existe un voisinage $\mathcal{V}$ de $\lambda$ dans $\mathbb{C}$ tel que $\mathcal{V} \cap \sigma(A) = \emptyset$. On appelle *spectre essentiel* de $A$ son complémentaire dans $\sigma(A)$ noté $\sigma_{\mathrm{ess}}(A) = \sigma(A)\backslash\sigma_d(A)$.

◇ Remarque. On pourra trouver dans d'autres références le vocabulaire *spectre ponctuel* pour spectre discret et *spectre continu* pour spectre essentiel.

▷ Exemple. Donnons des exemples de spectres essentiels d'opérateurs connus sur $\mathbb{R}^d$, sans démonstration.

1. Pour $j \in [\![1, d]\!]$, $\sigma_{\mathrm{ess}}(p_j) = \sigma(p_j) = \mathbb{R}$.
2. Pour $j \in [\![1, d]\!]$, $\sigma_{\mathrm{ess}}(x_j) = \sigma(x_j) = \mathbb{R}$.
3. $\sigma_{\mathrm{ess}}(-\Delta) = \sigma(-\Delta) = \mathbb{R}_+$.

## 6.3 Exponentielle d'opérateur

Nous allons définir $\exp(iA)$ dans le cas où $A$ est un opérateur auto-adjoint non borné, en approchant $A$ par une suite d'opérateurs bornés.

Tout d'abord, si $A$ est borné, la série $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}$ converge absolument car la norme d'opérateur est une norme d'algèbre. Ainsi, on définit

$$\exp A = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}.$$

Considérons maintenant le cas des opérateurs non bornés. Soit $A$ un opérateur auto-adjoint non borné.

Définition 6.18. Soit $n \in N$. On pose

$$A_n := \frac{1}{2}n^2\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} + (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right).$$

$A_n$ est bien définie et est borné par la proposition (6.11). De plus, comme $A_n$ est symétrique, $A_n$ est auto-adjoint par (6.12).

Proposition 6.19. Pour tout $\psi \in \mathrm{D}(A)$, $A_n\psi \xrightarrow[n\to+\infty]{} A\psi$.

*Preuve* Soit $n \in \mathbb{N}$. On considère

$$B_n = \frac{1}{2}in\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} - (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right).$$

Montrons que $B_nA = A_n$ et $\mathrm{Id} - B_n = \frac{1}{2}\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} + (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right)A$. Tout d'abord,

$$\begin{aligned}(A+in\mathrm{Id})B_n(A-in\mathrm{Id}) &= \frac{1}{2}in(A+in\mathrm{Id})\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} - (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right)(A-in\mathrm{Id})\\ &= \frac{1}{2}in\left((A-in\mathrm{Id}) - (A+in\mathrm{Id})\right) = n^2\mathrm{Id}.\end{aligned}$$

Donc

$$B_n(A-in\mathrm{Id}) = (A+in\mathrm{Id})^{-1}n^2\mathrm{Id} \text{ ie } B_nA - inB_n = n^2(A+in\mathrm{Id})^{-1}.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}B_nA &= n^2\left(A+in\mathrm{Id}\right)^{-1} + in\left(\frac{1}{2}in\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} - (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right)\right)\\ &= \frac{1}{2}n^2\left(2(A+in\mathrm{Id})^{-1} - (A+in\mathrm{Id})^{-1} + (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right) = A_n.\end{aligned}$$

Ensuite, comme $A$ commute avec $A+in\mathrm{Id}$ et avec $A-in\mathrm{Id}$,

$$\begin{aligned}\beta &= (A+in\mathrm{Id})\frac{1}{2}\left((A+in\mathrm{Id})^{-1} + (A-in\mathrm{Id})^{-1}\right)A(A-in\mathrm{Id})\\ &= \frac{1}{2}\left((A-in\mathrm{Id}) + (A+in\mathrm{Id})\right)A = A^2.\end{aligned}$$

Et

$$\begin{aligned}\gamma &= (A+in\mathrm{Id})(\mathrm{Id}-B_n)(A-in\mathrm{Id})\\ &= A^2 + n^2\mathrm{Id} - (A+in\mathrm{Id})B_n(A-in\mathrm{Id})\\ &= A^2 + n^2\mathrm{Id} - n^2\mathrm{Id} = A^2.\end{aligned}$$

D'où $\gamma = \beta$ et en simplifiant, on a

$$\mathrm{Id} - B_n = \frac{1}{2}\left((A + in\mathrm{Id})^{-1} + (A - in\mathrm{Id})^{-1}\right) A.$$

