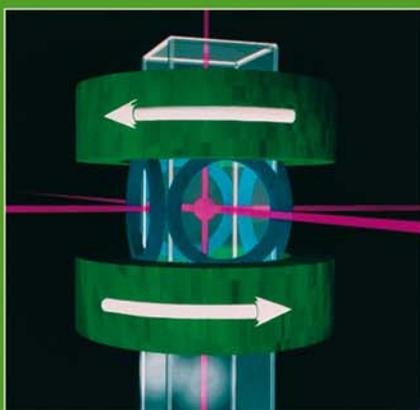


SAVOIRS

ACTUELS

PHYSIQUE • QUANTIQUE

2E ÉDITION



•
MICHEL LE BELLAC

CNRS ÉDITIONS

Illustration de couverture : Vue d'artiste d'un piège magnéto-optique (chapitre 15). Ces pièges sont devenus un outil de base de la physique atomique, et ils servent en particulier dans l'obtention de condensats de Bose-Einstein (chapitre 14). © National Institute of Standards and Technology (NIST) / Science Photo Library.

© 2007, **EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A
et
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

ISBN EDP Sciences 978-2-86883-998-5

ISBN CNRS ÉDITIONS 978-2-271-06584-1

Michel Le Bellac

Physique quantique

2^e édition

S A V O I R S A C T U E L S

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Table des matières

Préface de la première édition	xiii
Avant-propos de la première édition	xv
Avant-propos de la deuxième édition	xix
1 Introduction	1
1.1 Structure de la matière	1
1.1.1 Échelles de longueur : de la cosmologie aux particules élémentaires	1
1.1.2 États de la matière	3
1.1.3 Constituants élémentaires	6
1.1.4 Interactions (ou forces) fondamentales	8
1.2 Physique classique et physique quantique	10
1.3 Un peu d'histoire	14
1.3.1 Le rayonnement du corps noir	14
1.3.2 L'effet photoélectrique	17
1.4 Ondes et particules : interférences	19
1.4.1 Hypothèse de de Broglie	19
1.4.2 Diffraction et interférences avec des neutrons froids	20
1.4.3 Interprétation des expériences	23
1.4.4 Inégalités de Heisenberg I	27
1.4.5 Interféromètre de Mach-Zehnder	30
1.5 Niveaux d'énergie	32
1.5.1 Niveaux d'énergie en mécanique classique et modèles classiques de l'atome	32
1.5.2 L'atome de Bohr	35
1.5.3 Ordres de grandeur en physique atomique	37
1.6 Exercices	39
1.7 Bibliographie	45

2	Mathématiques de la mécanique quantique I : dimension finie	47
2.1	Espaces de Hilbert de dimension finie	48
2.2	Opérateurs linéaires sur \mathcal{H}	49
2.2.1	Opérateurs linéaires, hermitiens, unitaires	49
2.2.2	Projecteurs et notation de Dirac	51
2.3	Décomposition spectrale des opérateurs hermitiens	53
2.3.1	Diagonalisation d'un opérateur hermitien	53
2.3.2	Diagonalisation d'une matrice 2×2 hermitienne	55
2.3.3	Ensemble complet d'opérateurs compatibles	56
2.3.4	Opérateurs unitaires et opérateurs hermitiens	58
2.3.5	Fonctions d'un opérateur	58
2.4	Exercices	60
2.5	Bibliographie	63
3	Polarisation : photon et spin 1/2	65
3.1	Polarisation de la lumière et polarisation d'un photon	65
3.1.1	Polarisation d'une onde électromagnétique	65
3.1.2	Polarisation d'un photon	72
3.1.3	Cryptographie quantique	78
3.2	Spin 1/2	81
3.2.1	Moment angulaire et moment magnétique en physique classique	81
3.2.2	Expérience de Stern-Gerlach et filtres de Stern-Gerlach	84
3.2.3	États de spin d'orientation arbitraire	87
3.2.4	Rotation d'un spin 1/2	89
3.2.5	Dynamique et évolution temporelle	95
3.3	Exercices	98
3.4	Bibliographie	103
4	Postulats de la physique quantique	105
4.1	Vecteurs d'état et propriétés physiques	106
4.1.1	Principe de superposition	106
4.1.2	Propriétés physiques et mesure	108
4.1.3	Inégalités de Heisenberg II	114
4.2	Évolution temporelle	116
4.2.1	Équation d'évolution	116
4.2.2	Opérateur d'évolution	118
4.2.3	États stationnaires	120
4.2.4	Inégalité de Heisenberg temporelle	122
4.2.5	Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg	126
4.3	Approximations et modélisation	128
4.4	Exercices	130
4.5	Bibliographie	137

5	Systèmes à nombre de niveaux fini	139
5.1	Chimie quantique élémentaire	139
5.1.1	Molécule d'éthylène	139
5.1.2	Molécule de benzène	142
5.2	Résonance magnétique nucléaire (RMN)	146
5.2.1	Spin 1/2 dans un champ magnétique périodique	147
5.2.2	Oscillations de Rabi	150
5.2.3	Principes de la RMN et de l'IRM	152
5.3	La molécule d'ammoniac	155
5.3.1	La molécule d'ammoniac comme système à deux niveaux	156
5.3.2	La molécule dans un champ électrique : le maser à ammoniac	158
5.3.3	Transitions hors résonance	163
5.4	Atome à deux niveaux	166
5.4.1	Absorption et émission de photons	166
5.4.2	Principes du laser	170
5.5	Exercices	173
5.6	Bibliographie	176
6	États intriqués	177
6.1	Produit tensoriel de deux espaces vectoriels	178
6.1.1	Définition et propriétés du produit tensoriel	178
6.1.2	Système de deux spins 1/2	180
6.2	Opérateur statistique (ou opérateur densité)	182
6.2.1	Définition et propriétés	182
6.2.2	Opérateur statistique réduit	185
6.2.3	Opérateur statistique pour un système à deux niveaux	190
6.2.4	Non-unicité de la préparation	193
6.2.5	Dépendance temporelle de l'opérateur statistique	195
6.2.6	Postulats	197
6.3	Corrélations quantiques	198
6.3.1	États de Bell et de Hardy	198
6.3.2	Inégalités de Bell	202
6.3.3	Contextualité	207
6.4	Décohérence et mesure	208
6.4.1	Définition de la décohérence	208
6.4.2	Modèle pour l'émission spontanée	211
6.4.3	Modèle de von Neumann pour la mesure	212
6.4.4	Modèle de Zurek	215
6.4.5	La réduction du paquet d'ondes	218
6.5	Information quantique	219
6.5.1	Théorème de non-clonage quantique	219
6.5.2	Calcul quantique	222
6.5.3	Téléportation quantique	228

6.6	Exercices	231
6.7	Bibliographie	239
7	Mathématiques de la mécanique quantique II :	
	dimension infinie	241
7.1	Espaces de Hilbert	241
	7.1.1 Définitions	241
	7.1.2 Réalisations d'espaces séparables et de dimension infinie	243
7.2	Opérateurs linéaires sur \mathcal{H}	245
	7.2.1 Domaine et norme d'un opérateur	245
	7.2.2 Conjugaison hermitienne	247
7.3	Décomposition spectrale	249
	7.3.1 Opérateurs hermitiens	249
	7.3.2 Opérateurs unitaires	252
7.4	Exercices	253
7.5	Bibliographie	254
8	Symétries en physique quantique	255
8.1	Transformation d'un état dans une opération de symétrie . . .	256
	8.1.1 Invariance des probabilités dans une opération de symétrie	256
	8.1.2 Théorème de Wigner	259
8.2	Générateurs infinitésimaux	261
	8.2.1 Définitions	261
	8.2.2 Lois de conservation	263
	8.2.3 Relations de commutation des générateurs infinitésimaux	264
8.3	Relations de commutation canoniques	269
	8.3.1 Cas de la dimension $d = 1$	269
	8.3.2 Réalisation explicite et commentaires	271
	8.3.3 L'opération parité	272
8.4	Invariance galiléenne	275
	8.4.1 Hamiltonien en dimension $d = 1$	275
	8.4.2 Hamiltonien en dimension $d = 3$	278
8.5	Exercices	280
8.6	Bibliographie	285
9	Mécanique ondulatoire	287
9.1	Diagonalisation de X et de P ; fonctions d'onde	288
	9.1.1 Diagonalisation de X	288
	9.1.2 Réalisation dans $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$	290
	9.1.3 Réalisation dans $L_p^{(2)}(\mathbb{R})$	292
	9.1.4 Inégalités de Heisenberg	293
	9.1.5 Évolution du paquet d'ondes libre	295

9.2	Équation de Schrödinger	298
9.2.1	Hamiltonien de l'équation de Schrödinger	298
9.2.2	Probabilité de présence et vecteur courant	299
9.3	Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps 302	
9.3.1	Généralités	302
9.3.2	Réflexion et transmission par une marche de potentiel 304	
9.3.3	États liés du puits carré	306
9.3.4	Diffusion par un potentiel	309
9.4	Potentiel périodique	314
9.4.1	Théorème de Bloch	314
9.4.2	Bandes d'énergie	316
9.5	Mécanique ondulatoire en dimension $d = 3$	319
9.5.1	Généralités	319
9.5.2	Espace de phase et densité de niveaux	322
9.5.3	Règle d'or de Fermi	325
9.6	Exercices	329
9.7	Bibliographie	337
10	Moment angulaire	339
10.1	Diagonalisation de \vec{J}^2 et de J_z	339
10.2	Matrices de rotation	343
10.3	Moment angulaire orbital	348
10.3.1	Opérateur moment angulaire orbital	348
10.3.2	Propriétés des harmoniques sphériques	352
10.4	Particule dans un potentiel central	355
10.4.1	Équation d'onde radiale	355
10.4.2	Atome d'hydrogène	360
10.5	Distributions angulaires des désintégrations	364
10.5.1	Rotations de π , parité, réflexion par rapport à un plan 364	
10.5.2	Transitions dipolaires	366
10.5.3	Désintégrations : cas général	371
10.6	Composition de deux moments angulaires	373
10.6.1	Composition de deux spins 1/2	373
10.6.2	Cas général : composition de deux moments angulaires \vec{J}_1 et \vec{J}_2	375
10.6.3	Composition des matrices de rotation	378
10.6.4	Théorème de Wigner-Eckart (opérateurs scalaires et vectoriels)	379
10.7	Exercices	382
10.8	Bibliographie	391

11 Oscillateur harmonique	393
11.1 L'oscillateur harmonique simple	394
11.1.1 Opérateurs de création et d'annihilation	394
11.1.2 Diagonalisation du hamiltonien	395
11.1.3 Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique	398
11.2 États cohérents	400
11.2.1 Définition et propriétés élémentaires	400
11.2.2 Opérateurs de déplacement et de phase	403
11.3 Quantification du champ électromagnétique	407
11.3.1 Quantification d'un mode	408
11.3.2 Cas général	410
11.4 États du champ électromagnétique	418
11.4.1 Fluctuations quantiques du champ électromagnétique	418
11.4.2 Lames séparatrices et détection homodyne	421
11.4.3 Hamiltonien de Jaynes-Cummings	425
11.5 Mouvement dans un champ magnétique	429
11.5.1 Invariance de jauge locale	429
11.5.2 Champ magnétique uniforme : niveaux de Landau	432
11.6 Exercices	435
11.7 Bibliographie	448
12 Méthodes semi-classiques	449
12.1 Propagateurs et fonctions de Green	452
12.1.1 Propagateur de l'équation de Schrödinger	452
12.1.2 Fonctions de Green	453
12.1.3 Propagateur libre	455
12.2 L'intégrale de Feynman-Kač	456
12.2.1 Mouvement brownien et diffusion	456
12.2.2 Propagateur euclidien et fonction de partition	460
12.2.3 Intégrale de chemin de Feynman	463
12.3 Applications de l'intégrale de chemin	465
12.3.1 Oscillateur harmonique	465
12.3.2 Intégrale de chemin en présence d'un champ magnétique	467
12.3.3 L'effet Aharonov-Bohm	470
12.4 L'approximation BKW	473
12.4.1 Forme asymptotique de la fonction d'onde	473
12.4.2 Formules de raccordement	475
12.4.3 Phénomène de Stokes	477
12.4.4 États liés	479
12.4.5 Effet tunnel	482
12.5 Mécanique quantique dans l'espace de phase	485
12.5.1 Conditions pour une représentation dans l'espace de phase	485
12.5.2 La distribution de Wigner	488
12.5.3 Distribution de Wigner pour les états purs	490

12.6	Théorème adiabatique et phases géométriques	491
12.6.1	Un exemple	491
12.6.2	Théorème adiabatique	494
12.6.3	La phase géométrique	496
12.7	Exercices	498
12.8	Bibliographie	508
13	Théorie élémentaire de la diffusion	509
13.1	Section efficace et amplitude de diffusion	509
13.1.1	Sections efficaces différentielle et totale	509
13.1.2	Amplitude de diffusion	512
13.2	Ondes partielles et déphasages	515
13.2.1	Développement en ondes partielles	515
13.2.2	Diffusion à basse énergie	519
13.2.3	Potentiel effectif	523
13.2.4	Diffusion neutron-proton à basse énergie	525
13.3	Diffusion inélastique	527
13.3.1	Théorème optique	527
13.3.2	Potentiel optique	530
13.4	Développements formels	531
13.4.1	Équation intégrale de la diffusion	531
13.4.2	Diffusion d'un paquet d'ondes	533
13.5	Exercices	536
13.6	Bibliographie	544
14	Particules identiques	545
14.1	Bosons et fermions	546
14.1.1	Symétrie ou antisymétrie du vecteur d'état	546
14.1.2	Spin et statistique	552
14.2	Diffusion de particules identiques	556
14.3	États collectifs de fermions	559
14.3.1	Le gaz de Fermi à température nulle	559
14.3.2	Opérateurs de création et d'annihilation	561
14.3.3	Opérateurs de champ et hamiltonien	564
14.3.4	Autres formes du hamiltonien	568
14.4	États collectifs de bosons	571
14.4.1	La condensation de Bose-Einstein	571
14.4.2	L'équation de Gross-Pitaevskii	575
14.4.3	L'approximation de Bogoliubov	578
14.5	Exercices	582
14.6	Bibliographie	588

