

## Chapitre 7

### L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

*L'oscillateur harmonique est un sujet très important. Le système physique décrit ici est utilisé dans de nombreuses situations, très différentes les unes des autres, pour modéliser les phénomènes ou construire les théories selon le cas.*

*Ce chapitre a été écrit avec l'intention, non seulement d'introduire l'oscillateur à une dimension, mais aussi de permettre, à cette occasion, une révision de quelques notions importantes introduites dans le cours.*

*Nous avons intentionnellement omis certaines démonstrations élémentaires ; il est fortement recommandé d'en effectuer explicitement la démonstration à titre d'exercice.*

#### 7.1 Introduction

En mécanique classique, une position d'équilibre stable correspond à un minimum de l'énergie potentielle,  $V(x)$ .

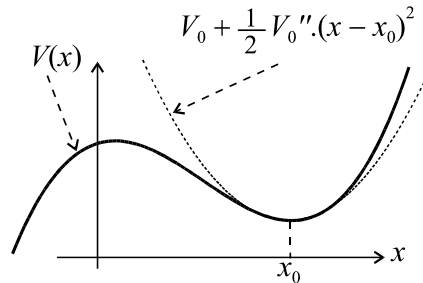


Figure 7-1.

Donnons de  $V(x)$  un développement au voisinage de la position d'équilibre stable :

$$V(x) \simeq V(x_0) + \frac{1}{1!} V'(x_0) \cdot (x - x_0) + \frac{1}{2!} V''(x_0) \cdot (x - x_0)^2 \text{ où } ( )' \text{ représente la dérivée } \frac{d( )}{dx}.$$

$x_0$  étant l'abscisse d'une position d'équilibre, il vient  $V'(x_0) = 0$ . Cette position d'équilibre étant stable on en déduit  $V''(x_0) := V_0'' > 0$  (il peut arriver que l'on ait  $V''(x_0) = 0$ , avec par exemple,  $V'''(x_0) = 0$  et  $V''''(x_0) > 0$  mais le plus souvent ce n'est pas le cas).

L'oscillateur harmonique constitue donc un système physique particulièrement important dans la mesure où il décrit, en première approximation, le mouvement d'un point matériel au voisinage d'une position d'équilibre stable dans le cas général.

Il est possible d'ajouter une constante arbitraire à l'énergie potentielle (voir l'annexe page 106). Nous effectuons la substitution  $V(x) \rightarrow U(x) = V(x) - V(x_0)$  et nous

posons  $X = x - x_0$ . L'énergie potentielle s'exprime alors sous la forme  $U(X) = \frac{1}{2}kX^2$  où l'on a posé  $k = V''(x_0) > 0$ . En utilisant l'ancienne notation,  $x$ , pour désigner la nouvelle variable  $X$ , il vient l'expression de l'hamiltonien :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k x^2$$

avec  $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ .

L'équation d'évolution de la fonction d'onde s'écrit alors

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \frac{1}{2}k x^2 \psi$$

où  $m$  est la masse de l'oscillateur et  $k$  son coefficient de raideur.

## 7.2 Les opérateurs $a$ et $a^+$

Nous définissons les opérateurs  $a$  et  $a^+$  :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} x + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}} p \right) \quad (7.1)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} x - \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}} p \right) \quad (7.2)$$

où  $\omega$  est la pulsation de l'oscillateur classique de même masse et de même coefficient de raideur :  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ .

$a$  est appelé "**opérateur d'annihilation**",  $a^+$  est appelé "**opérateur de création**" et  $N = a^+a$  opérateur "**nombre de quanta**". Nous justifierons ces dénominations ultérieurement.

On vérifie aisément les relations suivantes

$$\boxed{[a, a^+] := aa^+ - a^+a = 1}$$

$$\boxed{H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right)} \quad \text{avec} \quad \boxed{N := a^+a}$$

$$[H, a] = -\hbar\omega a \quad \text{et} \quad [H, a^+] = \hbar\omega a^+$$

Remarquons que  $a$  et  $a^+$  sont des opérateurs conjugués :  $a^\dagger = a^+$  et  $(a^+)^\dagger = a$ . Cette propriété est une conséquence de l'hermiticité des opérateurs  $x$  et  $p$ .

## 7.3 Le spectre de l'hamiltonien

Nous nous proposons de démontrer

1. que les valeurs propres de l'énergie sont les quantités  $\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  où  $n$  est un entier arbitraire ( $n = 0, 1, 2, \text{etc...}$ ) et
2. que les valeurs propres précédentes ne sont pas dégénérées.

7.3.1 Minorant des énergies

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit

$$H u_E(x) = E u_E(x)$$

En utilisant l'expression de  $H$  en fonction de  $a$  et  $a^+$ , il vient

$$a^+ a u_E = \left( \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) u_E := \alpha u_E$$

avec  $\alpha = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$ .

Nous formons le produit scalaire  $\langle u_E | a^+ a u_E \rangle = \langle a u_E | a u_E \rangle$ . Le produit scalaire  $\langle u_E | a^+ a u_E \rangle$  étant le carré de la norme de  $a u_E$ , il est positif ou nul. D'autre part  $\langle u_E | a^+ a u_E \rangle = \alpha \langle u_E | u_E \rangle$ . On en déduit  $\alpha \langle u_E | u_E \rangle \geq 0$ . On ne considère que les états propres décrivant une particule présente quelque part, c'est à dire tels que  $\langle u_E | u_E \rangle > 0$ .

Par conséquent il vient  $\alpha \geq 0$ . C'est-à-dire  $\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \geq 0$  soit

$$E \geq \frac{1}{2} \hbar\omega$$

7.3.2 Echelle des états propres de  $H$  "en dessous" de  $u_E$

Considérons  $u_E(x)$ , état propre de  $H$ , tel que  $H u_E(x) = E u_E(x)$ . Posons  $u_{(-1)} = a u_E$ . Nous formons  $H u_{(-1)}$ ; il vient  $H u_{(-1)} = H a u_E$ . En utilisant la relation  $[H, a] = -\hbar\omega a$  on obtient  $H u_{(-1)} = H a u_E = (aH - \hbar\omega a) u_E = a(H u_E - \hbar\omega u_E) = a(E - \hbar\omega) u_E = (E - \hbar\omega) a u_E$ . Ainsi  $u_{(-1)}$  satisfait la relation  $H u_{(-1)} = (E - \hbar\omega) u_{(-1)}$ .