Ainsi, par la proposition (6.11), pour tout $\varphi \in \mathrm{D}(A)$,

$$\begin{aligned}\|(\mathrm{Id} - B_n)\varphi\| &= \left\|\frac{1}{2}\left((A + in\mathrm{Id})^{-1} + (A - in\mathrm{Id})^{-1}\right) A\varphi\right\| \\ &\leqslant \frac{1}{n}\|A\varphi\| \xrightarrow[n \to +\infty]{} 0.\end{aligned}$$

Donc, en supposant que $\mathrm{D}(A)$ soit dense dans $\mathcal{H}$ ce qui est le cas pour l'opérateur de Schrödinger et comme $\|B_n\| \leqslant 1$, on obtient que pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$, $B_n\varphi \xrightarrow[n \to +\infty]{} \varphi$. En prenant $\varphi = A\psi$, on obtient que pour tout $\psi \in \mathrm{D}(A)$, $A_n\psi \xrightarrow[n \to +\infty]{} A\psi$ ce qui conclut. □

Ainsi, comme $A_n$ est borné, on peut définir $\exp(iA_n)$ par la somme de série. En faisant tendre $n$ vers l'infini, on va pouvoir définir $\exp(iA)$.

Définition-proposition 6.20. On définit $\exp(iA)$ par, pour tout $\psi \in \mathrm{D}(A)$,

$$\exp(iA)\psi := \lim_{n \to +\infty} \exp(iA_n)\psi.$$

*Preuve* Soit $\psi \in \mathrm{D}(A)$. On va montrer que la famille $(\exp(iA_n)_{n\in\mathbb{N}})$ est une famille de Cauchy. Soient $m, n \in \mathbb{N}$. On écrit

$$\exp(iA_m) - \exp(iA_n) = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\exp(isA_m)\exp(i(1-s)A_n)\right)\mathrm{d}s.$$

Comme l'opérateur $A_n$ est borné,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\exp(isA_m)\exp(i(1-s)A_n)\right) = \exp(isA_m)\exp(i(1-s)A_n)i(A_m - A_n).$$

On en déduit que

$$\begin{aligned}\|(\exp(iA_m) - \exp(iA_n))\psi\| &= \left\|\int_0^1 \exp(isA_m)\exp(i(1-s)A_n)i(A_m - A_n)\psi\,\mathrm{d}s\right\| \\ &\leqslant \int_0^1 \|\exp(isA_m)\exp(i(1-s)A_n)i(A_m - A_n)\psi\|\,\mathrm{d}s \\ &= \int_0^1 \|(A_m - A_n)\psi\|\,\mathrm{d}s = \|(A_m - A_n)\psi\|.\end{aligned}$$

car $\exp(iA_n)$ est de norme 1. D'où, comme la famille $(A_n\psi)_{n\in\mathbb{N}}$ converge quand $n$ tend vers l'infini, cette famille est de Cauchy. Ainsi, la famille $(\exp(iA_n))_{n\in\mathbb{N}}$ est une famille de Cauchy. Or $\mathcal{H}$ est complet donc la famille $(\exp(iA_n))_{n\in\mathbb{N}}$ converge quand $n$ tend vers l'infini. Ainsi, on peut définir pour $\psi \in \mathrm{D}(A)$,

$$\exp(iA) := \lim_{n \to +\infty} \exp(iA_n).$$

On peut étendre la définition à $\psi \in \mathcal{H}$ en utilisant le fait que $\|\exp(iA)\psi\| \leqslant \|\psi\|$ avec le théorème (2.8) sur les opérateurs bornés et la densité de $\mathrm{D}(A)$ dans $\mathcal{H}$. □

## 6.4 Transformation de Fourier

La *transformée de Fourier* est un outil utile dans de nombreux domaines mathématiques et physiques. Dans cette partie on donnera quelques-unes des principales propriétés de la transformée de Fourier. Les propriétés seront ici données sans preuve, notre sujet ne portant pas dessus. On prendra $d \in \mathbb{N}^*$.

Définition 6.21. La *transformée de Fourier* est une fonction notée $\mathcal{F}$ définie par

$$\boxed{\mathcal{F} : \left| \begin{array}{ccc} \mathrm{L}^1(\mathbb{R}^d, C) & \longrightarrow & \mathbb{C}^{\mathbb{R}^d} \\ \psi & \longmapsto & \hat{\psi} : \left| \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^d & \longrightarrow & \mathbb{C} \\ x & \longmapsto & (2\pi\hbar)^{-\frac{d}{2}} \displaystyle\int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{ix\cdot y}{\hbar}} \psi(y)\,\mathrm{d}y \end{array} \right. \end{array} \right.}$$

où $\cdot$ est le produit scalaire usuel sur $\mathbb{R}^d$.