15 Atomes à un électron	589
15.1 Méthodes d'approximation	589
15.1.1 Généralités	589
15.1.2 Cas d'une valeur propre simple de H_0	591
15.1.3 Cas d'un niveau dégénéré	592
15.1.4 Méthode variationnelle	593
15.2 Atomes à un électron	595
15.2.1 Niveaux d'énergie en l'absence de spin	595
15.2.2 Structure fine	595
15.2.3 Effet Zeeman	598
15.2.4 Structure hyperfine	600
15.3 Interaction atome-champ électromagnétique	602
15.3.1 Théorie semi-classique	602
15.3.2 Approximation dipolaire	604
15.3.3 Effet photoélectrique	606
15.3.4 Champ électromagnétique quantifié : émission spontanée	609
15.3.5 Décohérence par émission de photons	614
15.4 Corrélations de photons	617
15.4.1 Détection de photons et fonctions de corrélation	617
15.4.2 Cohérences	620
15.4.3 Expérience de Hanbury Brown et Twiss	623
15.5 Manipulation d'atomes par laser	626
15.5.1 Équations de Bloch optiques	626
15.5.2 Forces dissipatives et forces réactives	630
15.5.3 Refroidissement Doppler	632
15.5.4 Piège magnéto-optique	638
15.6 Exercices	639
15.7 Bibliographie	649
16 Atomes complexes et molécules	651
16.1 L'atome à deux électrons	651
16.1.1 L'état fondamental de l'atome d'hélium	651
16.1.2 États excités de l'atome d'hélium	654
16.2 Modèle en couches de l'atome	656
16.2.1 Potentiel effectif	656
16.2.2 Couplage spin-orbite	658
16.3 Molécules diatomiques	660
16.3.1 Fonctions d'onde électroniques	660
16.3.2 Niveaux de rotation-vibration	663
16.4 Exercices	664
16.5 Bibliographie	668

17 Systèmes quantiques ouverts	669
17.1 Superopérateurs	671
17.1.1 Représentation de Kraus	671
17.1.2 Modèle pour l'amortissement de phase	675
17.2 Équations pilotes : la forme de Lindblad	677
17.2.1 L'approximation markovienne	677
17.2.2 L'équation de Lindblad	679
17.2.3 Exemple : l'oscillateur harmonique amorti	681
17.3 Couplage à un bain thermique d'oscillateurs	683
17.3.1 Équations d'évolution exactes	683
17.3.2 Dédution de l'équation pilote	685
17.3.3 Relaxation d'un système à deux niveaux	688
17.3.4 Mouvement brownien quantique	691
17.3.5 Décohérence d'un paquet d'ondes	696
17.4 Exercices	697
17.5 Bibliographie	704
Appendice A : Théorème de Wigner et renversement du temps	705
A.1 Démonstration du théorème	706
A.2 Renversement du sens du temps	708
Appendice B : Méthode de Wigner et Weisskopf	715
Appendice C : Constantes physiques	721
Références	723
Index	733

Préface de la première édition

LA NAISSANCE DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE date d'un siècle et cette description des phénomènes physiques, qui a transformé notre vision du monde, n'est toujours pas remise en cause, ce qui est exceptionnel pour une théorie scientifique. Ses prédictions ont toujours été vérifiées par l'expérience avec une précision impressionnante. Les concepts fondamentaux, comme les amplitudes de probabilité, les superpositions linéaires d'états, qui semblent si étranges pour notre intuition lorsqu'on les rencontre pour la première fois, restent toujours essentiels. Une évolution importante s'est cependant manifestée au cours des dernières décennies. Les progrès spectaculaires des techniques d'observation, des méthodes de manipulation des atomes, permettent maintenant de réaliser des expériences si délicates qu'elles n'étaient considérées que comme des « expériences de pensée » par les pères fondateurs de la mécanique quantique. L'existence de corrélations quantiques « non séparables », qui est à la base du « paradoxe » de Einstein–Podolsky–Rosen et qui viole les fameuses inégalités de Bell, a pu être confirmée expérimentalement avec une grande précision. Les états « intriqués » de deux systèmes, qui manifestent de telles corrélations quantiques, sont mieux compris, et sont même utilisés pour des applications concrètes, comme la cryptographie quantique. L'intrication d'un appareil de mesure avec son environnement se révèle une piste intéressante pour une meilleure compréhension du processus de mesure.

Parallèlement à ces progrès conceptuels, on assiste également à une invasion de notre monde quotidien par des dispositifs dont le principe de fonctionnement repose sur des phénomènes quantiques. Les sources laser qui sont utilisées pour la lecture des disques compacts, l'ophtalmologie ou les télécommunications optiques, sont basées sur l'amplification de lumière par des systèmes atomiques dont les populations sont inversées. La résonance magnétique des noyaux des atomes est couramment utilisée dans les hôpitaux pour prendre des images de plus en plus précises des organes du corps humain. Des millions de transistors sont inclus dans les puces qui permettent à nos ordinateurs d'effectuer des opérations à des vitesses prodigieuses.

Il est donc clair qu'un enseignement moderne de la physique quantique doit tenir compte de ces développements, pour donner à l'étudiant ou au chercheur qui désire s'instruire une image plus précise des progrès réalisés et pour accroître sa motivation de mieux comprendre des phénomènes physiques dont

l'importance conceptuelle et pratique est de plus en plus évidente. C'est ce défi qu'essaie de relever avec succès Michel Le Bellac dans le présent ouvrage.

Chacun des 14 chapitres de ce livre contient en effet, en plus d'un exposé clair et concis des notions de base, de nombreuses discussions présentant des développements conceptuels ou expérimentaux très récents, qui permettent au lecteur de se faire une idée précise des avancées de la discipline et de ses grandes tendances d'évolution. Le chapitre 6 sur les états intriqués est bien caractéristique d'un tel choix de présentation. Au lieu de mettre l'accent sur les propriétés mathématiques du produit tensoriel de deux espaces d'états, ce qui est un peu austère et rébarbatif, ce chapitre préfère centrer la discussion sur la notion d'intrication, et introduire de nombreux exemples de développements théoriques et expérimentaux (dont certains sont très nouveaux) : inégalités de Bell, tests de ces inégalités, en particulier les plus récents utilisant la conversion paramétrique, les états GHZ (Greenberger, Horne, Zeilinger), la notion de décohérence illustrée par des expériences modernes d'électrodynamique quantique en cavité, et qui sera reprise plus en détail dans une annexe, la téléportation. Comme on le voit, il est difficile d'imaginer une immersion plus complète dans l'un des domaines les plus actifs actuellement de la physique quantique. De nombreux exemples de présentation moderne peuvent être donnés à propos d'autres chapitres : interférences d'ondes de de Broglie réalisées avec des neutrons lents ou des atomes refroidis par laser ; microscopie à effet tunnel ; fluctuations du champ quantique et effet Casimir ; transformations de jauge non abéliennes ; équations de Bloch optiques ; forces radiatives exercées par des faisceaux laser sur les atomes ; piège magnéto-optique ; oscillations de Rabi dans le vide d'une cavité, etc.

Je suis vraiment admiratif devant l'effort fait par l'auteur pour donner à son lecteur une vision si moderne et si attrayante de la physique quantique. Certes, les développements décrits ne peuvent pas toujours être analysés en grand détail, et le lecteur devra fournir un effort personnel pour parvenir à une compréhension plus approfondie du sujet étudié. Il sera aidé en cela par la bibliographie détaillée qu'il trouvera, soit au cours du chapitre sous forme de notes en bas de page, soit à la fin de chaque chapitre. Je suis convaincu qu'un tel ouvrage permettra une meilleure compréhension de la physique quantique et stimulera un plus grand intérêt pour cette discipline aussi centrale. Je remercie Michel Le Bellac pour cette contribution importante qui va certainement donner une image plus vivante de la physique.

Claude Cohen-Tannoudji

Avant-propos de la première édition

CE LIVRE EST ISSU DE COURS DONNÉS À NICE DANS LES ANNÉES 1970–1980, en maîtrise de physique et en DEUG MP deuxième année, et plus récemment en licence et en maîtrise de physique. Les dix premiers chapitres correspondent à un cours de base de mécanique quantique niveau licence et les quatre derniers chapitres peuvent servir comme complément de cours en maîtrise, par exemple pour un cours de physique atomique. Le livre contient environ 130 exercices de longueur et de difficulté variées; plus des trois quarts de ces exercices ont été effectivement utilisés pour des séances de travaux dirigés ou des examens. Les corrigés d’une sélection de ces exercices sont disponibles sur le site web http://livres.edpsciences.org/livres/sa_physique_quantique/

En plus des étudiants de second cycle et des Écoles d’Ingénieurs, ce livre est susceptible d’intéresser un large public de physiciens : étudiants de DEA ou de thèse, chercheurs, enseignants du second degré ou du supérieur souhaitant rafraîchir leurs connaissances en physique quantique. Il contient des développements récents qui ne figurent pas dans les manuels classiques : états intriqués, cryptographie et calcul quantiques, expériences sur la décohérence, interaction d’un champ laser avec un atome à deux niveaux, fluctuations quantiques du champ électromagnétique, manipulation d’atomes par laser, etc., ainsi qu’en annexe un exposé succinct des idées actuelles sur la mesure en mécanique quantique.

L’organisation du livre diffère profondément de celle des textes classiques, qui prennent tous comme point de départ l’équation de Schrödinger et l’étudiant dans diverses configurations, ce qui oblige à exposer les principes de base de la mécanique quantique dans un cas qui n’est pas le plus simple et a l’inconvénient de masquer ces principes par des calculs souvent fastidieux. Je me suis efforcé au contraire de présenter les fondements de la mécanique quantique sur les exemples les plus simples et l’équation de Schrödinger apparaît seulement au chapitre 9. L’approche suivie consiste à mener jusqu’à son terme la logique qu’avait adoptée Feynman (Feynman *et al.* [1965]) : développer au maximum une approche algébrique et exploiter les symétries,

en présentant la mécanique quantique dans son cadre autonome, sans faire référence à la physique classique. Cette logique a de nombreux avantages.

- L'approche algébrique permet de traiter des problèmes simples dans des espaces de dimension finie, par exemple de dimension deux : polarisation d'un photon, spin $1/2$, atome à deux niveaux. . .
- Cette approche permet d'énoncer de la façon la plus claire les postulats de la mécanique quantique, en séparant ce qui est fondamental de ce qui ne l'est pas (par exemple le principe de correspondance n'est pas un postulat fondamental).
- L'exploitation des propriétés de symétrie permet l'introduction la plus générale des grandeurs physiques fondamentales : impulsion, moment angulaire. . . comme générateurs infinitésimaux de ces symétries, sans faire appel au principe de correspondance et à un analogue classique.
- Un dernier avantage est que le lecteur qui souhaite s'initier aux développements récents de l'information quantique peut se limiter aux six premiers chapitres. On peut parfaitement comprendre les bases de la cryptographie quantique sans être passé au préalable par le développement de la fonction d'onde en harmoniques sphériques et la résolution de l'équation de Schrödinger dans un potentiel central !

Les aspects pédagogiques ont fait l'objet d'une attention particulière. La progression des chapitres a été soigneusement étudiée, les premiers chapitres utilisant uniquement les espaces de dimension finie ; c'est seulement une fois les bases acquises que l'on passe au cas général à partir du chapitre 7, tandis que les chapitres 11 à 14 et les annexes font appel à des techniques plus avancées qui pourront intéresser les physiciens professionnels. Un effort a été porté sur le vocabulaire, afin d'éviter certaines expressions historiquement datées et qui peuvent être un obstacle à la compréhension de la mécanique quantique : suivant la modernisation du vocabulaire préconisée par Lévy-Leblond, « grandeur physique » est utilisé au lieu d'« observable », « inégalité de Heisenberg » au lieu de « principe d'incertitude », des expressions comme « complémentarité » ou « dualité onde-corpuscule » ont été évitées, etc.¹

Les chapitres clés du livre, c'est-à-dire ceux qui divergent de la façon la plus évidente de l'exposé traditionnel, sont les chapitres 3, 4, 5, 6, et 8. Le chapitre 3 introduit l'espace des états sur l'exemple de la polarisation des photons et montre comment passer d'une amplitude ondulatoire à une amplitude de probabilité. Le spin $1/2$ introduit d'emblée le lecteur à un problème sans analogue classique (ou si peu. . .). Les propriétés essentielles du spin $1/2$ (algèbre des matrices de Pauli, matrices de rotation. . .) sont obtenues à partir des

1. J.-M. Lévy-Leblond « Mots et maux de la physique quantique » *Bull. U. Phys.* **816**, 1129 (1999).

deux seules hypothèses : (1) la dimension deux de l'espace des états ; (2) l'invariance par rotation. La précession de Larmor du spin quantique permet d'introduire l'équation d'évolution. Ce chapitre prépare le lecteur à l'énoncé des postulats de la mécanique quantique au chapitre suivant : il lui est possible dans chaque cas d'illustrer ces postulats de façon concrète en revenant aux exemples du chapitre 3. La distinction entre le cadre conceptuel général de la mécanique quantique et la modélisation d'un problème concret est soigneusement expliquée. Le chapitre 5 met en pratique la mécanique quantique sur des applications simples et physiquement importantes, dans le cas de systèmes dont le nombre de niveaux est fini, avec comme cas particulier la diagonalisation d'un hamiltonien en présence d'une symétrie périodique. Ce chapitre introduit également sur l'exemple de la molécule d'ammoniac l'interaction d'un système à deux niveaux atomique ou moléculaire avec un champ électromagnétique et les notions fondamentales d'émission et d'absorption.

Le chapitre 6 est consacré aux états intriqués. On s'est rendu compte de l'importance de ces états depuis le début des années 1980, mais ils sont ignorés par la plupart des manuels, à l'exception notable de celui de Basdevant et Dalibard [2001]. Ce chapitre traite aussi bien des applications fondamentales : inégalités de Bell, interférences à deux photons, théorie de la mesure, que des applications concrètes potentielles à l'information quantique. Le chapitre 8 a comme objectif l'étude des symétries à partir du théorème de Wigner, qui est généralement ignoré des manuels malgré son importance cruciale. La symétrie de rotation permet de définir le moment angulaire comme générateur infinitésimal, et de démontrer immédiatement les relations de commutation de \vec{J} en soulignant leur origine géométrique. Les relations de commutation canoniques de X et P sont déduites de l'identification de l'impulsion comme générateur infinitésimal des translations. Enfin, on obtient la forme la plus générale du hamiltonien compatible avec l'invariance galiléenne, moyennant une hypothèse sur la loi de transformation de la vitesse. Ce hamiltonien sera réinterprété ultérieurement dans le cadre de l'invariance de jauge locale.