$u_{(-1)} = a u_E$  est fonction propre de  $H$  pour la valeur propre  $E - \hbar\omega$ .

En formant successivement  $a u_E = u_{(-1)}$ ,  $a u_{(-1)} = u_{(-2)}$ ,  $a u_{(-2)} = u_{(-3)}$ , etc, on obtient une suite de fonction propres de  $H$  pour les valeurs propres décroissantes  $E - \hbar\omega$ ,  $E - 2\hbar\omega$ ,  $E - 3\hbar\omega$ , etc.

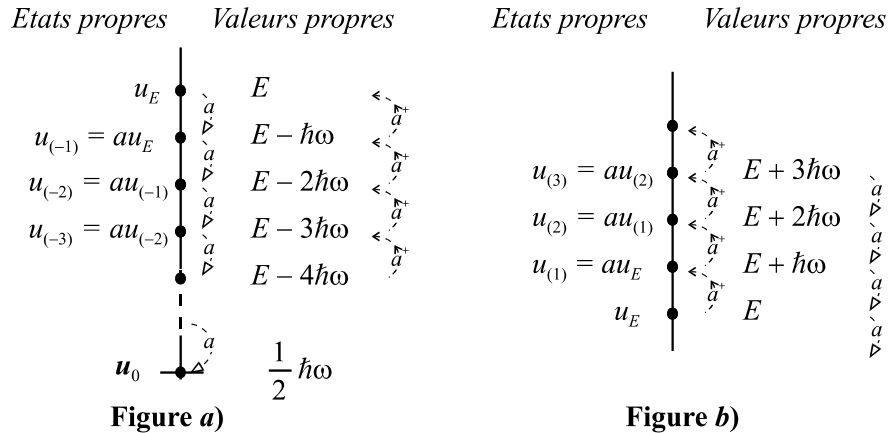


Figure 7-2.

La suite de fonctions propres  $u_E$ ,  $u_{(-1)}$ ,  $u_{(-2)}$ , etc est assimilée à la suite des barreaux d'une échelle en dessous de  $u_E$  (figure 7-2.a). On les obtient par application successive de l'opérateur  $a$ .

### 7.3.3 Le premier barreau; le spectre de l'hamiltonien

Il n'est pas possible de descendre l'échelle indéfiniment et d'obtenir ainsi des valeurs propres aussi petites que possibles car les énergies sont minorées. Il y a donc un dernier barreau correspondant à une fonction d'onde non nulle que nous notons  $u_0$ . La valeur propre de l'énergie associée est  $E_0 = E - n\hbar\omega$  où  $n$  est un entier. Lorsqu'on forme  $a u_0$  on obtient une fonction propre de  $H$  pour la valeur propre  $E_0 - \hbar\omega$ . A cette fonction propre est associée une valeur propre inférieure au minorant. La fonction d'onde est donc nécessairement nulle<sup>†</sup>. Ainsi la fonction d'onde du premier barreau de l'échelle satisfait la relation

$$a u_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} x u_0(x) + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}} p u_0(x) \right) = 0$$

Une telle relation est une équation différentielle qui détermine  $u_0$  à un facteur multiplicatif près. Nous posons  $\sigma := \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}$ . Il vient

$$\frac{x}{\sigma} u_0 + \sigma \frac{du_0}{dx} = 0 \Rightarrow u_0(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (7.3)$$

où  $A$  est une constante.

La fonction d'onde étant déterminée à un facteur multiplicatif près, l'état physique correspondant est complètement déterminé. Il est unique.

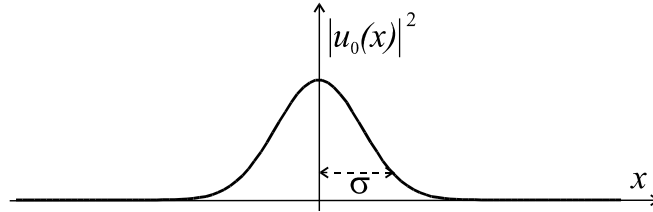


Figure 7-3.

L'état décrit par la fonction d'onde  $u_0$  est l'état fondamental d'énergie minimale  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . En effet, formons  $Hu_0 = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) u_0$ . La relation  $a u_0 = 0$  implique  $Hu_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega u_0$ . La fonction  $u_0(x)$  est donc fonction propre de l'hamiltonien pour la valeur propre  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ; cette quantité est appelée "énergie du point zéro".

Les valeurs propres de l'énergie associées aux barreaux en dessous de  $u_E$  ont pour expression  $E_0 + m\hbar\omega$  où  $m$  est un entier. Cette relation est également valable pour la fonction  $u_E$  et par conséquent  $E = E_0 + n\hbar\omega$  avec  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . On en déduit la relation nécessaire  $E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$  où  $n$  est un entier non négatif.

Deux questions subsistent :

1. L'énergie  $E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$  est elle dégénérée? Nous verrons que la réponse est "non".
2. L'entier  $n$  peut il prendre n'importe quelle valeur positive, aussi grande que l'on veut? Ici, la réponse est "oui".

<sup>†</sup> $u \equiv 0$  est fonction propre de tout opérateur linéaire, pour toute valeur propre.

### 7.3.4 Remonter l'échelle

Considérons l'état  $u_E$  avec  $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ . Nous utilisons les notations  $u_n(x)$  de préférence à  $u_E(x)$  et  $u_{n-m}$  avec  $0 \leq m < n$  de préférence à  $u_{(-m)}$ . Cette nouvelle notation consiste à numéroter les barreaux de l'échelle à partir du fondamental, barreau dont le numéro est 0. On prêtera attention aux notations, tout particulièrement à celles de la figure 7-2.b) où apparaissent  $u_{(1)}$ ,  $u_{(2)}$ , ...  $u_{(m)}$  qui ne sont donc pas les fonctions d'ondes des mêmes états que ceux décrits par  $u_1, u_2, \dots, u_m$ .