◇ Remarques. Il est utile en mécanique quantique d'introduire la constante de Planck réduite $\hbar$ dans la définition de la transformée de Fourier, comme fait ci-dessus. On pourra rencontrer des définitions différentes dans d'autres références, mais l'idée reste la même.

On observe que $\mathcal{F}$ est bien définie sur le $\mathbb{C}$-espace vectoriel $\mathrm{L}^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ et qu'il s'agit d'un opérateur linéaire.

▷ Exemple. Soit $a \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Re}(a) > 0$. Avec ici $d = 1$, calculons la transformée de Fourier de la fonction intégrable sur $\mathbb{R}$

$$\psi : \left| \begin{array}{ccc} \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{C} \\ x & \longmapsto & e^{-\frac{x^2}{2a\hbar^2}} \end{array} \right. .$$

Pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\widehat{\psi}(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{ixy}{\hbar}} e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}}\,\mathrm{d}y.$$

Or, par le théorème classique de dérivation sous le signe intégrale, on montre que $\hat{\psi}$ est dérivable et, pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}
\widehat{\psi}'(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{iy}{\hbar} e^{-\frac{ixy}{\hbar}} e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}}\,\mathrm{d}y \\
&= \frac{i}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar a \frac{-y}{a\hbar^2} e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}} e^{-\frac{ixy}{\hbar}}\,\mathrm{d}y \\
&= \frac{i\hbar a}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left( \left[ e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}} e^{-i\frac{xy}{\hbar}} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}} \frac{-ix}{\hbar} e^{-i\frac{xy}{\hbar}}\,\mathrm{d}y \right) \text{ par intégration par parties} \\
&= i\hbar a \frac{ix}{\hbar} \left( 0 + \hat{\psi}(x) \right) \text{ car } \mathrm{Re}(a) > 0 \text{ donc } \mathrm{Re}\left(\frac{1}{a}\right) > 0
\end{aligned}$$

ie $\widehat{\psi}$ est solution de l'équation différentielle classique $y' = -axy$ avec la condition initiale $\hat{\psi}(0) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{y^2}{2a\hbar^2}}\,\mathrm{d}y = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\pi 2a\hbar^2} = \sqrt{\hbar a}$. On en déduit que pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\widehat{\psi}(x) = \sqrt{a\hbar} e^{-\frac{ax^2}{2}}.$$

En fait, on peut montrer le résultat plus général sur les gaussiennes suivant. Soit $d \in \mathbb{N}^*$ et la fonction $\psi_d : x \in \mathbb{R}^d \mapsto e^{-\frac{|x|^2}{2a\hbar^2}} \in \mathbb{C}$. Comme $\mathrm{Re}(a) > 0$, $\psi_d$ est dans $\mathrm{L}^1(\mathbb{R}^d)$ donc sa transformée de Fourier est bien définie et elle vaut

$$\widehat{\psi_d} : x \in \mathbb{R}^d \longmapsto (\hbar a)^{d/2} e^{-\frac{a|k|^2}{2}}.$$

◇ Remarque. On notera $*$ le produit de convolution défini par

$$\forall f, g \in \mathrm{L}^1(\mathbb{R}^d), \quad (f * g) : x \in \mathbb{R}^d \longmapsto \int_{\mathbb{R}^d} f(y) g(x-y)\,\mathrm{d}y \in \mathbb{C}.$$

Proposition 6.22. Dans les propositions $1, 2, 3, 4$ suivantes, on considère $\varphi$, $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$.

1. $\forall j \in [\![1, d]\!], \quad -i\hbar\widehat{\nabla_j \psi} = x_j \hat{\psi}$.
2. $\forall j \in [\![1, d]\!], \quad \widehat{x_j \psi} = i\hbar \nabla_j \hat{\psi}$.
3. $\widehat{\psi\varphi} = (2\pi\hbar)^{-\frac{d}{2}} \hat{\psi} * \hat{\varphi}$.
4. $\widehat{\psi * \varphi} = (2\pi\hbar)^{\frac{d}{2}} \hat{\psi}\hat{\varphi}$.
5. *Théorème de* Plancherel : la transformée de Fourier $\mathcal{F}$ définie sur $\mathrm{L}^1(\mathbb{R}^d) \cap \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ se prolonge en une application linéaire unitaire sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ à image dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$.
6. *Formule d'inversion* : l'adjoint $\mathcal{F}^*$ de $\mathcal{F}$ sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ est donné par

$$\mathcal{F}^* : \left| \begin{array}{ccc} \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d) & \longrightarrow & \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d) \\ \psi & \longmapsto & \check{\psi} : \left| \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^d & \longrightarrow & \mathbb{C} \\ x & \longmapsto & (2\pi\hbar)^{-\frac{d}{2}} \displaystyle\int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{ix\cdot y}{\hbar}} \psi(y)\,\mathrm{d}y \end{array} \right. \end{array} \right.$$

et, par le théorème de Plancherel, $\mathcal{F}^* = \mathcal{F}^{-1}$.