Les autres chapitres peuvent se résumer comme suit. Le chapitre 1 poursuit un triple objectif : (1) introduire des notions de base de physique microscopique auxquelles il sera fait appel dans la suite du livre ; (2) introduire le comportement des particules quantiques, la conventionnelle « dualité onde-corpuscule » ; (3) à l'aide de l'atome de Bohr, expliquer simplement la notion de niveau d'énergie et de spectre de niveaux. Le chapitre 2 présente les notions essentielles sur l'espace de Hilbert dans le cas de la dimension finie. Le chapitre 7 donne quelques indications sur les espaces de Hilbert de dimension infinie ; le but n'est évidemment pas de traiter les mathématiques de façon rigoureuse, mais de prévenir le lecteur de certaines difficultés de la dimension infinie.

Les six derniers chapitres sont consacrés à des applications plus classiques. Le chapitre 9 présente la mécanique ondulatoire et ses applications usuelles (effet tunnel, états liés du puits carré, potentiel périodique...). Les relations

de commutation du moment angulaire ayant été établies au chapitre 8, le chapitre 10 débute par la construction des états propres de \vec{J}^2 et J_z et se termine par le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels. Le chapitre 11 développe la théorie de l'oscillateur harmonique et celle du mouvement dans un champ magnétique constant, ce qui est l'occasion de donner quelques explications sur l'invariance de jauge locale. Une section importante traite des champs quantifiés : champ de vibrations et phonons, champ électromagnétique et ses fluctuations quantiques. Les chapitres 12 et 13 sont consacrés à la diffusion et aux particules identiques. Enfin le chapitre 14 est une brève introduction à la physique de l'atome à un électron, l'objectif principal étant de calculer les forces sur un atome à deux niveaux placé dans le champ d'un laser et d'en discuter les applications, dont le refroidissement Doppler et les pièges magnéto-optiques.

Les annexes contiennent des sujets qui sont techniquement un peu plus exigeants. La démonstration du théorème de Wigner et l'opération de renversement du sens du temps sont expliquées en détail. Des compléments sur la théorie et les expériences sur la décohérence et une discussion des idées actuelles sur la mesure se trouvent dans l'annexe B. Enfin l'annexe C contient une discussion de la méthode de Wigner et Weisskopf pour les états instables.

Remerciements. J'ai bénéficié des critiques et suggestions de Pascal Baldi, Jean-Pierre Farges, Yves Gabellini, Thierry Grandou, Jacques Joffrin, Christian Miniatura et tout particulièrement de Michel Brune (à qui je suis aussi redevable des figures 6.9, B.1 et B.2), Jean Dalibard, Fabrice Mortessagne, Jean-Pierre Romagnan et François Rocca qui ont lu de larges extraits, ou parfois même l'intégralité du manuscrit. Je remercie également David Wilkowski qui a inspiré le texte de plusieurs exercices du chapitre 14. Je suis bien entendu entièrement responsable du texte final. L'aide de Karim Bernardet et de Fabrice Mortessagne, qui m'a initié à XFIG et installé le logiciel, a été décisive dans la réalisation des figures, et je tiens à remercier Christian Taggiasco pour sa compétence et sa disponibilité dans l'installation et la maintenance de l'ensemble des logiciels nécessaires. Enfin ce livre n'aurait pas vu le jour sans les encouragements et le soutien sans faille de Michèle Leduc, et je suis très reconnaissant à Claude Cohen-Tannoudji qui a bien voulu le préfacer.

Nice, mars 2003
Michel Le Bellac

N.B. Cet ouvrage utilise le point décimal.

Avant-propos de la deuxième édition

J'AI SOUHAITÉ FAIRE DE CETTE SECONDE ÉDITION un ouvrage qui puisse servir aussi bien de manuel d'enseignement que de référence (ou du moins d'introduction à la littérature) pour des sujets qui ont pris aujourd'hui une grande importance : états intriqués, décohérence, information quantique, états du champ électromagnétique, intégrale de chemin, atomes froids, condensats de Bose-Einstein, équations pilotes pour les systèmes ouverts, etc. Cette seconde édition, contrairement à la première qui était avant tout un livre d'enseignement, couvre une trop grande variété de sujets pour qu'elle puisse encore correspondre à un cours de première année de master (M1). Un guide de lecture est proposé au lecteur afin de lui permettre de s'orienter dans un cours d'introduction à la mécanique quantique.

Je résume maintenant les principales différences par rapport à la première édition. J'ai complété le chapitre 1 par une sous-section 1.4.5 sur les lames séparatrices et l'interféromètre de Mach-Zehnder. Le chapitre 5 (Systèmes à nombre de niveaux fini) a été remanié : une nouvelle section (5.2) est consacrée à la RMN, comme exemple d'application des oscillations de Rabi, et une courte sous-section (5.4.2) expose le principe du laser. Le chapitre 6 (États intriqués) a été réécrit à 80 %. La théorie de l'opérateur statistique (ou densité) a été considérablement développée, ainsi que celles de la décohérence et de la mesure. La section 6.5 sur l'informatique quantique a été complétée par une analyse détaillée du théorème de non-clonage quantique et de l'algorithme de recherche de Grover. Dans le chapitre 9 (Mécanique ondulatoire), j'ai supprimé plusieurs passages sur les puits et barrières de potentiel en crêteau. Le chapitre 11 (Oscillateur harmonique) a été complété par une discussion détaillée des états cohérents, de la quantification et des états du champ électromagnétique et par des applications : détection homodyne, électrodynamique en cavité. Le chapitre 12 (Méthodes semi-classiques) est entièrement nouveau. Il traite de l'intégrale de chemin, aussi bien dans son aspect temps réel que temps euclidien, de la méthode BKW, de la distribution de Wigner et de la phase géométrique. On trouve maintenant dans le chapitre 14 (Particules identiques, ancien chapitre 13) une introduction à la « seconde quantification » ainsi qu'aux condensats de Bose-Einstein. Une section (15.4)

sur la détection et le comptage de photons a été ajoutée au chapitre 15. Le chapitre 16 (nouveau) contient une courte introduction aux atomes complexes et aux molécules diatomiques, et le chapitre 17 (également nouveau) une introduction aux équations pilotes des systèmes quantiques ouverts : équations de Lindblad, relaxation de systèmes à deux niveaux, mouvement brownien quantique. Compte tenu de la nouvelle rédaction du chapitre 6, l'ancien appendice B a été supprimé.

Guide de lecture

Seules les sections 1.3 à 1.5 du chapitre 1 sont indispensables pour la suite, et le chapitre 2 peut être omis par le lecteur qui possède le niveau L2 en algèbre. Les chapitres 3 et 5 constituent, à mon avis, le cœur d'une introduction à la mécanique quantique : les principes de base sont introduits sur les exemples de la polarisation du photon et du spin $1/2$, et le rôle de la symétrie de rotation est mis en valeur dans le cas du spin $1/2$. Des applications simples de ces principes de base sont exposées dans le chapitre 5 : résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour des problèmes de chimie quantique élémentaire, oscillations de Rabi, atome à deux niveaux, le tout illustré par la RMN et le laser. Le chapitre 4 (Postulats de la mécanique quantique) est un peu plus abstrait : le lecteur pourra se contenter d'une première prise de contact, et y revenir après avoir acquis un peu plus de familiarité avec la mécanique quantique. Dans une première lecture du chapitre 6, on peut se limiter à ce qui sera indispensable pour la suite : section 6.1 (produit tensoriel), § 6.2.1 et § 6.2.3 (opérateur statistique). Il serait toutefois dommage de ne pas consacrer un peu de temps aux inégalités de Bell (§ 6.3.2). Dans le chapitre 7, le lecteur peut se limiter à la section 7.3, qui donne les recettes « mathématiques » pour la suite. Les chapitres 8, 9 et 10 sont classiques dans tout cours de mécanique quantique niveau M1. Toutefois la section 8.4 (invariance galiléenne) peut être omise sans dommage pour la suite, et la section 9.4 (bandes d'énergie) peut trouver sa place dans un cours de physique du solide. Les sections de base du chapitre 11 (Oscillateur harmonique) sont les sections 11.1, 11.2 et 11.3.1. Le lecteur pourra aborder les autres sections en fonction de ses intérêts, et la section 11.5 (niveaux de Landau) peut faire partie d'un cours de physique du solide. Le chapitre 12 (Méthodes semi-classiques) est entièrement optionnel, et ses quatre grandes parties : intégrale de chemin, approximation BKW, distribution de Wigner et phases géométriques sont entièrement indépendantes. Le lecteur pourra se limiter aux sections 14.1 et 14.2 du chapitre 14 (Particules identiques). Enfin les sections 15.1 et 15.2 sont une introduction standard à la physique atomique, les autres sections de ce chapitre étant optionnelles.

En résumé, un cours niveau M1 pourrait reposer sur les sections suivantes. Chapitre 1 : sections 1.3 à 1.5. Chapitres 3, 4 et 5. Chapitre 6 : section 6.1.

Chapitre 7 : section 7.3. Chapitre 8 : sections 8.1 à 8.3. Chapitre 9 : sections 9.1 à 9.3 et 9.5. Chapitre 10 : sections 10.1 à 10.4, 10.6.1 et 10.6.2. Chapitre 11 : sections 11.1, 11.2.1 et 11.3.1. Chapitre 13 : sections 13.1 et 13.2. Chapitre 14 : sections 14.1 et 14.2. Chapitre 15 : sections 15.1 à 15.3.

Remerciements. Je suis très reconnaissant à Yvan Castin, Jean Dalibard, Claude Fabre, Olivier Legrand, Gian-Luca Lippi, Fabrice Mortessagne, Jean-Michel Raimond, Denis Ullmo, et tout particulièrement Christian Miniatura, qui ont accepté de lire un ou plusieurs chapitres de cette nouvelle édition, et je les remercie pour leurs critiques et suggestions.

Chapitre 1

Introduction

LE PREMIER OBJECTIF DE CE CHAPITRE est d'exposer succinctement quelques notions de base sur l'organisation de la matière, en reprenant et en précisant les acquis de cours de physique (et de chimie) antérieurs, et en particulier les notions de physique microscopique ; il s'agira d'un survol, et la grande majorité des énoncés seront donnés sans démonstration et sans discussion détaillée. Le deuxième objectif est de décrire brièvement quelques étapes cruciales des débuts de la physique quantique ; nous ne suivrons ni l'ordre historique strict, ni les arguments qu'utilisèrent au début du siècle dernier les pères fondateurs de la mécanique quantique, mais nous insisterons plutôt sur les concepts qui nous serviront par la suite. Le troisième objectif est d'introduire des notions de base, comme celles de particule quantique ou de niveau d'énergie, qui reviendront de façon récurrente tout au long du livre. Nous nous appuierons sur la théorie de Bohr, qui permet d'expliquer de façon simple, sinon convaincante, la notion de quantification des niveaux d'énergie et le spectre de l'atome d'hydrogène. Ce chapitre est à relire ultérieurement, lorsque les bases de la mécanique quantique auront été explicitées et illustrées par des exemples. D'un point de vue pratique, il est possible de sauter en première lecture les considérations générales des sections 1 et 2 et de commencer ce chapitre par la section 3, quitte à revenir ultérieurement aux deux premières sections lorsqu'il sera fait appel aux notions qui y ont été introduites.

1.1 Structure de la matière

1.1.1 Échelles de longueur : de la cosmologie aux particules élémentaires

Le tableau 1.1 donne l'ordre de grandeur en mètres des dimensions de quelques objets typiques, en partant des dimensions de l'Univers pour descendre à celles de la physique subatomique. Une unité de longueur commode

TAB. 1.1 – Ordres de grandeur de quelques distances typiques en mètres.

Univers connu	rayon de la Galaxie	distance Terre-Soleil	rayon de la Terre	homme	insecte
1.3×10^{26}	$\simeq 5 \times 10^{20}$	1.5×10^{11}	6.4×10^6	$\simeq 1.7$	0.01 à 0.001
bactérie <i>E. coli</i>	virus HIV	fullerène C_{60}	atome	noyau de plomb	proton
$\simeq 2 \times 10^{-6}$	1.1×10^{-7}	0.7×10^{-9}	$\simeq 10^{-10}$	7×10^{-15}	0.8×10^{-15}

pour les distances astrophysiques est l'année-lumière : 1 année-lumière = 0.95×10^{16} m. Les sous-multiples du mètre utiles en physique microscopique sont le micromètre : $1 \mu\text{m} = 10^{-6}$ m, le nanomètre : $1 \text{nm} = 10^{-9}$ m, et le femtomètre (ou fermi) : $1 \text{fm} = 10^{-15}$ m. L'exploration des objets à l'échelle microscopique se fait souvent à l'aide d'un rayonnement électromagnétique¹ dont la longueur d'onde est de l'ordre de grandeur des dimensions caractéristiques de l'objet à étudier (observation au microscope, aux rayons X...). On sait en effet que la limite de résolution est fixée par la longueur d'onde utilisée : quelques fractions de μm pour un microscope utilisant de la lumière visible, quelques fractions de nanomètre pour des rayons X. La gamme des longueurs d'onde du rayonnement électromagnétique (infra-rouge, visible, ...) est résumée dans la figure 1.1.

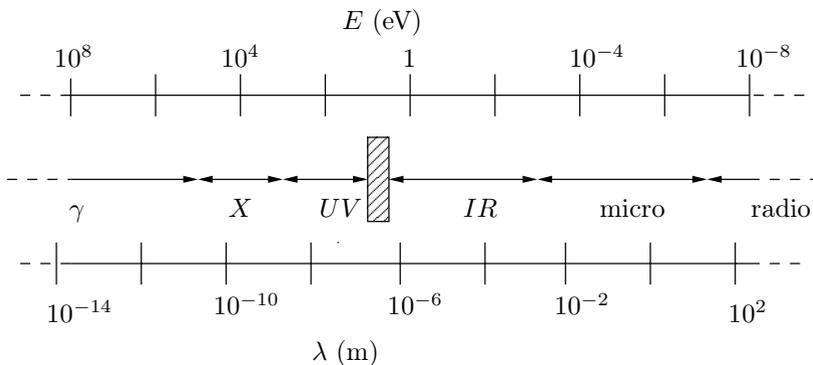


FIG. 1.1 – Longueur d'onde de rayonnements électromagnétiques et énergie des photons correspondants. La boîte hachurée représente le domaine visible. Les frontières entre les différents types de rayonnement (par exemple la frontière entre les rayons γ et les rayons X) ne sont pas définies de façon stricte. Un photon d'énergie $E = 1 \text{eV}$ a une longueur d'onde $\lambda = 1.24 \times 10^{-6}$ m, une fréquence $\nu = 2.42 \times 10^{14}$ Hz et une fréquence angulaire $\omega = 1.52 \times 10^{15} \text{rad.s}^{-1}$.