Avec ces nouvelles notations il vient  $u_m = a u_{m+1}$  (par construction) avec  $H u_m = H u_{(n-m)} = (E - (n-m)\hbar\omega) u_{(n-m)} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega u_m$  :

$$H u_m = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega u_m \quad (7.4)$$

Formons  $a^+ u_m = a^+ a u_{m+1}$ . La relation  $H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$  donne  $a^+ u_m = a^+ a u_{m+1} = \frac{H}{\hbar\omega} u_{m+1} - \frac{1}{2} u_{m+1}$ . En utilisant la relation 7.4,  $H u_{m+1} = \left(m + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega u_{m+1}$ , on obtient  $a^+ u_m = a^+ a u_{m+1} = \left(m + \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\right) \hbar\omega u_{m+1}$ . Les fonctions  $a^+ u_m$  et  $u_{m+1}$  sont proportionnelles. L'état physique représenté par la fonction d'onde  $a^+ u_m$  est donc le même que l'état représenté par la fonction d'onde  $u_{m+1}$ . Par conséquent, on "remonte" l'échelle en dessous de  $u_E$  en appliquant l'opérateur  $a^+$  (figure 7-2.a).

Supposons que plusieurs états de même énergie  $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  existent : deux états de fonctions d'onde notées  $u_E$  et  $v_E$ , par exemple. Ces deux états disposent de deux échelles qui conduisent au même état fondamental décrit par la fonction d'onde  $u_0$  donnée par l'expression 7.3 : nous avons en effet démontré que l'état fondamental est unique.

Partant de  $u_0$ , pour retrouver  $u_E$  et  $v_E$  (à un facteur multiplicatif près) nous devons appliquer successivement  $n$  fois l'opérateur  $a^+$ . Il vient  $(a^+)^n u_0 = \lambda u_E = \mu v_E$ . Nous en déduisons que les fonctions d'onde  $u_E$  et  $v_E$  sont proportionnelles. Elles décrivent donc le même état physique. Par conséquent, **l'énergie  $E$  n'est pas dégénérée.**

### 7.3.5 Echelle des états propres de $H$ "au dessus" de $u_E$

$u_E$  est un état propre de  $H$  qui satisfait la relation  $H u_E = E u_E$ . Formons  $a^+ u_E = u_{(1)}$ . De la relation  $[H, a^+] = \hbar\omega a^+$  on déduit  $H a^+ u_E = a^+ H u_E + \hbar\omega a^+ u_E = (E + \hbar\omega) a^+ u_E$  soit  $H u_{(1)} = (E + \hbar\omega) u_{(1)}$ . En appliquant successivement  $a^+$  on engendre donc, au dessus de  $u_E$ , une échelle dont les barreaux sont des états propres de  $H$  pour les valeurs successives  $E + \hbar\omega$ ,  $E + 2\hbar\omega$ ,  $E + 3\hbar\omega$ , etc (figure 7-2.b). On peut ainsi

construire une fonction propre de l'énergie pour une valeur propre  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  où

**$n$  est un entier non négatif arbitraire.**

### 7.3.6 Création et annihilation d'un quantum d'énergie

Un oscillateur harmonique est un récipient d'énergie dont le contenu varie par saut d'un nombre entier de quanta, l'énergie d'un quantum étant égal à  $\hbar\omega$ .

A l'échelle macroscopique, un quantum d'énergie est généralement une très petite quantité. Ce n'est pas le cas à l'échelle microscopique. Pour illustrer cette propriété considérons, dans le cadre de la théorie classique, un oscillateur plongé dans un gaz à l'équilibre thermodynamique à la température  $T$ . L'énergie de l'oscillateur est  $\frac{1}{2} m\omega^2 X^2$

où  $X$  est l'amplitude du mouvement. À l'équilibre thermodynamique, cette énergie est de l'ordre de  $k_B T$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann. On en déduit  $X \sim \sqrt{\frac{2 k_B T}{m \omega^2}}$ .

Pour fixer les idées, posons  $T \sim 300 \text{ K}$  et  $\omega \sim 10^4 \text{ s}^{-1}$ , il vient  $\frac{k_B T}{\hbar \omega} \sim 4 \cdot 10^9$ . Avec  $T = 100 \text{ K}$  et  $\omega \sim 10^5 \text{ s}^{-1}$  le nombre de quanta d'énergie stockés dans l'oscillateur reste encore très élevé :  $\frac{k_B T}{\hbar \omega} \sim 10^8$ . Une variation d'énergie de l'ordre de 1 quantum provoque donc une variation relative  $\Delta X/X$  de l'ordre de  $0,5 \cdot 10^{-8}$  dans le dernier cas. Dans ce cas, l'amplitude du mouvement,  $X$ , est déjà très petite,  $\Delta X$  est alors négligeable. Avec une masse  $m \sim 1 \text{ mg}$ , il vient  $X \sim 0,5 \text{ \AA}$  et  $\Delta X \sim 2,5 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}$ . Ici, il apparaît clairement que l'échange d'un quantum produit un effet négligeable, même pour une masse aussi petite que 1 mg. On conçoit donc que les quantités d'énergie échangées aient été perçues comme continues jusqu'à une période récente.

La situation est différente à l'échelle microscopique. Supposons que l'oscillateur soit une molécule caractérisée par une pulsation  $\omega \sim 10^{14} \text{ s}^{-1}$  correspondant à une fréquence infrarouge du spectre. Les oscillateurs moléculaires peuvent être excités dans leurs collisions avec les molécules de gaz à la condition que celles-ci leur transfèrent au moins un quantum  $\hbar \omega \sim 10^{-20} \text{ J}$ . À la température  $T = 100 \text{ K}$ , les molécules de gaz ont une énergie de l'ordre de  $k_B T \sim 1,4 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ . La relation  $\hbar \omega \sim 7 k_B T$  a pour conséquence que seules quelques rares molécules de gaz disposent de l'énergie suffisante pour exciter l'oscillateur moléculaire. On constatera donc l'absence de raie d'émission à la fréquence considérée.

Sur le plan formel, lorsqu'on applique l'opérateur  $a$  à une fonction d'onde d'énergie  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ , on obtient une fonction d'onde dont l'énergie est  $E_n - \hbar \omega$ . Un quantum a disparu. Pour cette raison,  $a$  est appelé "*opérateur d'annihilation*". De façon similaire, appliquer  $a^+$  à la fonction d'onde  $u_n$  crée un quantum d'énergie supplémentaire. C'est la raison pour laquelle  $a^+$  est appelé "*opérateur de création*".