◇ Remarque. On peut synthétiser les quatre dernière propriétés en disant que « le produit de convolution échange la différentiation par rapport à une coordonnée et la multiplication par cette coordonnée et échange la multiplication de deux fonctions et le produit de convolution ».

Comme application, on peut utiliser la transformée de Fourier pour définir des fonctions des opérateurs de dérivation. On reprend ci-dessous la notation $p = -i\hbar\nabla$. Cette définition est motivée par la troisième assertion de la proposition (6.22).

Définition 6.23. Soit $g \in \mathrm{L}^\infty(\mathbb{R}^d)$. On définit l'opérateur $g(p)$ sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ de la manière suivante : pour tout $\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\widehat{g(p)\psi} = g\hat{\psi}.$$

Si de plus $g \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$, de manière équivalente, pour tout $\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d), g(p)\psi = (2\pi\hbar)^{-d/2}\check{g} * \psi$.

## 6.5 Espaces de Sobolev

Définition 6.24. Soit $n \in \mathbb{N}^*$. L'espace de Sobolev d'ordre $n$ est

$$\boxed{\mathrm{H}^n(\mathbb{R}^d) := \{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d) \mid \forall \alpha \in \mathbb{N}^d, |\alpha| \leqslant n \Rightarrow \partial^\alpha \psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)\}.}$$

◇ Remarque. La définition d'un espace de Sobolev est plus générale que celle-ci (définie sur un ouvert $\Omega$ de $\mathbb{R}^d$ et dans $\mathrm{L}^p(\Omega)$ pour $p \in [1; +\infty]$). On donne ici la définition qui nous intéresse. On introduit ces espaces afin d'obtenir des hypothèses convenables sur nos fonctions pour pouvoir les dériver suffisamment de fois et résoudre des équations aux dérivées partielles.

Proposition 6.25. Soit $\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$.

$$\psi \in \mathrm{H}^n(\mathbb{R}^d) \iff \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^n |\hat{\psi}(k)|^2\,\mathrm{d}k < \infty.$$

# 7 Conclusion

La résolution de problèmes physiques prend une toute autre forme lorsqu'on les regarde d'un point de vue mathématique. Comme la mécanique quantique est une théorie très récente qui continue d'évoluer aujourd'hui, elle a bénéficié d'un cadre mathématique très rigoureux assez tôt. C'est ce qui a notamment permis son développement malgré la complexité des notions physiques nécessaires, tranchant radicalement avec les théories précédentes. Cela demande énormément d'outils mathématiques et de propriétés adéquates pour pouvoir traiter correctement ces problèmes, comme en dénote la longueur et la densité de l'annexe ainsi que les quelques points admis tout au long du compte-rendu.

Ici, on s'est intéressé à la résolution de l'équation de Schrödinger, la définition des grandeurs physiques avec la notion d'observable tout en gardant à l'esprit ce que ces objets représentaient et ce qu'on voulait en faire. On pense ici aux lois de conservation. On s'est également intéressé aux principes d'incertitudes et aux énergies qu'un système pouvait acquérir au travers du spectre de certains opérateurs. Tout au long du compte-rendu, on a fait le parallèle entre les points mathématiques évoqués et leur correspondance physique pour être au plus proche de la dualité physique/mathématiques.

## Bibliographie


[1] S. J. Gustafson et I. M. Sigal. *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics.* 2003, p. 1-25, 41-59, 302-337.

[2] P. D. Islop et I. M. Sigal. *Introduction to Spectral Theory with Applications to Schrödinger Operators.* 1996, p. 79-80, 86, 133.

[3] R. Joly et E. Dumas. *M2R Introduction aux EDP d'évolution (notes basées sur un cours donné à l'Université de Grenoble).* 2019-2020, p. 26.

[4] B. Simon et M. Reed. *Methods of Modern Mathematical Physics, Volume I : Functional Analysis.* 1972.