1. D'autres techniques d'exploration sont la diffusion de neutrons (exercice 1.6.4), la microscopie électronique, la microscopie à effet tunnel (§ 12.4.4), etc.

1.1.2 États de la matière

Nous serons particulièrement intéressés par les phénomènes à l'échelle microscopique, et il est utile de rappeler quelques notions élémentaires sur la description microscopique de la matière. La matière peut se présenter sous deux formes : une forme ordonnée, le solide cristallin, et une forme non ordonnée, liquide, gaz, solide amorphe.

Le solide cristallin présente un *ordre à longue distance*. La figure 1.2 donne l'exemple de la structure microscopique du chlorure de sodium : on constate que le motif du cristal se répète avec une périodicité $l = 0.56$ nm, le pas du réseau. Partant d'un ion chlore ou d'un ion sodium, et suivant une des arêtes de la structure cubique, on retrouvera un ion chlore ou un ion sodium à une distance $n \times 0.56$ nm où n est un nombre entier : c'est ce que l'on appelle un ordre à longue distance.

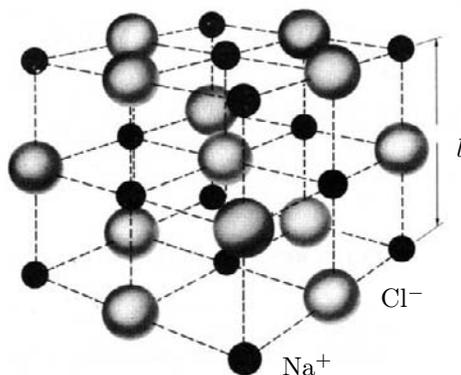


FIG. 1.2 – Arrangement des atomes dans le cristal de chlorure de sodium. Les ions chlore Cl^- sont plus gros que les ions sodium Na^+ .

Les liquides, les gaz et les solides amorphes ne possèdent pas d'ordre à longue distance. Prenons l'exemple d'un liquide monoatomique, celui de l'argon liquide. En première approximation, les atomes d'argon peuvent être représentés par des sphères impénétrables de diamètre $\sigma \simeq 0.36$ nm. La figure 1.3 représente schématiquement une configuration des atomes pour un liquide où les sphères sont pratiquement en contact, mais sont disposées de façon désordonnée. Partant du centre d'un atome pris comme origine, la probabilité $p(r)$ de trouver le centre d'un autre atome à une distance r de ce centre sera pratiquement nulle tant que $r \lesssim \sigma$. Cette probabilité deviendra au contraire maximale pour $r = \sigma, 2\sigma, \dots$ et oscillera ensuite pour se stabiliser à une constante, alors que dans le cas d'un solide cristallin, la fonction $p(r)$ présente des pics quelle que soit la distance à l'origine. L'argon gazeux possède le même type de configuration que le liquide, la seule différence étant que les atomes sont beaucoup plus éloignés les uns des autres. Toutefois la différence

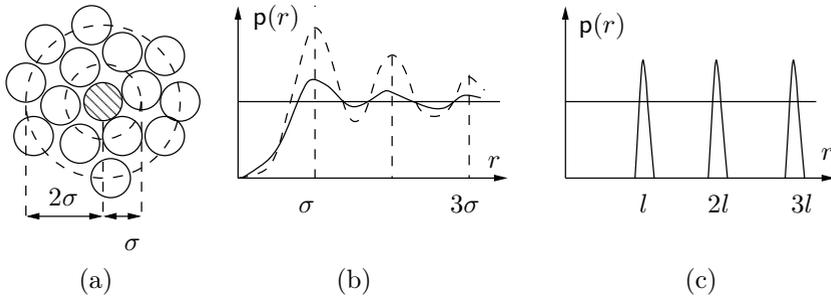
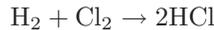


FIG. 1.3 – (a) Arrangement des atomes dans l'argon liquide. (b) Probabilité $p(r)$ pour un liquide (tirets) et pour un gaz (trait continu). (c) Probabilité $p(r)$ pour un cristal simple.

entre gaz et liquide disparaît au point critique, et on peut passer continûment du gaz au liquide ou inversement en contournant le point critique, alors qu'un tel passage continu est impossible vers un solide, parce que le type d'ordre est qualitativement différent.

Nous avons pris comme exemple un gaz monoatomique, mais en général la brique de base est une combinaison d'atomes, la molécule : N_2 , O_2 , H_2O , etc. Certaines molécules comme les protéines peuvent contenir des milliers d'atomes ; par exemple le poids moléculaire de l'hémoglobine est de l'ordre de 64 000. Une réaction chimique est un réarrangement d'atomes : les atomes des molécules initiales se redistribuent pour donner les molécules finales

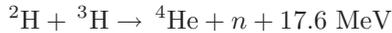


L'atome est composé d'un noyau atomique (ou simplement noyau) chargé positivement et d'électrons chargés négativement. Plus de 99.9 % de la masse de l'atome se trouve dans le noyau atomique, car le rapport de la masse de l'électron m_e à celle du proton m_p est $m_e/m_p \simeq 1/1836$. L'atome est de dix à cent mille fois plus gros que le noyau : la dimension typique d'un atome² est 1 Å (1 Å = 10^{-10} m = 0.1 nm), celle d'un noyau de quelques fermis (ou femtomètres).

Un noyau atomique est formé de protons et de neutrons, les premiers chargés électriquement et les seconds neutres ; les masses du proton et du neutron sont identiques à 0.1 % près, et on pourra souvent négliger cette différence de masse. Le *numéro atomique* Z est le nombre de protons du noyau, et aussi le nombre d'électrons de l'atome correspondant, de façon à assurer sa neutralité électrique. Le *nombre de masse* A est le nombre de protons plus le nombre de neutrons N : $A = Z + N$. Les protons et les neutrons

2. Nous continuerons à utiliser l'Angström, qui est typique de la dimension atomique, de préférence au nm. Par un hasard (?) heureux, le symbole fm peut aussi bien désigner le femtomètre que le fermi, unité de longueur des physiciens nucléaires.

sont appelés collectivement *nucléons*. Les réactions nucléaires sont pour les protons et les neutrons l'analogie des réactions chimiques pour les atomes : une réaction nucléaire est une redistribution des protons et des neutrons dans des noyaux différents des noyaux initiaux, de même qu'une réaction chimique est une redistribution des atomes dans des molécules différentes des molécules initiales. Un exemple de réaction nucléaire est la réaction de fusion des noyaux de deutérium (${}^2\text{H}$: un proton + un neutron) et de tritium (${}^3\text{H}$: un proton + deux neutrons) pour donner un noyau d'hélium⁴ (${}^4\text{He}$: deux protons + deux neutrons) et un neutron libre



La réaction dégage une énergie de 17.6 MeV et pourrait être utilisée dans un futur (probablement lointain) pour produire de l'énergie à grande échelle, l'énergie de fusion. Le projet de réacteur de recherche ITER est une première étape dans cette direction.

Dans la composition de l'atome en noyau et électrons, de même que dans celle du noyau en protons et neutrons, un concept important est celui *d'énergie de liaison*. Considérons un objet stable C formé de deux objets A et B : C est appelé *état lié* de A et B . La désintégration $C \rightarrow A + B$ ne sera pas possible si la masse m_C de C est inférieure à la somme des masses m_A et m_B de A et de B , c'est-à-dire si l'énergie de liaison³ E_L

$$E_L = (m_A + m_B - m_C)c^2 \quad (1.1)$$

est positive ; c est la vitesse de la lumière. E_L est l'énergie qu'il faut fournir pour dissocier C en $A + B$. En physique atomique, cette énergie est appelée *énergie d'ionisation* : c'est l'énergie nécessaire pour dissocier un atome en un ion positif et un électron, ou, en d'autres termes, pour arracher un électron à l'atome. Pour les molécules, E_L est l'énergie de dissociation, ou l'énergie nécessaire pour dissocier la molécule en atomes. Une particule ou un noyau instable dans une certaine configuration peut parfaitement être stable dans une autre configuration. Le neutron libre (n), par exemple, est instable : en un temps d'une quinzaine de minutes en moyenne, il se désintègre en un proton (p), un électron (e) et un antineutrino électronique ($\bar{\nu}_e$), ce qui correspond à la désintégration de base de la radioactivité β

$$n^0 \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e^0 \quad (1.2)$$

où nous avons indiqué en exposant la charge des particules en unités de la charge du proton. Cette désintégration est possible, car les masses⁴ des

3. En raison de la célèbre relation d'Einstein $E = mc^2$, ou tout simplement par analyse dimensionnelle, on peut relier masse et énergie et exprimer par exemple les masses en J/c^2 ou en eV/c^2 .

4. Trois expériences récentes : Fukuda *et al.* [2001], Ahmad *et al.* [2001] et Eguchi *et al.* [2003] montrent de façon convaincante que la masse du neutrino est non nulle, probablement de l'ordre de $10^{-2} \text{ eV}/c^2$: cf. l'exercice 4.4.6 sur les oscillations neutrino. Pour une revue récente, voir par exemple Wark [2005].

particules dans (1.2) vérifient

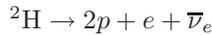
$$m_n c^2 > (m_p + m_e + m_{\bar{\nu}_e}) c^2$$

$$m_n \simeq 939.5 \text{ MeV}/c^2 \quad m_p \simeq 938.3 \text{ MeV}/c^2 \quad m_e \simeq 0.51 \text{ MeV}/c^2 \quad m_{\bar{\nu}_e} \simeq 0$$

En revanche le neutron ne se désintègre pas dans les noyaux atomiques stables, par exemple dans le noyau deutérium, ou deutéron, (${}^2\text{H}$), car

$$m_{{}^2\text{H}} \simeq 1875.6 \text{ MeV}/c^2 < (2m_p + m_e + m_{\bar{\nu}_e}) \simeq 1878.3 \text{ MeV}/c^2$$

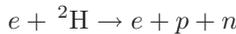
et la désintégration



est impossible : le deutéron est un état lié proton-neutron.

1.1.3 Constituants élémentaires

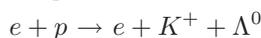
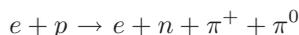
Nous avons décomposé les molécules en atomes, les atomes en électrons et noyaux, les noyaux en protons et neutrons. Peut-on aller encore plus loin, par exemple décomposer le proton ou l'électron en constituants plus élémentaires ? Peut-on dire par exemple à partir de (1.2) que le neutron est « formé » d'un proton, d'un électron et d'un antineutrino ? Un argument simple fondé sur les inégalités de Heisenberg montre que l'électron ne peut pas préexister dans le neutron (exercice 9.6.4), et qu'il est *créé* au moment de la désintégration : on ne peut donc pas dire que le neutron est « composé » d'un proton, d'un électron et d'un neutrino. On pourrait aussi penser à « casser » un proton ou un neutron en des composants plus élémentaires, en les bombardant par des particules énergiques, et répéter ce qui se passe par exemple quand on bombarde un deutéron avec des électrons de quelques MeV



Le deutéron ${}^2\text{H}$ a été cassé en ses constituants, un proton et un neutron. L'histoire ne se répète pas lorsque l'on bombarde un proton avec des électrons. Pour des électrons peu énergiques les collisions sont élastiques



mais pour des électrons d'énergie suffisante (quelques centaines de MeV), au lieu de casser le proton, on *crée* d'autres particules, par exemple dans des réactions du type



où les mésons π et K et l'hypéron Λ^0 sont de nouvelles particules, dont la nature importe peu ici. Le point crucial est qu'elles ne sont pas présentes initialement dans le proton, mais qu'elles sont créées au moment de la réaction.

Il arrive donc un moment où il ne semble plus possible de décomposer la matière en constituants de plus en plus élémentaires. On peut alors se poser la question suivante : quel est le critère d'élémentarité ? Le point de vue actuel est d'appeler élémentaires les particules qui apparaissent comme ponctuelles dans leurs interactions avec d'autres particules. Avec ce point de vue, l'électron, le neutrino et le photon sont élémentaires, tandis que le proton et le neutron sont « composés » de quarks : les guillemets sont importants, car les quarks n'existent pas à l'état libre⁵, et cette « composition » du proton en quarks est tout à fait différente de la composition du deutéron en proton et neutron. Il existe seulement des preuves indirectes (mais convaincantes !) de cette composition en quarks.

Dans l'état actuel de nos connaissances⁶, il existe trois familles de particules élémentaires, ou « particules de matière » de spin $1/2$ ⁷. Le tableau 1.2 en donne la liste ; la charge électrique q est exprimée en unités de la charge du proton. Chaque famille se compose de leptons et de quarks, et à chaque particule correspond une antiparticule de charge opposée. Les leptons de la première famille sont l'électron et son antiparticule le positron e^+ , ainsi que le neutrino électronique ν_e et son antiparticule l'antineutrino électronique $\bar{\nu}_e$, et les quarks de cette famille sont le quark « up » (u) de charge $2/3$ et le quark « down » (d) de charge $-1/3$, avec bien sûr les antiquarks \bar{u} et \bar{d} correspondants, de charge $-2/3$ et $1/3$ respectivement. Le proton est une combinaison uud et le neutron une combinaison udd . Cette première famille suffit à notre vie courante, puisqu'elle permet de fabriquer la matière ordinaire, le neutrino étant indispensable dans le cycle des réactions nucléaires assurant la bonne marche du Soleil. Si l'existence de la première famille peut se justifier par un argument anthropocentrique : si elle n'existait pas, nous ne serions pas là pour en parler ! la raison d'être des deux autres familles reste aujourd'hui tout à fait mystérieuse⁸.