#### 7.4 Base standard : relations de récurrence

L'état fondamental est décrit par la fonction d'onde 7.3. Nous choisissons  $A$  de façon à ce que la fonction  $u_0$  soit normalisée. Il vient

$$u_0 = \left(\frac{1}{\sigma \sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2} \text{ avec } \sigma = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \quad (7.5)$$

Lorsqu'on forme  $a^+ u_0$  on obtient une fonction qui décrit l'état d'énergie  $\frac{3}{2} \hbar \omega$  mais qui n'est pas normalisée. À partir de maintenant, par convention nous notons  $u_n$  une fonction d'onde normalisée qui décrit l'état d'énergie  $\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ . Les relations satisfaites par les fonctions d'onde  $u_n(x)$  sont les suivantes :

$$\langle u_n | u_n \rangle = 1, \quad a u_n = \lambda_n u_{n-1}, \quad a^+ u_{n-1} = \mu_n u_n \quad \text{et} \quad H u_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega u_n \quad (7.6)$$

Notre objectif est de déterminer  $\lambda_n$  et  $\mu_n$ .

Nous vérifions tout d'abord les relations

$$\boxed{a a^+ u_n = n u_n \quad \text{et} \quad a^+ a u_n = (n - 1) u_n}$$

La première de ces relations justifie l'appellation "opérateur nombre de quanta" donné à l'opérateur  $N = aa^+$ . Cette relation s'obtient à partir des relations  $a^+a = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$  et  $Hu_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega u_n$  tandis que la seconde relation s'obtient à partir de la relation  $aa^+ u_n = n u_n$  et de l'expression du commutateur  $[a, a^+] := aa^+ - a^+a = 1$ .

Le produit scalaire  $\langle a u_n | a u_n \rangle$  s'exprime de deux manières. Les relation 7.6 conduisent à l'expression

$\langle a u_n | a u_n \rangle = |\lambda_n|^2$ . La relation  $(a^+)^\dagger = a$  donne  $\langle a u_n | a u_n \rangle = \langle u_n | a^+ a u_n \rangle = n \langle u_n | u_n \rangle$ . On en déduit  $|\lambda_n| = \sqrt{n}$ .

De même on calcule  $\langle a^+ u_{n-1} | a^+ u_{n-1} \rangle = |\mu_n|^2 = \langle u_{n-1} | aa^+ u_{n-1} \rangle$ . On en déduit  $|\mu_n| = \sqrt{n+1}$ .

La base standard est obtenue en choisissant  $\lambda_n$  et  $\mu_n$  réels et positifs :  $\lambda_n = \sqrt{n}$  et  $\mu_n = \sqrt{n+1}$ . On en déduit

$$\boxed{a u_n = \sqrt{n} u_{n-1} \quad \text{et} \quad a^+ u_n = \sqrt{n+1} u_{n+1}}$$

Ces relations permettent de déterminer explicitement les fonctions d'onde  $u_n(x)$ . Par exemple

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} a^+ u_0 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} x + \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}} \frac{d}{dx} \right) \left[ \left( \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2} \right].$$

Avec  $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}$  il vient  $u_1 = \left( \frac{2}{2\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \frac{x}{\sigma} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2}$ . Ainsi, en appliquant les relations de récurrence on trouve successivement

$$\begin{aligned} u_0 &= \left( \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2} \\ u_1 &= \left( \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 2 \frac{x}{\sigma} \right) \\ u_2 &= \left( \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2} \times \frac{1}{\sqrt{8}} \times \left( 4 \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2 - 2 \right) \\ \dots & \dots \dots \\ u_n &= \left( \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} \right)^2} \times \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \times H_n \left( \frac{x}{\sigma} \right) \end{aligned}$$

où  $H_n$  est un polynôme de degré  $n$  connu sous la dénomination de "polynôme de Hermite".

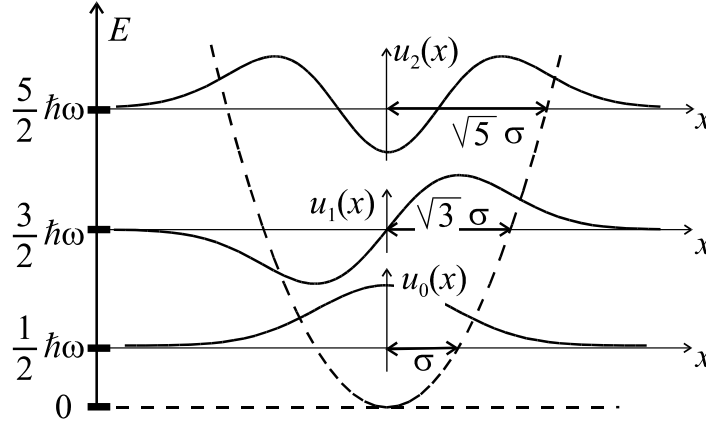


Figure 7-4.

Les fonctions d'onde des premiers niveaux d'énergie sont représentées sur la figure 7-4. La parabole en pointillés donne l'élongation,  $X$ , de l'oscillateur classique de même énergie :

$$\left| \begin{array}{ccc} X = \sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} & X = \sqrt{3} \sigma & X = \sqrt{5} \sigma \\ \text{pour } E = E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega & \text{pour } E = E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega & \text{pour } E = E_2 = \frac{5}{2} \hbar\omega \end{array} \right|$$

Les fonctions deviennent négligeable pour  $|x| \gtrsim X$ . On remarquera en outre que les fonctions de la base standard sont réelles et alternativement paires et impaires.