À ces particules il faut ajouter celles qui « transportent les interactions » : le photon pour les interactions électromagnétiques, les bosons W et Z pour les interactions faibles, les gluons pour les interactions fortes et le graviton

5. Ce qui fait que la notion de « masse » d'un quark est une notion complexe, du moins pour les quarks dits « légers », up, down et étrange. On retrouve une masse (presque) usuelle pour les quarks lourds b et t .

6. Il existe un argument très fort pour limiter à trois ce nombre de familles : des expériences au CERN ont montré en 1992 que le nombre de familles était limité à trois, à condition que les neutrinos aient une masse inférieure à $45 \text{ GeV}/c^2$. La valeur expérimentale actuelle du nombre de familles est de 2.984 ± 0.008 .

7. Le spin $1/2$ est défini au chapitre 3 et le spin en général au chapitre 10.

8. cf. la célèbre interrogation de Rabi : « Who ordered the muon ? » Cependant on sait que chaque famille doit être complète : ainsi l'existence du quark top et sa masse ont été prédites plusieurs années avant sa découverte expérimentale en 1994. En raison de sa masse élevée, environ 175 fois la masse du proton, il a fallu attendre la construction du Tevatron aux États-Unis pour le produire.

TAB. 1.2 – Les particules de matière. Les charges électriques sont mesurées en unités de la charge du proton.

	lepton $q = -1$	neutrino $q = 0$	quark $q = 2/3$	quark $q = -1/3$
famille 1	électron	neutrino _e	quark up	quark down
famille 2	muon	neutrino _μ	quark charmé	quark étrange
famille 3	tau	neutrino _τ	quark top	quark b

pour les interactions gravitationnelles⁹, ce qui nous amène naturellement à présenter ces interactions.

1.1.4 Interactions (ou forces) fondamentales

On distingue quatre¹⁰ types d'interactions (ou de forces) fondamentales : fortes, électromagnétiques, faibles et gravitationnelles. Les *interactions électromagnétiques* sont celles qui vont jouer un rôle majeur dans ce livre : ce sont elles qui régissent le comportement des atomes, des molécules, des solides, etc. Les forces électriques de la loi de Coulomb sont dominantes : rappelons que si une charge q est immobile à l'origine des coordonnées, la force qu'elle exerce sur une charge immobile q' située en un point \vec{r} est

$$\vec{F} = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{r}}{r^2} \quad (1.3)$$

où \hat{r} est le vecteur unitaire¹¹ \vec{r}/r , $r = |\vec{r}|$ et ϵ_0 la permittivité du vide. Si les charges sont en mouvement avec une vitesse v , on doit aussi tenir compte des forces magnétiques, mais celles-ci sont plus faibles que la force de Coulomb par un facteur $\sim (v/c)^2$. Pour les électrons des couches externes, $(v/c)^2 \sim (1/137)^2 \ll 1$, mais, compte tenu de la très grande précision des expériences de physique atomique, les forces magnétiques sont facilement mises en évidence dans des phénomènes comme la structure fine ou l'effet Zeeman (§ 15.2.3). La force de Coulomb (1.3) est caractérisée par

- la forme de la loi de force en $1/r^2$: la loi de force est dite à *longue portée* ;
- l'intensité de la force mesurée par une *constante de couplage* $qq'/(4\pi\epsilon_0)$.

Le point de vue moderne, celui de la théorie quantique des champs, est que les forces électromagnétiques sont dues à l'échange de photons « virtuels »¹²

9. En toute rigueur, les interactions électromagnétiques et les interactions faibles sont maintenant unifiées en interactions électrofaibles ; le gluon, tout comme les quarks, n'existe pas à l'état libre. Enfin l'existence du graviton est pour le moment hypothétique : on n'a même pas encore détecté sur la Terre sa version classique, les ondes gravitationnelles.

10. La « cinquième force » revient périodiquement sur le devant de la scène, mais elle disparaît tout aussi périodiquement !

11. Nous utiliserons systématiquement la notation \hat{r} , \hat{n} , \hat{p} , etc. pour les vecteurs unitaires de l'espace ordinaire.

12. Ce terme sera expliqué au § 4.2.4.

entre particules chargées. La théorie quantique des champs résulte du mariage (conflictuel¹³!) entre la mécanique quantique et la relativité restreinte. Les interactions entre atomes ou entre molécules sont représentées par des forces effectives, par exemple les forces de van der Waals (exercice 15.6.1). Ces forces n'ont pas de caractère fondamental car elles se déduisent de la force de Coulomb : c'est le déguisement sous lequel apparaît la force de Coulomb pour des systèmes complexes électriquement neutres.

Les *interactions fortes* sont responsables de la cohésion du noyau atomique. Contrairement à la force de Coulomb, elles décroissent exponentiellement en fonction de la distance, suivant une loi en $\exp(-r/r_0)/r^2$, avec $r_0 \simeq 1$ fm : on dit que ce sont des forces à *courte portée*. Pour $r \lesssim r_0$, elles sont très intenses. Il en résulte que les énergies caractéristiques dans un noyau sont de l'ordre du MeV, alors qu'elles sont de l'ordre de l'eV dans un atome pour les électrons des couches externes. En réalité, les forces entre nucléons ne sont pas des forces de type fondamental, car les nucléons sont, on l'a vu, des particules composées. Les forces entre nucléons sont l'analogie des forces de van der Waals pour les atomes, et les forces fondamentales sont les forces entre quarks. Cependant, la relation quantitative qui relie les forces entre nucléons et les forces entre quarks est encore loin d'être comprise. Le gluon, particule de masse nulle et de spin 1 comme le photon, joue pour les interactions fortes le rôle que joue le photon pour les interactions électromagnétiques. La charge est remplacée par une propriété appelée par convention couleur, et la théorie des interactions fortes est appelée pour cette raison la *chromodynamique*.

Les *interactions faibles* sont responsables de la radioactivité β

$$(Z, N) \rightarrow (Z + 1, N - 1) + e^- + \bar{\nu}_e \quad (1.4)$$

dont un cas particulier est (1.2) qui s'écrit avec les notations de (1.4)

$$(0, 1) \rightarrow (1, 0) + e^- + \bar{\nu}_e$$

De même que les interactions fortes, les interactions faibles sont à courte portée, mais, comme leur nom l'indique, elles sont beaucoup moins intenses. Les vecteurs des interactions faibles sont les bosons de spin 1 chargés W^\pm et neutre Z^0 , dont les masses sont respectivement $82 \text{ MeV}/c^2$ et $91 \text{ MeV}/c^2$, environ 100 fois la masse du proton. Les leptons, les quarks, les bosons de spin 1 (ou bosons de jauge) : photon, gluons, bosons W^\pm et Z^0 , ainsi qu'une particule hypothétique de spin 0, à l'origine de la masse des particules, le boson de Higgs, sont les particules du *modèle standard* de la physique des particules, qui a été testé expérimentalement avec une précision supérieure à 0.1 % au cours de ces dix dernières années.

Enfin les *interactions gravitationnelles*, toujours attractives contrairement aux interactions coulombiennes, ont la forme bien connue entre deux masses

13. La combinaison de la mécanique quantique et de la relativité restreinte conduit à des résultats infinis, et ces infinités doivent être contrôlées par une procédure appelée renormalisation, qui n'a vraiment été comprise et justifiée que dans les années 1970.

m et m'

$$\vec{F} = -Gmm' \frac{\hat{r}}{r^2} \quad (1.5)$$

où les notations sont identiques à celles de (1.2) et où G est la constante de gravitation. La loi de force (1.5), est, comme la loi de Coulomb, une loi à longue portée, et on peut comparer directement les forces de gravitation et de Coulomb entre un électron et un proton, puisque la forme de la loi de force est la même

$$\frac{F_{\text{Cb}}}{F_{\text{gr.}}} = \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{1}{Gm_em_p} \right) \sim 10^{39}$$

Dans un atome d'hydrogène, la force de gravitation est négligeable, et de façon générale, la force de gravitation sera totalement négligeable pour tous les phénomènes de physique atomique, moléculaire ou du solide. La relativité générale, théorie relativiste de la gravitation, prédit l'existence d'ondes gravitationnelles¹⁴ qui sont pour la gravitation l'analogie des ondes électromagnétiques, tandis que le graviton, particule de spin 2 et de masse nulle, est l'analogie du photon. Toutefois il n'existe pas aujourd'hui de théorie quantique de la gravitation. Concilier la mécanique quantique et la relativité générale, expliquer l'origine de la masse et des trois familles de particules constituent les défis majeurs de la physique théorique du XXI^e siècle.

Comme résumé de cette présentation des constituants élémentaires et des forces, on retiendra qu'il existe trois familles de particules de matière, comprenant des leptons et des quarks, et que les vecteurs des forces sont le photon pour les interactions électromagnétiques, le gluon pour les interactions fortes, les bosons W et Z pour les interactions faibles, et enfin l'hypothétique graviton pour les interactions gravitationnelles.

1.2 Physique classique et physique quantique

Avant d'introduire la physique quantique, résumons brièvement les fondements de la physique classique. La physique classique comporte trois branches principales, qui ont chacune diverses ramifications.

1. La première branche est la *mécanique*, dont la loi fondamentale est la loi de Newton, ou loi fondamentale de la dynamique, donnant la force \vec{F} sur une particule ponctuelle de masse m en fonction de la dérivée par rapport au temps de son impulsion \vec{p}

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (1.6)$$

Sous cette forme, l'équation fondamentale de la dynamique survit aux modifications apportées par Einstein en 1905 avec la relativité restreinte, à condition

14. Les preuves de l'existence des ondes gravitationnelles sont pour le moment indirectes : elles résultent de l'observation de pulsars (étoiles à neutrons) binaires. Ces ondes pourraient être détectées prochainement sur Terre dans les expériences VIRGO et LIGO. L'observation du graviton est probablement repoussée à un futur très lointain

d'utiliser l'expression relativiste de l'impulsion en fonction de la vitesse \vec{v} , de la masse m de la particule et de la vitesse de la lumière c

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.7)$$

2. La deuxième branche est l'*électromagnétisme*, résumé dans les quatre équations de Maxwell donnant le champ électrique \vec{E} et le champ magnétique \vec{B} en fonction des densités de charge ρ_{em} et de courant \vec{j}_{em} , appelées *sources* du champ électromagnétique

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.8)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{\text{em}}}{\varepsilon_0} \quad c^2 \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}_{\text{em}} \quad (1.9)$$

De ces équations on déduit la propagation d'ondes électromagnétiques dans le vide à la vitesse de la lumière

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \begin{cases} \vec{E} \\ \vec{B} \end{cases} = 0 \quad (1.10)$$

Ceci fait le lien avec l'optique, qui devient un cas particulier de l'électromagnétisme. Le lien entre **1** et **2** est fourni par la *loi de Lorentz* donnant la force sur une particule de charge q et de vitesse \vec{v}

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (1.11)$$

3. La troisième branche est la *thermodynamique*, qui se déduit du second principe¹⁵ : il n'existe pas de dispositif fonctionnant suivant un cycle dont le seul effet serait de fournir du travail à partir d'une source de chaleur unique. À partir du second principe, on déduit la notion d'entropie, dont découle toute la thermodynamique classique. L'origine microscopique du second principe a été comprise à la fin du XIX^e siècle par Boltzmann et Gibbs, qui ont pu relier ce principe au fait qu'un échantillon de matière macroscopique est composé d'un nombre énorme ($\sim 10^{23}$) d'atomes, ce qui permet d'utiliser des raisonnements probabilistes à la base de la mécanique statistique. Le résultat principal de la mécanique statistique est la *loi de Boltzmann* : la probabilité $\mathfrak{p}(E)$ pour qu'un système physique en équilibre à la température absolue T ait l'énergie¹⁶ E comprend un facteur, le *poids de Boltzmann* $\mathfrak{p}_B(E)$

$$\mathfrak{p}_B(E) = \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) = \exp(-\beta E) \quad (1.12)$$

15. Le premier principe n'est autre que la conservation de l'énergie, quant au troisième, il est fondamentalement d'origine quantique.

16. La probabilité $\mathfrak{p}(E)$ est le produit de $\mathfrak{p}_B(E)$ (1.12) et d'un facteur $\mathcal{D}(E)$, la « densité des niveaux d'énergie », qui en physique classique s'obtient par une intégration sur l'espace de phase : voir la note 22. Le calcul quantique de la densité de niveaux est décrit au § 9.5.2.

où k_B est la constante de Boltzmann (la constante R des gaz parfaits divisée par le nombre d'Avogadro), et nous avons introduit la notation usuelle $\beta = 1/(k_B T)$. Cependant la mécanique statistique classique n'est pas en fait une théorie cohérente, et il faut parfois se livrer à des acrobaties pour obtenir des résultats sensés, par exemple pour l'entropie d'un gaz parfait. La physique quantique lève toutes ces difficultés.

4. En toute rigueur il faut ajouter une quatrième branche à la physique classique. En effet, la théorie relativiste de la gravitation n'est pas incluse dans le cadre précédent : cette théorie est la *relativité générale*, qui est une description géométrique, où les forces de gravitation sont reliées à la courbure de l'espace-temps.

Nous avons décrit dans (1.6)–(1.11) les lois *fondamentales* de la physique classique, qui se résument donc à sept équations en tout et pour tout ! Le lecteur pourra se demander ce que sont devenues les multiples autres lois qu'il a rencontrées : loi d'Ohm, loi de Hooke, lois de la dynamique des fluides, etc. Certaines de ces lois se déduisent directement des lois fondamentales : ainsi la loi de Coulomb est une conséquence des équations de Maxwell et de la force de Lorentz (1.11) pour des charges statiques, l'équation d'Euler pour les fluides parfaits une conséquence de la loi fondamentale de la dynamique. D'autres lois sont des lois¹⁷ *phénoménologiques*, qui n'ont pas une validité universelle, contrairement aux lois fondamentales : par exemple certains milieux n'obéissent pas à la loi d'Ohm, la relation entre l'induction \vec{D} et le champ électrique $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$ (pour un milieu isotrope) est en défaut quand le champ électrique devient grand, ce qui donne lieu aux phénomènes de l'optique non linéaire, la loi de Hooke n'est plus valable si la tension devient trop importante, etc. La mécanique du solide, l'élasticité ou la mécanique des fluides découlent de (1.6) et de diverses lois phénoménologiques, comme la loi qui relie en mécanique des fluides force, gradient de vitesse et viscosité. Il importe de bien faire la distinction entre le petit nombre de lois fondamentales et les multiples lois phénoménologiques que la physique classique utilise, faute de mieux, pour décrire la matière.

Bien que la physique classique soit d'une utilité indiscutable, elle n'en présente pas moins une lacune de taille : alors que la physique se veut une théorie de la matière, la physique classique est complètement incapable *d'expliquer* le comportement de la matière étant donné ses constituants et les forces entre ces constituants¹⁸. Elle ne peut pas prédire l'existence des atomes, car on ne peut pas construire une échelle de longueur avec les constantes de la physique

17. Bien souvent une loi phénoménologique n'est pas autre chose que le premier terme d'un développement de Taylor !

18. Cette affirmation mérite d'être un peu nuancée. Il existe de bons modèles microscopiques en physique classique : par exemple la théorie cinétique des gaz permet un calcul fiable des coefficients de transport (viscosité, conductibilité thermique) d'un gaz. Mais ni l'existence des molécules qui composent le gaz, ni la valeur de la section efficace nécessaire au calcul ne peuvent s'expliquer par la physique classique.

classique : masses et charges du noyau et des électrons¹⁹. Elle n'explique pas pourquoi le Soleil brille, pourquoi la vapeur de sodium émet une lumière jaune, elle n'a rien à dire sur les propriétés chimiques des alcalins, sur le fait que le cuivre conduit l'électricité alors que le soufre est un isolant, etc. Lorsque le physicien classique a besoin d'une propriété de la matière, une résistance électrique, une chaleur spécifique, il n'a pas d'autre choix que de la mesurer expérimentalement. Au contraire la mécanique quantique a la prétention d'expliquer le comportement de la matière à partir des constituants et des forces. Naturellement des prédictions précises à partir des premiers principes ne sont possibles que pour les systèmes les plus simples, comme l'atome d'hydrogène ou celui d'hélium. La complexité des calculs ne permet pas par exemple de prédire la structure cristalline de l'argent à partir des données sur cet atome, mais étant donné cette structure, on saura expliquer pourquoi l'argent est un conducteur, ce que la physique classique est incapable de faire.

Il ne faudrait pas conclure de cette discussion que la physique classique ne peut plus être intéressante et novatrice. Bien au contraire, on a assisté au cours de ces vingt dernières années à un renouveau de la physique classique, avec des idées nouvelles sur les systèmes dynamiques chaotiques, les instabilités, les formations de structures hors équilibre, etc. Des problèmes aussi familiers que la turbulence ou le frottement restent largement ouverts et passionnants. Simplement il existe des problèmes que par nature la physique classique ne peut pas aborder.

La physique quantique prétend donc *expliquer* le comportement de la matière à partir des constituants et des forces, mais il y a un prix à payer : les objets quantiques exhibent un comportement radicalement nouveau, qui défie notre intuition fondée sur l'expérience du comportement d'objets classiques. Cela dit, si l'on ne se préoccupe pas de cet aspect surprenant, la mécanique quantique se révèle un outil remarquable, jamais mis en défaut jusqu'à aujourd'hui, capable de couvrir des phénomènes allant de la physique des quarks à la cosmologie en passant par toutes les échelles intermédiaires. La plupart des technologies modernes n'auraient pas vu le jour sans la mécanique quantique : toutes les technologies de l'information sont fondées sur notre compréhension quantique des solides, en particulier des semi-conducteurs, et sur celle des lasers. On peut prévoir que la miniaturisation des dispositifs électroniques rendra la mécanique quantique de plus en plus omniprésente dans la technologie moderne.

19. Si l'on ajoute la vitesse de la lumière, on peut construire une échelle de longueur, le *rayon classique de l'électron*

$$r_e = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e c^2} \simeq 2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$$

qui est trop petit par 4 ordres de grandeur par rapport aux dimensions atomiques. On peut aussi invoquer l'invariance d'échelle des équations classiques : cf. Wichman [1974], chapitre 1.

La grande majorité des physiciens ne se préoccupent pas des propriétés déroutantes de la mécanique quantique et s'en servent comme d'un outil sans se poser de questions de principe. Cependant, les progrès théoriques et surtout expérimentaux de ces vingt dernières années ont permis de mieux cerner certains aspects du comportement des objets quantiques. Des expériences permettant de tester directement les fondements de la mécanique quantique, autrefois qualifiées « d'expériences de pensée » (*gedanken experiment*) par les pères fondateurs qui les jugeaient irréalisables²⁰, sont maintenant monnaie courante dans les laboratoires. En dépit de ces progrès spectaculaires que nous examinerons en particulier au chapitre 6, nombre de questions fondamentales restent ouvertes, et l'affirmation provocatrice de Feynman : « je pense que l'on peut dire aujourd'hui que personne ne comprend la mécanique quantique » garde encore aujourd'hui une part de vérité. Avant d'aborder ces développements récents, revenons quelques instants une centaine d'années en arrière, aux débuts de la physique quantique.

1.3 Un peu d'histoire

1.3.1 Le rayonnement du corps noir

Un objet chaud comme un fer chauffé au rouge, ou le Soleil, émet un rayonnement électromagnétique avec un spectre de fréquences qui dépend de la température. La puissance émise $u(\omega, T)$ par unité de fréquence ω et de surface dépend de la température absolue T de l'objet. Un raisonnement purement thermodynamique permet de montrer que si l'objet est parfaitement absorbant, ce qui en fait un *corps noir*, alors $u(\omega, T)$ est une fonction universelle, indépendante de l'objet pour une température donnée. Une très bonne réalisation d'un corps noir pour la lumière visible est une petite ouverture dans une enceinte dont l'intérieur est peint en noir : un rayon lumineux pénétrant dans l'enceinte n'a pratiquement aucune chance d'en ressortir, puisqu'à chaque réflexion il a une bonne probabilité d'être absorbé par la paroi intérieure de l'enceinte (figure 1.4).

Supposons l'enceinte chauffée à la température T : les atomes de la paroi émettent et absorbent du rayonnement électromagnétique, et il s'établit à l'équilibre thermodynamique un système d'ondes stationnaires dans la cavité. Si la cavité est un parallélépipède de côtés L_x , L_y et L_z , et si nous utilisons des conditions aux limites périodiques, le champ électrique sera de la forme $\vec{E}_0 \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$, le vecteur d'onde \vec{k} perpendiculaire à \vec{E}_0 étant de la forme

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, \frac{2\pi}{L_z} n_z \right) \quad (1.13)$$

20. Ainsi Schrödinger écrivait en 1952 : *Nous n'expérimentons jamais juste avec un seul électron ou une seule (petite) molécule. Dans les expériences de pensée, nous supposons parfois que nous le faisons : ceci entraîne invariablement des conséquences ridicules... On peut dire à juste titre que nous n'expérimentons pas plus avec des particules isolées que nous n'élevons d'ichtyosaures dans un zoo.* (Schrödinger [1952]).

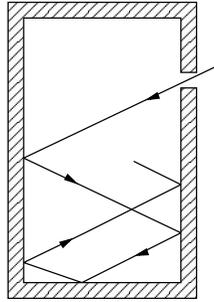


FIG. 1.4 – Enceinte pour le rayonnement du corps noir.

où (n_x, n_y, n_z) sont des nombres entiers positifs ou négatifs et $\omega = c|\vec{k}| = ck$. On montre que chaque onde stationnaire se comporte comme un oscillateur harmonique²¹ de fréquence ω dont l'énergie est proportionnelle au carré de l'amplitude, et donc à \vec{E}_0^2 . D'après la loi de Boltzmann (1.12), la probabilité que cet oscillateur ait une énergie E comprend un facteur $\exp(-E/k_B T) = \exp(-\beta E)$. En fait, dans ce cas, la densité de niveaux $\mathcal{D}(E)$ (cf. note 16) est une constante²², et l'énergie moyenne de cet oscillateur est simplement

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\int dE E \exp(-\beta E)}{\int dE \exp(-\beta E)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\int dE \exp(-\beta E) \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta} = k_B T \end{aligned} \quad (1.14)$$

L'énergie moyenne de chaque onde stationnaire est $k_B T$. Comme le nombre d'ondes stationnaires possibles est infini, l'énergie dans l'enceinte est infinie !

On relie facilement $u(\omega, T)$ à la densité d'énergie $\epsilon(\omega, T)$ par unité de fréquence dans l'enceinte (exercice 1.6.2)

$$u(\omega, T) = \frac{c}{4} \epsilon(\omega, T) \quad (1.15)$$

et on est ramené au calcul de $\epsilon(\omega, T)$, dont on déduit la densité d'énergie

$$\epsilon(T) = \int_0^\infty d\omega \epsilon(\omega, T) \quad (1.16)$$

La thermodynamique permet de montrer la loi d'échelle

$$\epsilon(\omega, T) = \omega^3 \varphi \left(\frac{\omega}{T} \right) \quad (1.17)$$

21. Ceci sera expliqué au § 11.3.1.

22. L'intégration sur l'espace de phase pour l'oscillateur harmonique classique à une dimension donne en effet, pour une fonction arbitraire $f(E)$ (exercice 1.6.2)

$$\int dx dp \delta \left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) f(E) = \frac{2\pi}{\omega} f(E)$$

x et p étant la position et l'impulsion.

où la fonction φ est indépendante de la forme de l'enceinte, mais elle ne dit rien sur la forme explicite de la fonction φ . Essayons de la déterminer à un facteur multiplicatif près par analyse dimensionnelle : *a priori*, $\epsilon(\omega, T)$ ne peut dépendre que de ω , de c , de l'énergie disponible dans le problème $k_B T$ et d'une constante sans dimension A que l'analyse dimensionnelle ne permet pas de fixer. La seule solution possible est (exercice 1.6.2)

$$\epsilon(\omega, T) = A c^{-3} (k_B T) \omega^2 = \omega^3 \left[A c^{-3} \left(\frac{k_B T}{\omega} \right) \right] \quad (1.18)$$

ce qui est bien de la forme (1.17). On retrouve le fait que la densité d'énergie dans l'enceinte est infinie

$$\epsilon(T) = \int_0^\infty d\omega \epsilon(\omega, T) = A c^{-3} (k_B T) \int_0^\infty \omega^2 d\omega = +\infty$$

La mécanique statistique permet de calculer A (exercice 1.6.2), mais ne résout en rien le problème de l'énergie infinie, et l'analyse dimensionnelle suggère fortement que le rayonnement du corps noir ne peut s'expliquer que si l'on accepte d'introduire une nouvelle constante physique.

Parmi toutes les hypothèses conduisant au résultat inacceptable d'une énergie infinie, Planck remet en cause celle qui conduit au calcul (1.14) de l'énergie moyenne d'un oscillateur²³ : au lieu de supposer que E peut prendre toutes les valeurs possibles entre zéro et l'infini, il admet que cette énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes E_n qui sont des multiples entiers de la fréquence ω de l'oscillateur, avec un coefficient de proportionnalité \hbar

$$E_n = n(\hbar\omega) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.19)$$

La constante \hbar est appelée *constante de Planck*; plus exactement, c'est la constante de Planck h divisée²⁴ par 2π : $\hbar = h/(2\pi)$. La constante de Planck se mesure en J.s : elle a pour dimension $\mathcal{M}\mathcal{L}^2\mathcal{T}^{-1}$ et elle a pour valeur numérique

$$\hbar \simeq 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s} \quad \text{ou} \quad h \simeq 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

23. En réalité, Planck a appliqué son raisonnement à un « résonateur » dont la nature reste obscure. Considérer les vibrations du champ électromagnétique est plus simple et plus direct, mais constitue une entorse à la vérité historique. Notre présentation « historique », tout comme celle de la plupart des manuels, tient plus du conte de fées (Kragh [2000]) que de l'histoire réelle. De même il ne semble pas que les physiciens de la fin du XIX^e siècle aient été préoccupés par le problème de l'énergie infinie, ou par l'absence d'une constante fondamentale.

24. Nous utiliserons systématiquement \hbar et non h , et par abus de langage nous appellerons \hbar la constante de Planck; la relation $E = \hbar\omega$ est bien sûr équivalente à $E = h\nu$, où ν est la fréquence ordinaire, mesurée en Hz, et ω la fréquence angulaire, ou pulsation, mesurée en rad.s^{-1} : $\omega = 2\pi\nu$. Comme nous utiliserons pratiquement toujours ω et jamais ν , par abus de langage nous appellerons ω la fréquence.

D'après la loi de Boltzmann, la probabilité normalisée d'observer une énergie E_n est

$$p(E_n) = e^{-\beta n \hbar \omega} \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega} \right)^{-1} = \exp(-\beta n \hbar \omega) (1 - \exp(-\beta \hbar \omega)) \quad (1.20)$$

Pour obtenir (1.20), on remarque que la sommation sur n est celle d'une série géométrique. Posant $x = \exp(-\beta \hbar \omega)$ on calcule aisément la valeur moyenne $\langle E \rangle$ de l'énergie d'un oscillateur

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= (1-x) \sum_{n=0}^{\infty} (n \hbar \omega) x^n = (1-x) \hbar \omega x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} x^n \\ &= (1-x) \hbar \omega x \frac{d}{dx} \frac{1}{1-x} = \frac{\hbar \omega x}{1-x} = \frac{\hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Cette formule permet de calculer la densité d'énergie (exercice 1.6.2)

$$\epsilon(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1} \quad (1.22)$$

et donc $u(\omega, T)$, en parfait accord avec l'expérience si l'on fixe convenablement la valeur de \hbar , et avec le résultat (1.17) de la thermodynamique. On remarque que l'approximation classique (1.18) est valable si $k_B T \gg \hbar \omega$, c'est-à-dire pour les basses fréquences.

L'exemple le plus connu de rayonnement du corps noir est le rayonnement fossile qui remplit l'Univers²⁵, ou rayonnement à 3 K. La distribution de fréquence de ce rayonnement suit remarquablement la loi de Planck (1.22) avec une température de $2.73 \simeq 3$ K (figure 1.5), mais ce rayonnement n'est plus à l'équilibre thermodynamique. Il s'est découpé des atomes environ 380 000 ans après le big-bang, c'est-à-dire la naissance de l'Univers. Au moment de ce découplage, la température était de 10^4 K environ. Ensuite l'expansion de l'Univers a réduit cette température à la valeur actuelle de 3 K.