## 7.5 Paquets d'ondes de l'oscillateur

### 7.5.1 Evolution : cas général

Pour étudier le comportement d'un paquet d'ondes, nous utilisons le théorème d'Ehrenfest. (paragraphe 3.3.2, page 41)

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [p, H] \rangle = -k \langle x \rangle$$

On en déduit l'équation  $m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -k \langle x \rangle$ . C'est au voisinage du point  $M$  d'abscisse  $\langle x \rangle$  que l'on trouve la particule si on en mesure la position. Les équations du mouvement de  $M$  sont celles d'un oscillateur classique de masse  $m$  et de coefficient de raideur  $k$ . Le mouvement de  $M$  est donc un mouvement sinusoïdal de pulsation  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . La valeur moyenne  $\langle x \rangle$  étant une fonction sinusoïdale de pulsation  $\omega$ , son carré,  $\langle x \rangle^2$ , est une fonction périodique de pulsation  $2\omega$ .

La particule n'est pas parfaitement localisée. Sa position présente une certaine indétermination que mesure l'écart quadratique moyen  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ .

Pour étudier la dépendance temporelle de  $\langle x^2 \rangle$  nous calculons  $x$  à partir des relations 7.1 et 7.2 :  $x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} (a + a^+)$  avec  $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ .



Nous allons utiliser la structure d'espace vectoriel de l'espace des états ; en conséquence nous utilisons les notations introduites page 9 pour exprimer la décomposition de la fonction d'onde sur la base standard :  $|\psi\rangle = \sum_n C_n e^{-i(n+1/2)\omega t} |u_n\rangle$ . Nous calculons

$x^2 |\psi\rangle$  :

$$x^2 |\psi\rangle = \frac{\sigma^2}{2} \sum_n C_n e^{-i(n+1/2)\omega t} (a^2 + a^{+2} + aa^+ + a^+a) |u_n\rangle$$

$$x^2 |\psi\rangle = \frac{\sigma^2}{2} \sum_n C_n e^{-i(n+1/2)\omega t} \left( \sqrt{n(n-1)} |u_{n-2}\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} |u_{n+2}\rangle + (2n-1) |u_n\rangle \right)$$

Nous formons le produit scalaire  $\langle\psi|x^2\psi\rangle$  :

$$\begin{aligned} \langle\psi|x^2\psi\rangle &= \frac{\sigma^2}{2} \sum_{k,n} \left( \bar{C}_k e^{i(k+1/2)\omega t} \right) \left( C_n e^{-i(n+1/2)\omega t} \right) \times \left( \sqrt{n(n-1)} \langle u_k | u_{n-2} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle u_k | u_{n+2} \rangle + (2n-1) \langle u_k | u_n \rangle \right) \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \sum_{k,n} \bar{C}_k C_n e^{-i(n-k)\omega t} \times \left( \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{k,n+2} \right. \\ &\quad \left. + (2n-1) \delta_{k,n} \right) \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \sum_n \left( \bar{C}_{n-2} C_n e^{-2i\omega t} \sqrt{n(n-1)} + \bar{C}_{n+2} C_n e^{2i\omega t} \sqrt{(n+1)(n+2)} \right. \\ &\quad \left. + \bar{C}_n C_n (2n-1) \right) \end{aligned}$$

On constate que  $\langle\psi|x^2\psi\rangle$  est une fonction périodique de pulsation  $2\omega$ , comme  $\langle x^2 \rangle$ .

La norme de  $|\psi\rangle$  est une constante ; il en est de même de  $\langle\psi|\psi\rangle$  ; par conséquent  $\langle x^2 \rangle := \frac{\langle\psi|x^2\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$  est une fonction périodique de pulsation  $2\omega$ . C'est aussi le cas pour  $\Delta x^2 := \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  et par conséquent pour  $\Delta x$  (le plus souvent).

La position moyenne d'un paquet d'ondes d'oscillateur harmonique est donc animé d'un mouvement sinusoïdal de pulsation  $\omega$ , tandis que l'écart quadratique moyen est une fonction périodique de pulsation  $2\omega$ .

### 7.5.2 Etats cohérents

Les états cohérents,  $|F\rangle$  sont les états propres de l'opérateur annihilation  $a$ .

$$a |F\rangle = f |F\rangle$$

L'opérateur  $a$  n'est pas hermitique, la valeur propre  $f$  n'est donc pas nécessairement réelle.

En utilisant la définition de  $|F\rangle$  ainsi que les propriétés des opérateurs  $a$  et  $a^+$  on calcule aisément les valeurs moyennes suivantes :

$\langle a \rangle = f$	$\langle a^+ \rangle = \bar{f}$	$\langle a^+ a \rangle =  f ^2$	$\langle (a^+ a)^2 \rangle =  f ^2 (1 +  f ^2)$
$\langle x \rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} (f + \bar{f})$	$\langle p \rangle = \frac{i\hbar}{\sigma\sqrt{2}} (f - \bar{f})$	$\langle N \rangle =  f ^2$	$\langle H \rangle = \hbar\omega \left(  f ^2 + \frac{1}{2} \right)$
$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$	$\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma\sqrt{2}}$	$\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle}$	$\Delta H = \hbar\omega \sqrt{\langle N \rangle}$

Remarquons que  $\langle x \rangle$  et  $\langle p \rangle$  peuvent être choisis arbitrairement (parmi les réels) ; on en déduit alors  $f = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\langle x \rangle}{\sigma} - i \frac{\sigma}{\hbar} \langle p \rangle \right)$ . Remarquons en outre la relation  $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ .

De façon générale, c'est l'inégalité  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  qui est satisfaite (cf. page 31). Ici  $\Delta x \Delta p$  prend la valeur minimale possible. Pour cela, le paquet d'ondes qui décrit un état cohérent est appelé "*paquet d'ondes minimal*".

En remplaçant  $a$  par son expression dans l'expression  $a |F\rangle = f |F\rangle$ , il vient

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{\sigma} F(x) - \sigma \frac{dF(x)}{dx} \right) = f F(x) \quad \text{avec} \quad \sigma = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}$$

La fonction d'onde  $F(x)$  satisfait donc une équation différentielle qui s'intègre sous la forme

$$F(x) = A e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sigma} - f\sqrt{2} \right)^2}$$

où  $A$  est une constante. Le calcul de  $|F(x)|^2$  conduit à l'expression  $|F(x)|^2 = A e^{\frac{\sigma^2}{\hbar^2} \langle p \rangle^2} \times e^{-\left( \frac{x}{\sigma} - \frac{\langle x \rangle}{\sigma} \right)^2}$ . La densité de probabilité de présence est donc représentée par la gaussienne de la figure 7-3, centrée en  $\langle x \rangle$  ici (et non à l'origine).

On peut décomposer l'état  $|F\rangle$  sur la base standard :  $|F\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle$ . La relation  $a |F\rangle = f |F\rangle$  implique  $C_n \sqrt{n} = C_{n-1}$ ; on en déduit

$$|F\rangle = C_0 \times \sum_n \frac{f^n}{\sqrt{n!}} |u_n\rangle \quad (7.7)$$

On peut poser  $C_0 = e^{-\frac{1}{2}|f|^2}$ . L'état  $|F\rangle$  est alors normalisé.

Supposons que l'expression précédente soit celle de la fonction d'onde  $\psi$  à l'instant initial  $t = 0$  (c'est à dire  $F(x) = \psi(0, x)$ ). Pour étudier l'évolution de l'état, nous utilisons les résultats du chapitre 3.2, en particulier l'expression 3.3 page 39. A l'instant  $t$  la fonction d'onde est  $\psi(t, x) = C_0 \sum_n \frac{f^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |u_n\rangle$

$$\psi(t, x) = C_0 e^{-i\omega t/2} \times \sum_n \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}} |u_n\rangle \quad \text{avec} \quad \phi = f e^{-i\omega t}$$

Cette expression doit être comparée à l'expression 7.7 :  $f \rightarrow \phi = f e^{-i\omega t}$  et  $C_0 \rightarrow C_0 e^{-i\omega t/2}$ . Un état cohérent reste donc un état cohérent au cours du temps.  $\Delta x$  et  $\Delta p$  ne changent pas : le paquet d'ondes reste minimal. Un état cohérent décrit un état aussi proche que possible de l'état classique.

Posons  $X = \frac{x}{\sigma}$  et  $P = \frac{p\sigma}{\hbar}$ . A chaque instant, l'état d'un oscillateur classique est représenté par un nombre complexe  $Z_c = X_c + iP_c$  car  $X_c$  et  $P_c$  prennent des valeurs précises. Dans le cadre de la théorie quantique, on peut représenter  $\langle Z \rangle = \langle X \rangle + i \langle P \rangle$ .

C'est un nombre complexe de module  $|\langle Z \rangle| = \sqrt{\frac{(\varphi + \bar{\varphi})^2 + (\varphi - \bar{\varphi})^2}{2}}$ . Un calcul sans

difficulté donne  $|\langle Z \rangle| = \sqrt{2|\varphi|^2} = \sqrt{2\langle N \rangle} = \Delta N \sqrt{2}$ . Si l'on veut représenter l'état d'un oscillateur classique qui se comporterait autant que possible, comme l'oscillateur quantique, il faut accepter une certaine indétermination sur  $Z_c$ , due aux indéterminations  $\Delta X = 1/\sqrt{2} = \Delta P$ . L'extrémité de  $Z_c$  dans le plan complexe se trouve donc situé (avec une forte probabilité) dans une zone circulaire, centrée sur l'extrémité de  $|\langle Z \rangle|$ , dont le rayon est de l'ordre de  $1/\sqrt{2}$  (figure 7-5).

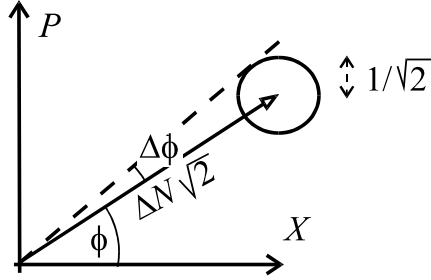


Figure 7-5.

La phase  $\phi$  présente donc une indétermination  $\Delta\phi \sim \frac{1}{2\Delta N}$ . Cette relation complète les relations de Heisenberg :  $\Delta\phi \Delta N \sim \frac{1}{2}$ . Pour que la phase d'un oscillateur soit bien définie, il est donc nécessaire que le nombre de quanta d'énergie présente une grande indétermination. La relation  $\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle}$  implique que pour cela, dans un état cohérent, le nombre de quanta d'énergie doit être très élevé.

### 7.5.3 Etats comprimés

Les états cohérents ne sont pas les seuls états décrits par des paquets d'ondes minimaux.

Considérons les opérateurs  $b$  et  $b^+$  :

$$b = \lambda_0 a + \mu_0 a^+ \quad \text{et} \quad b^+ = \bar{\lambda}_0 a^+ + \bar{\mu}_0 a \quad \text{avec} \quad |\lambda_0|^2 - |\mu_0|^2 = 1$$

Ces deux opérateurs sont conjugués l'un de l'autre. Ils satisfont la relation de commutation  $[b, b^+] = 1$ .

$a$ ,  $a^+$ ,  $x$  et  $p$  s'expriment en fonction de  $b$  et  $b^+$  :

$$\begin{aligned} a &= \bar{\lambda}_0 b - \mu_0 b^+, & a^+ &= \lambda_0 b^+ - \bar{\mu}_0 b \\ x &= \frac{\sigma}{\sqrt{2}} ( (\bar{\lambda}_0 - \bar{\mu}_0) b + (\lambda_0 - \mu_0) b^+ ) \\ p &= \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\sigma} ( (\lambda_0 + \mu_0) b^+ - (\bar{\lambda}_0 + \bar{\mu}_0) b ) \end{aligned}$$

Considérons, à l'instant  $t = 0$ , un état propre,  $|G\rangle$ , de l'opérateur  $b$  pour la valeur propre  $z$ . Un tel état est appelé "état comprimé"<sup>†</sup>. Les états cohérents étudiés au paragraphe précédent, correspondent au cas  $\lambda_0 = 1$ ,  $\mu_0 = 0$  et  $z = f$ .

Nous développons  $|G\rangle$  sur la base standard :

$$|G\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle \quad \text{avec} \quad \lambda_0 \sqrt{n+1} C_{n+1} + \mu_0 \sqrt{n} C_{n-1} = z C_n$$

A l'instant  $t$  l'état est  $|\psi\rangle = \sum_n C_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |u_n\rangle$ . Posons  $K_n(t) := C_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}$ .