1.3.2 L'effet photoélectrique

Le nombre entier n dans (1.19) possède une interprétation physique particulièrement importante : la raison pour laquelle l'énergie d'une onde stationnaire de fréquence ω est un multiple entier $n \hbar \omega$ de $\hbar \omega$ est que l'on y trouve précisément n *photons* (ou particules de lumière) d'énergie $\hbar \omega$. C'est cette interprétation qui a conduit Einstein à introduire le concept de photon pour expliquer l'effet photoélectrique. Lorsqu'un métal est illuminé par un rayonnement électromagnétique, des électrons sont arrachés au métal, avec un effet de seuil qui dépend de la fréquence, et non de l'intensité. L'expérience de

25. On trouvera un exposé remarquable du big-bang dans Weinberg [1978].

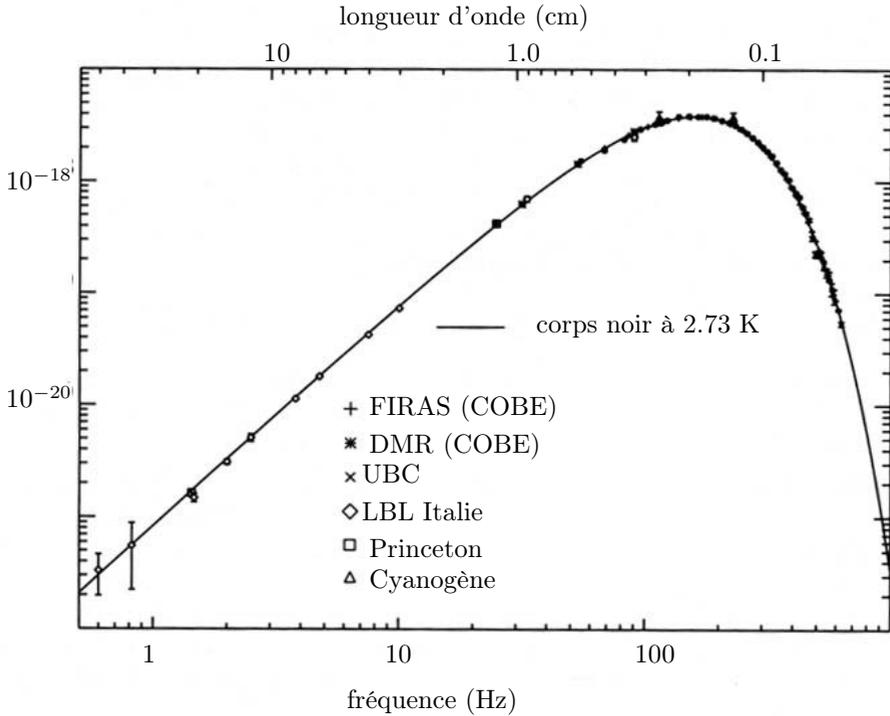


FIG. 1.5 – Le rayonnement du corps noir à 3 K. L'axe vertical donne l'intensité du rayonnement en $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{Hz}^{-1}$. On observera l'accord remarquable avec la loi de Planck pour $T = 2.73 \text{ K}$. D'après J. Rich [2002].

Millikan (figure 1.6) confirme l'interprétation d'Einstein : les électrons sont arrachés au métal avec une énergie cinétique E_c

$$E_c = \hbar\omega - W \quad (1.23)$$

où W est le potentiel d'extraction. Aucun électron de charge q_e n'atteint la cathode si $|q_e V| > E_c$. Si V_0 est le potentiel pour lequel le courant s'annule

$$|V_0| = \frac{\hbar}{|q_e|} \omega - \frac{W}{|q_e|} \quad (1.24)$$

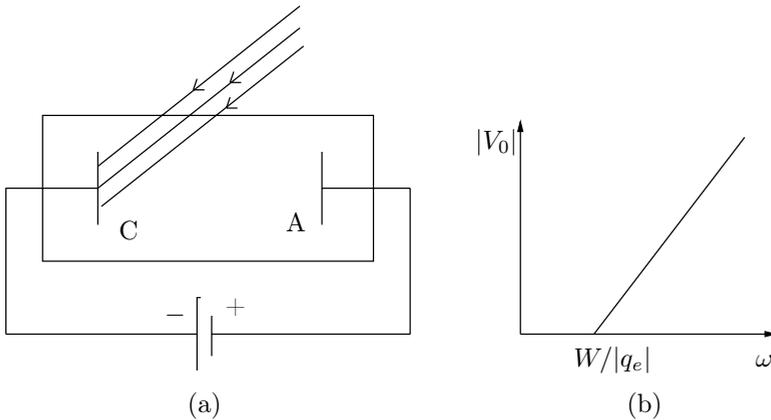


FIG. 1.6 – L'expérience de Millikan. (a) Schéma de l'expérience. (b) $|V_0|$ en fonction de ω .

et porter $|V_0|$ en fonction de ω donne une droite de pente $\hbar/|q_e|$, et la valeur de \hbar coïncide avec celle du rayonnement du corps noir, ce qui confirme l'hypothèse d'Einstein²⁶ : le rayonnement électromagnétique est composé de photons²⁷.

1.4 Ondes et particules : interférences

1.4.1 Hypothèse de de Broglie

Partons de la relation (1.19) $E = \hbar\omega$ pour $n = 1$ reliant l'énergie et la fréquence d'un photon, aussi appelée *relation de Planck-Einstein*. Un photon possède une impulsion

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$$

mais compte tenu de $\omega = ck$ et de ce que l'impulsion et le vecteur d'onde sont parallèles et de même sens, on aboutit à la relation vectorielle suivante entre

26. Encore une réécriture de l'histoire! Certains résultats qualitatifs sur l'effet photoélectrique avaient été obtenus par Lenard au début des années 1900, mais les mesures précises de Millikan sont postérieures de 10 ans à l'hypothèse d'Einstein, qui semble avoir été motivée non par l'effet photoélectrique, mais par des arguments thermodynamiques : voir par exemple Darrigol [2005].

27. Toutefois l'argument n'est pas entièrement convaincant, car l'effet photoélectrique peut s'expliquer dans le cadre d'une théorie semi-classique, où le champ électromagnétique n'est pas quantifié et où le concept de photon n'existe pas : cf. § 15.3.3. En revanche on ne peut pas expliquer l'effet photoélectrique sans introduire \hbar . Le fait qu'un photomultiplicateur dont le fonctionnement repose sur l'effet photoélectrique enregistre des coups isolés peut être attribué au caractère quantique du détecteur et non à l'arrivée de photons isolés, voir le § 15.4.1.

impulsion \vec{p} et vecteur d'onde \vec{k}

$$\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}} \quad (1.25)$$

Cette équation se traduit aussi par une relation (cette fois scalaire) entre impulsion et longueur d'onde λ , la *longueur de de Broglie*

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda}} \quad (1.26)$$

L'hypothèse de de Broglie est que les relations (1.25) et (1.26) *sont valables pour toutes les particules*. Selon cette hypothèse, *une particule d'impulsion \vec{p} possède des propriétés ondulatoires caractéristiques d'une longueur d'onde $\lambda = h/p$* . Si $v \ll c$, on utilisera $\vec{p} = m\vec{v}$, et sinon la formule générale (1.7), sauf bien sûr pour $m = 0$, où $p = E/c$. Si cette hypothèse est correcte, on doit pouvoir observer avec des particules des propriétés caractéristiques des ondes comme les interférences et la diffraction.

1.4.2 Diffraction et interférences avec des neutrons froids

Depuis les années 1980, les techniques expérimentales modernes permettent de vérifier les propriétés d'interférences et de diffraction de particules dans des expériences dont le principe est simple et dont l'interprétation est directe. Ces expériences ont été réalisées avec des photons, des électrons, des atomes, des molécules et des neutrons. Nous avons choisi, un peu arbitrairement, d'exposer les expériences réalisées avec des neutrons, qui nous ont semblé particulièrement élégantes et éclairantes. Les expériences de diffraction de neutrons par des cristaux sont classiques depuis plus de cinquante ans (exercice 1.6.4), mais l'idée est ici de réaliser des expériences avec des dispositifs macroscopiques, des fentes visibles à l'œil nu, et non d'utiliser un réseau dont le pas est de quelques Å.

Les expériences ont été réalisées dans les années 1980 par un groupe d'Innsbruck auprès du réacteur nucléaire de recherche de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble. Les neutrons de masse m_n sont produits par la fission d'atomes d'uranium²³⁵ dans le cœur du réacteur, et sont ensuite guidés vers les expériences. En ordre de grandeur, leur énergie cinétique est $k_B T$, où $T \sim 300$ K est la température ambiante : on appelle ces neutrons des neutrons thermiques dont l'énergie cinétique $\sim k_B T \simeq 1/40$ eV pour $T = 300$ K. L'impulsion $p = \sqrt{2m_n k_B T}$ correspond à une vitesse $v = p/m_n$ d'environ 1 000 m.s⁻¹ et d'après (1.26) la longueur d'onde λ_{th} vaut $h/\sqrt{2m_n k_B T} \simeq 1.8$ Å. On augmente la longueur d'onde en faisant passer les neutrons dans des matériaux à basse température : par exemple si la température du matériau est 1 K, la longueur d'onde passera à $\lambda = \lambda_{th} \sqrt{300} \simeq 31$ Å. De tels neutrons sont appelés « neutrons froids ». Dans l'expérience du groupe d'Innsbruck, les neutrons

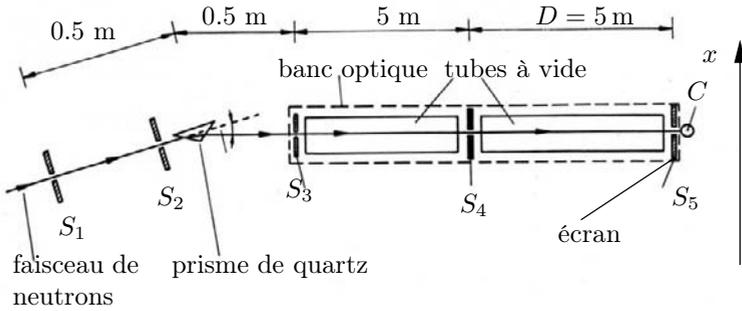
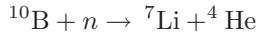


FIG. 1.7 – Dispositif expérimental pour la diffraction et les interférences de neutrons. S_1 et S_2 : fentes collimatrices. S_3 : fente d'entrée. S_4 : fente objet. S_5 : position du compteur C . D'après Zeilinger *et al.* [1988].

sont « refroidis » dans du deutérium²⁸ liquide à 25 K. En sélectionnant les neutrons après leur passage dans le deutérium liquide, on obtient des neutrons dont la longueur d'onde moyenne est de 20 Å.

Le dispositif expérimental est schématisé sur la figure 1.7. La détection des neutrons se fait à l'aide de compteurs à fluorure de bore BF_3 , le bore absorbant les neutrons suivant la réaction



avec une efficacité voisine de 100 %. Le compteur est déplacé suivant l'écran en S_5 , et compte le nombre de neutrons arrivant dans le voisinage de S_5 .

Dans l'expérience de diffraction, la fente S_4 a une largeur $a = 93 \mu\text{m}$, ce qui donne une dimension angulaire de la tache de diffraction de

$$\theta = \frac{\lambda}{a} \sim 2 \times 10^{-5} \text{ radian}$$

et sur l'écran situé à $D = 5 \text{ m}$ de la fente une dimension linéaire de l'ordre de $100 \mu\text{m}$. Il est possible de faire un calcul précis de la figure de diffraction en tenant compte par exemple de la dispersion des longueurs d'onde autour de la longueur d'onde moyenne de 20 Å. Le résultat théorique est en accord remarquable avec l'expérience (figure 1.8).

Dans l'expérience d'interférences, deux fentes de $21 \mu\text{m}$ ont leurs centres espacés de $d = 125 \mu\text{m}$. L'interfrange sur l'écran vaut

$$i = \frac{\lambda D}{d} = 80 \mu\text{m}$$

28. Le deutérium est choisi de préférence à l'hydrogène, qui a l'inconvénient d'absorber les neutrons dans la réaction $n + p \rightarrow ^2\text{H} + \gamma$; c'est pourquoi dans un réacteur nucléaire l'eau lourde est un meilleur modérateur que l'eau ordinaire : exercice 15.6.8.

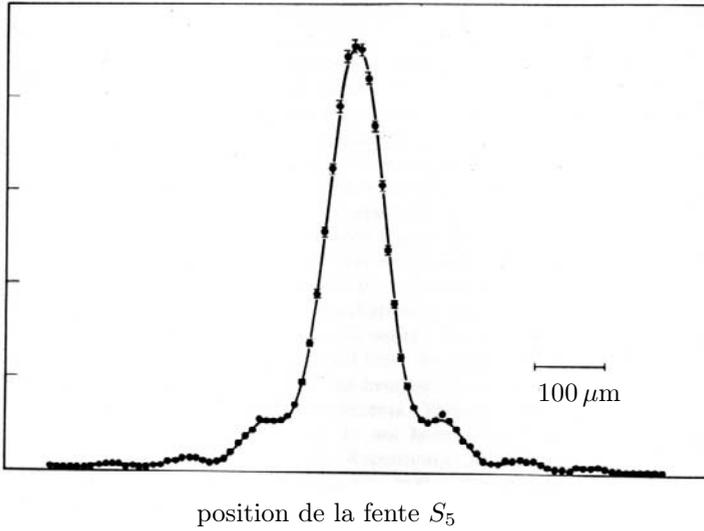


FIG. 1.8 – Diffraction de neutrons par une fente. D'après Zeilinger *et al.* [1988].

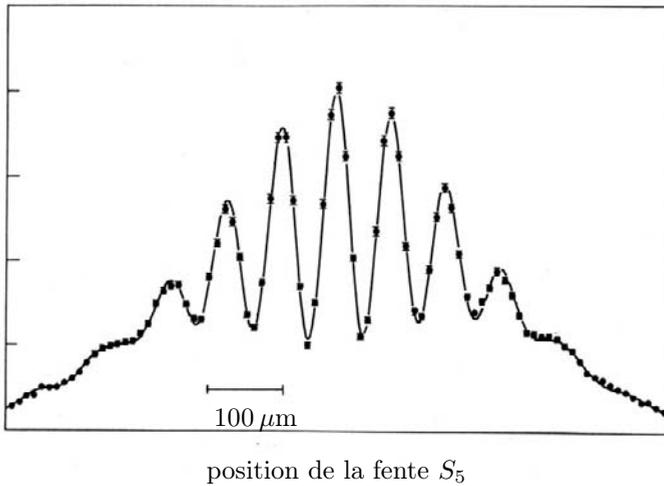


FIG. 1.9 – Expérience des fentes d'Young avec des neutrons. D'après Zeilinger *et al.* [1988].