Il vient

$$|\psi\rangle = \sum_n K_n |u_n\rangle \quad \text{avec} \quad \lambda_0 e^{i\omega t} \sqrt{n+1} K_{n+1} + \mu_0 e^{-i\omega t} \sqrt{n} K_{n-1} = z K_n$$

<sup>†</sup>Nous justifierons plus loin la dénomination "état comprimé".

A l'instant  $t$  l'état  $|\psi\rangle$  est encore un état comprimé, comme à l'instant initial, cependant les valeurs de  $\lambda_0$  et  $\mu_0$  ont été modifiées :  $\lambda_0 \rightarrow \lambda_0 e^{i\omega t} = \lambda$  et  $\mu_0 \rightarrow \mu_0 e^{-i\omega t} = \mu$ .

Des calculs sans difficultés conduisent aux valeurs suivantes :

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{2}} ((\lambda - \mu) \bar{z} + (\bar{\lambda} - \bar{\mu}) z) \quad \text{et} \quad \Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} |\lambda - \mu| \\ \langle p \rangle &= \frac{i\hbar}{\sqrt{2} \sigma} ((\lambda + \mu) \bar{z} - (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) z) \quad \text{et} \quad \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2} \sigma} |\lambda + \mu|\end{aligned}$$

Lorsque  $\lambda$  et  $\mu$  présentent la même phase il vient  $\lambda = |\lambda| e^{i\theta}$  et  $\mu = |\mu| e^{i\theta}$  avec  $|\lambda|^2 - |\mu|^2 = 1$ , ce qui implique

$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ . Dans ce cas le paquet d'onde est minimum. Ceci se répète de façon périodique au cours du temps. En effet, posons  $\lambda_0 = |\lambda_0| e^{i\theta_\lambda}$  et  $\mu_0 = |\mu_0| e^{i\theta_\mu}$ ;  $\lambda$  et  $\mu$  présentent la même phase aux instants  $t$  tels que  $\theta_\lambda + \omega t = \theta_\mu - \omega t + 2N\pi$ , soit  $2\omega t = (\theta_\mu - \theta_\lambda + 2N\pi)$  où  $N$  est un entier.

Posons  $\lambda_0 = \cosh \theta$  et  $\mu_0 = e^{-i\phi} \sinh \theta$ . Il vient

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \sqrt{\cosh 2\theta - \sinh 2\theta \cdot \cos(2\omega t + \phi)} \quad \text{et} \quad \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2} \sigma} \sqrt{\cosh 2\theta + \sinh 2\theta \cdot \cos(2\omega t + \phi)}$$

L'écart quadratique moyen  $\Delta x$  est une fonction périodique du temps. Nous retrouvons ici, dans un cas particulier, un résultat précédemment établi (cf. le paragraphe 7.5.1 ci-dessus).

Pour fixer les idées, nous représentons le graphe des fonctions  $\Delta x(t)$ ,  $\Delta p(t)$  et du produit  $\Delta x \Delta p$  dans le cas  $\cosh 2\theta = 10$  (figure 7-6).

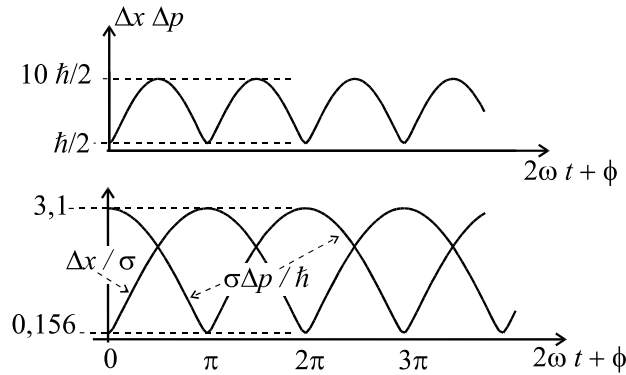


Figure 7-6.

Les fonctions  $\Delta x(t)$ ,  $\Delta p(t)$  présentent la même période  $\pi/\omega$  tandis que le produit possède une période moitié.

$\Delta x$  n'est pas constant, non plus que  $\Delta p$ . A certains instants (tels que  $2\omega t + \phi = 2N\pi$ ) l'indétermination sur  $x$  est minimale. Il faut alors concéder une indétermination maximale sur  $p$ . Dans ces conditions on considère que l'indétermination sur  $x$  est "comprimée", ce qui justifie la dénomination "**état comprimé**" donné à un tel état de l'oscillateur.

## 7.6 Champs quantiques

L'oscillateur harmonique n'est pas seulement le modèle qui décrit le mouvement d'un point matériel au voisinage d'une position d'équilibre stable quelconque, c'est aussi un modèle pour la quantification des champs et l'introduction des quanta correspondants : le photon pour les ondes électromagnétiques, le phonon pour les ondes élastiques ou la particule de matière pour les ondes de de Broglie.

Considérons le cas simple d'une onde qui se propage le long de l'axe  $Ox$  d'un repère galiléen à la célérité  $c$  de la lumière dans le vide. L'équation satisfaite par l'onde est  $\frac{\partial^2 \psi}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0$ . Supposons que ce rayonnement soit piégé dans une cavité, entre  $x = 0$  et  $x = L$ . Nous avons vu<sup>†</sup> que, sans préjuger de l'équation de propagation, l'état le plus général est, à chaque instant, de la forme

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_n q_n \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) \text{ pour } 0 < x < L \\ \psi &= 0 \text{ pour } x < 0 \text{ ou } x > L.\end{aligned}$$

Les coefficients  $q_n$  sont des fonctions du temps car l'onde se propage dans la cavité et se réfléchit aux extrémités de la cavité,  $\psi$  est donc sans cesse modifié. Nous portons l'expression de  $\psi$  dans l'équation de propagation. Il vient

$$\frac{d^2 q_n}{dt^2} + \omega_n^2 q_n = 0 \text{ avec } \omega_n = \frac{n\pi c}{L}$$

On constate que  $q_n$  satisfait l'équation d'un oscillateur harmonique classique de pulsation  $\omega_n$ .

- Lorsque l'on prend, pour expression de  $q_n$ , une solution classique,  $q_n = q_n(t)$ , on obtient l'expression d'une onde classique.
- On peut cependant considérer que  $q_n$  est semblable à la variable de position d'un oscillateur quantique. L'énergie du mode  $n$  est alors quantifiée ( $E_n = n\hbar\omega_n$  en abandonnant l'énergie du point zéro). Dans le cas de la lumière le quantum est un photon, d'énergie  $\hbar\omega_n$ . L'état du mode  $n$  est décrit par un vecteur de l'espace des états d'un oscillateur, représenté par une fonction d'onde,  $\varphi(q_n)$ . La variable  $q_n$  n'a pas une valeur bien définie mais est susceptible de prendre une valeur arbitraire avec une certaine probabilité. L'onde lumineuse  $\psi$  a profondément changé de nature, elle est devenue le **champ quantique**  $\psi$ .

## 7.7 Conclusion

L'importance de l'oscillateur harmonique et de sa quantification est considérable en physique.

On fait appel à un tel modèle pour décrire les mouvements moléculaires et les spectres d'émission par exemple. La compression des états doit permettre d'améliorer la sensibilité des appareils de détection basés sur la mesure de petits déplacements (détection mécanique des ondes gravitationnelles par exemple). Cependant, c'est surtout la quantification des champs qui révèle des propriétés nouvelles, insoupçonnables dans le cadre classique.

La quantification du champ électromagnétique est conduite d'une façon similaire à celle que nous avons évoqué au paragraphe 7.6. Les variables de position et d'impulsion,  $q_n$  et  $p_n$ , sont associées aux champs magnétique et électrique, tandis que

---

<sup>†</sup>Voir le paragraphe 1.6.

les opérateurs annihilation et création d'un photon dans le mode  $n$ , sont les opérateurs  $a_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q_n}{\sigma} + \frac{i\sigma}{\hbar} p_n \right)$  et  $a_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q_n}{\sigma} - \frac{i\sigma}{\hbar} p_n \right)$  avec  $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_n}}$ . L'opérateur  $N_n = a_n^+ a_n$  est l'opérateur nombre de photons dans le mode  $n$ .

L'état fondamental du mode  $n$  est noté  $|u_0\rangle_n$ . Par la suite, afin d'alléger les notations nous abandonnons l'indice  $n$ .

Il n'y a pas de photons dans l'état fondamental. En effet  $N |u_0\rangle = 0$ . L'état représenté par  $|u_0\rangle_n$  est le **vide quantique** du mode  $n$ . On vérifie la nullité de  $\langle q \rangle$  et  $\langle p \rangle$ , valeurs moyennes prises sur le vide. Ceci s'interprète comme la nullité des champs magnétique et électrique en théorie classique. Les valeurs moyennes de  $a^+ + a$  et  $a^+ - a$  sont nulles mais il leur subsiste une indétermination. On vérifie, par exemple, la relation  $\langle (a + a^+)^2 \rangle = \langle a^+ u_0 | a^+ u_0 \rangle = 1$ . Ces indéterminations conduisent à l'indétermination des champs électrique et magnétique que l'on peut interpréter comme des fluctuations de ces champs. Ces indéterminations ont des effets observables : influence sur les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène (déplacement de Lamb), attraction de deux conducteurs très proches l'un de l'autre (effet Casimir), corrections à apporter au rapport gyromagnétique de l'électron tel qu'il se déduit de l'équation de Dirac (moment magnétique anormal de l'électron). Le vide quantique apparaît comme un état qui ne présente pas "l'indifférence" du vide classique mais qui, au contraire, agit sur les systèmes physiques les plus divers.

## Annexe

Deux fonctions d'onde proportionnelles décrivent le même état physique (page 26). Le facteur de proportionnalité dépend éventuellement du temps. Considérons les fonctions  $\psi(t, \vec{r})$  et  $\varphi(t, \vec{r}) = e^{i\theta(t)} \cdot \psi(t, \vec{r})$  où  $\theta$  est une fonction réelle du temps. Ces deux fonctions décrivent le même état physique.

Le produit scalaire  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \iiint \bar{\psi}_1(t, \vec{r}) \cdot \psi_2(t, \vec{r}) d^3r = \iiint \bar{\varphi}_1(t, \vec{r}) \cdot \varphi_2(t, \vec{r}) d^3r$  conserve la même forme que l'on utilise les fonctions  $\psi$  ou  $\varphi$  pour représenter les états (ce ne serait pas le cas si on posait  $\varphi(t, \vec{r}) = f(t) \cdot \psi(t, \vec{r})$  avec  $|f(t)| \neq 1$ ). Dans ces conditions nous pouvons choisir la "représentation  $\varphi$ " de préférence à la "représentation  $\psi$ " sans modification de la théorie quantique exposée ici. L'équation d'évolution est cependant modifiée.

L'équation satisfaite par  $\psi$  s'écrit  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi$ ; nous en déduisons

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = e^{i\theta(t)} \cdot i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - \hbar \frac{d\theta}{dt} e^{i\theta(t)} \cdot \psi(t, \vec{r}) = e^{i\theta(t)} H \psi - \hbar \frac{d\theta}{dt} e^{i\theta(t)} \psi.$$

La quantité  $e^{i\theta(t)}$  n'est pas un opérateur, c'est un scalaire et par conséquent  $e^{i\theta(t)} \times H[\psi] = H[e^{i\theta(t)} \psi] = H\varphi$ . On en déduit l'équation d'évolution de  $\varphi$  sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left( H - \hbar \frac{d\theta}{dt} \right) \varphi = \tilde{H} \varphi$$

L'hamiltonien  $H = \frac{p^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$  est devenu  $\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \hbar \frac{d\theta}{dt}$ .

L'énergie potentielle  $V(\vec{r})$  s'est accrue de la "constante"  $-\hbar \frac{d\theta}{dt}$ .

Réciproquement, si on ajoute à l'énergie potentielle une constante  $V_0$  (éventuellement une fonction arbitraire du temps), il existe une représentation telle que la forme prise par la théorie quantique n'est pas modifiée (à l'exception de l'énergie potentielle

puisqu'on lui a ajouté  $V_0$ ) : les propriétés mathématiques de la fonction d'onde, l'expression de la densité de présence, de la densité de courant, du produit scalaire, les axiomes de la mesure, etc restent inchangés. Pour déterminer la nouvelle représentation, c'est à dire  $\theta$ , il suffit de poser  $-\hbar \frac{d\theta}{dt} = V_0$ .