Les fentes sont visibles à l'œil nu, et l'interfrange est macroscopique. À nouveau un calcul théorique prenant en compte les divers paramètres de l'expérience est en excellent accord avec la figure d'interférences expérimentale (figure 1.9).

Il y a toutefois une différence cruciale par rapport à une expérience d'interférences en optique : *la figure d'interférences est construite à partir d'impacts de neutrons isolés*, et elle est reconstituée après coup lorsque l'expérience est terminée. En effet, on déplace le compteur le long de l'écran (ou bien on dispose une batterie de compteurs identiques recouvrant l'écran), et on enregistre les neutrons arrivant au voisinage de chaque point de l'écran pendant des intervalles de temps identiques. Soit $N(x)\Delta x$ le nombre de neutrons détectés par seconde dans l'intervalle $[x - \Delta x/2, x + \Delta x/2]$, x étant l'abscisse d'un point sur l'écran. L'intensité $\mathcal{I}(x)$ peut être définie comme étant égale à $N(x)$ et le nombre de neutrons arrivant au voisinage d'un point de l'écran est proportionnel à l'intensité $\mathcal{I}(x)$ de la figure d'interférences, avec des fluctuations statistiques autour d'une valeur moyenne. Les impacts isolés sont illustrés sur la figure 1.10 par une expérience faite non avec des neutrons, mais des atomes froids que l'on laisse tomber à travers des fentes d'Young : les impacts des atomes tombant sur l'écran sont enregistrés pour donner l'aspect de la figure 1.10.

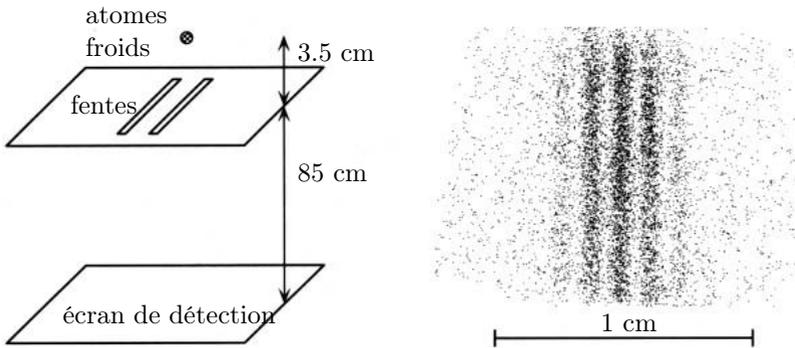


FIG. 1.10 – Interférences avec des atomes froids. D'après Basdevant et Dalibard [2001].

1.4.3 Interprétation des expériences

Outre les neutrons et les atomes froids, les expériences de diffraction et d'interférences ont été réalisées avec plusieurs autres types de particules :

- avec des photons, en réduisant l'intensité de telle sorte que les photons arrivent un à un sur l'écran. Toutefois l'expérience dans de telles conditions n'est pas entièrement probante, car on peut en donner une explication semi-classique en prenant en compte le caractère quantique du détecteur : voir la note 27. Cependant, on sait maintenant réaliser des sources qui fournissent des états à un photon et dont les résultats

sont incontestablement des interférences construites photon par photon (Aspect *et al.* [1989].),

- avec des électrons,
- avec des molécules légères (Na_2),
- avec des fullerènes C_{60} (exercice 1.6.1),

et il y a tout lieu de penser que les résultats sont universels, indépendants du type de particule : atomes, molécules, virus²⁹ ... Cependant ces résultats expérimentaux incontournables semblent souffrir d'une difficulté d'interprétation : dans une expérience classique d'interférences de fentes d'Young réalisée avec des ondes, l'onde incidente se divise en deux ondes qui se recombinent ensuite et interfèrent, phénomène visible à l'œil nu pour des ondes à la surface de l'eau. Dans le cas des neutrons, chaque neutron arrive isolément ; l'intervalle de temps entre deux neutrons successifs est tel que lorsqu'un neutron est détecté sur l'écran, le neutron suivant est encore dans le réacteur, confiné dans un atome d'uranium. Est-il envisageable que le neutron se scinde en deux fractions de neutron, chaque fraction passant par une fente ? Il est facile de se convaincre que cette hypothèse est absurde : un compteur détecte toujours un neutron entier, jamais une fraction de neutron ! Il en est de même si l'on scinde à l'aide d'une *lame séparatrice* une onde lumineuse d'intensité suffisamment réduite pour pouvoir détecter les photons individuellement ; les photodétecteurs D_1 et D_2 détectent toujours un photon entier, jamais une fraction de photon (figure 1.11). Le photon, comme le neutron, est insécable, du moins dans le vide, car par interaction avec un milieu non linéaire, un photon peut se scinder en deux photons d'énergie plus faible : voir § 6.3.2.

Il nous faut donc admettre qu'une particule quantique présente à la fois un aspect ondulatoire et un aspect corpusculaire : c'est donc *un objet entièrement nouveau et étrange*, du moins pour notre intuition formée par la pratique d'objets macroscopiques. Comme l'écrivent Lévy-Leblond et Balibar, paraphrasant Feynman « les objets quantiques sont complètement cinglés », mais ils ajoutent « au moins le sont-ils tous de la même façon ». En effet photons, électrons, neutrons, atomes, molécules... ont tous ce même comportement, à la fois ondulatoire et corpusculaire. Afin de mettre en valeur cette unicité du comportement quantique, certains auteurs ont proposé le néologisme « quanton » pour désigner un objet doté d'un tel comportement. Nous continuerons à utiliser « particule quantique », ou simplement « particule », car les particules considérées dans ce livre auront un comportement quantique, et nous préciserons « particule classique » si nous voulons revenir à des petites boules de billard.

29. Cependant l'observation d'effets ondulatoires est de plus en plus difficile quand les objets deviennent plus gros, d'abord parce que les longueurs d'onde sont de plus en plus courtes, mais aussi parce que les effets de la décohérence (§ 6.4.1) sont de plus en plus importants lorsque la taille de l'objet augmente : voir l'article de revue de Arndt *et al.* [2005] et le § 15.3.5.

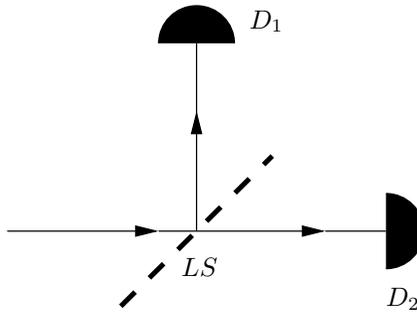


FIG. 1.11 – lame séparatrice LS et comptage de photons par des photodétecteurs D_1 et D_2 . La lame séparatrice réfléchit ou transmet un photon avec une probabilité de 50 %.

Si le neutron est insécable, peut-on savoir s'il est passé par une fente plutôt que l'autre ? Si une fente est fermée, on observe sur l'écran la figure de diffraction de l'autre fente et réciproquement. Si la situation expérimentale est telle que l'on peut décider par quelle fente est passé le neutron, alors on doit observer sur l'écran la superposition des *intensités* des figures de diffraction de chaque fente : en effet on peut diviser les neutrons en deux groupes, ceux qui sont passés par la fente supérieure, et pour lesquels on aurait pu fermer la fente inférieure sans rien changer au résultat, et ceux qui sont passés par la fente inférieure. On n'observe une figure d'interférences que si le dispositif expérimental est tel que l'on ne peut pas savoir, *même en principe*, par quelle fente est passé le neutron. En résumé

- (i) Si le dispositif expérimental ne permet pas de savoir par quelle fente est passé le neutron, alors on observera des interférences.
- (ii) Si le dispositif permet en principe de décider entre les deux fentes, alors les interférences seront détruites, indépendamment du fait qu'un expérimentateur se donne ou non la peine de faire l'observation nécessaire.

Une remarque fondamentale est que l'on ne peut pas savoir *a priori* en quel point de l'écran va arriver un neutron donné. On peut seulement affirmer que la *probabilité* d'arrivée sur l'écran est grande en un point de maximum de la figure d'interférences, et petite en un point où la figure d'interférences présente un minimum. Plus précisément, la probabilité d'arrivée en un point d'abscisse x est proportionnelle à l'intensité $\mathcal{I}(x)$ de la figure d'interférences en ce point. De même, dans l'expérience de la figure 1.11, chaque photomultiplicateur a une probabilité $1/2$ d'être déclenché par un photon donné, mais il est impossible de savoir à l'avance lequel des deux le sera.

Essayons de donner une formulation quantitative de la discussion précédente. Tout d'abord, par analogie avec les ondes, nous introduisons une

fonction complexe de x , $a_1(x)$, (resp. $a_2(x)$) associée au passage par la fente supérieure (resp. inférieure) d'un neutron arrivant en x sur l'écran, appelée *amplitude de probabilité*. Le module au carré de l'amplitude de probabilité donne l'intensité : si la fente 2 est fermée $\mathcal{I}_1(x) \propto |a_1(x)|^2$ et inversement $\mathcal{I}_2(x) \propto |a_2(x)|^2$ si la fente 1 est fermée. Dans le cas (i) on ajoute les *amplitudes* avant de calculer l'intensité

$$\mathcal{I}(x) \propto |a_1(x) + a_2(x)|^2 \quad (1.27)$$

et dans le cas (ii) on ajoute les *intensités*

$$\mathcal{I}(x) \propto |a_1(x)|^2 + |a_2(x)|^2 = \mathcal{I}_1(x) + \mathcal{I}_2(x) \quad (1.28)$$

Comme ci-dessus, l'intensité peut être définie comme le nombre de neutrons arrivant par seconde et par unité de longueur sur l'écran. Pour tenir compte du caractère probabiliste du point d'impact des neutrons, les amplitudes a_1 et a_2 ne seront pas des amplitudes ondulatoires, mesurant l'amplitude d'une vibration, mais des *amplitudes de probabilité*, dont le module carré donnera la *probabilité* d'arriver au point x sur l'écran. La notion d'amplitude de probabilité, propre à la physique quantique, sera développée et recevra un habillage mathématique au chapitre 3.

Une formulation plus générale de (1.27) et (1.28) est alors la suivante : supposons que partant d'un état initial i on arrive à un état final f . Pour obtenir la probabilité $p_{i \rightarrow f}$ d'observer l'état final f , on doit additionner toutes les amplitudes conduisant au résultat f en partant de i

$$a_{i \rightarrow f} = a_{i \rightarrow f}^{(1)} + a_{i \rightarrow f}^{(2)} + \cdots + a_{i \rightarrow f}^{(n)}$$

et $p_{i \rightarrow f} = |a_{i \rightarrow f}|^2$. Il doit être bien entendu que les états i et f sont spécifiés de façon unique par la donnée des paramètres qui définissent l'état initial et l'état final de *l'ensemble* du dispositif expérimental. Si par exemple nous recherchons une information sur le passage du neutron à travers une fente, cette information ne peut être obtenue qu'en intégrant les fentes d'Young dans un dispositif plus vaste, dont l'état final, qui dépendra d'autres paramètres que le point d'impact du neutron, est susceptible de nous renseigner sur le passage par une fente déterminée : l'état final de l'ensemble du dispositif ne sera pas le même selon que le neutron est passé par une fente ou par l'autre. Dans le langage du chapitre 6, le passage du neutron par une fente plutôt que l'autre a laissé une trace dans l'environnement, ce qui conduit à la disparition des interférences.

En résumé, on doit sommer les *amplitudes* pour des états finaux³⁰ identiques, et les *probabilités* pour des états finaux différents, même si ces états finaux concernent d'autres paramètres physiques que ceux auxquels on s'intéresse. Il suffit que ces paramètres soient accessibles en principe, même s'ils

30. La grammaire classique imposerait « états finals »...

ne sont pas effectivement observés, pour que l'on doive considérer des états finaux comme différents. Nous illustrerons ce point au paragraphe suivant sur un exemple concret. Une façon imagée d'exprimer les propriétés ci-dessus consiste à dire que tous les chemins conduisant à des états finaux identiques sont des *chemins indiscernables*, et que l'on doit sommer les amplitudes correspondant à tous les chemins indiscernables.

1.4.4 Inégalités de Heisenberg I

Revenons sur l'expérience de diffraction des neutrons pour en tirer une relation fondamentale, appelée *inégalité de Heisenberg*, ou suivant une terminologie courante mais ambiguë, *principe d'incertitude de Heisenberg*. Si la largeur de la fente est a , et si nous orientons l'axe des x dans le plan de la fente perpendiculairement à celle-ci, la position du neutron suivant cet axe immédiatement à la sortie de la fente est précise à $\Delta x = a$ près. Comme la largeur angulaire de la tache de diffraction est $\sim \lambda/\Delta x$, la composante suivant x de l'impulsion du neutron est $\Delta p_x \sim (\lambda/\Delta x)p = h/\Delta x$, où p est l'impulsion du neutron (on suppose $p \gg \Delta p_x$). Nous avons donc la relation

$$\Delta p_x \Delta x \sim h \quad (1.29)$$

Nous verrons au chapitre 9 une version plus précise de (1.29), où Δp_i , $i = x, y, z$ et Δx_i , représenteront les écarts types ou dispersions, sur des composantes identiques (i) de l'impulsion et de la position.

$$\Delta p_i \Delta x_i \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (1.30)$$

En revanche, aucune inégalité ne relie des composantes différentes de l'impulsion et de la position : par exemple Δp_x et Δy ne sont contraints par aucune relation. On dit souvent, en interprétant l'expérience de diffraction, que le passage du neutron dans une fente de largeur Δx a permis de mesurer sa position suivant x avec une précision Δx , et que cette mesure a perturbé son impulsion par une quantité $\Delta p_x \sim h/\Delta x$. Nous verrons au chapitre 4 que les inégalités (1.30) n'ont en fait rien à voir avec une mesure expérimentale de la position ou de l'impulsion, mais proviennent de la description mathématique d'une particule quantique par un train d'ondes. Nous reviendrons également sur la signification des ces relations.

Nous allons maintenant utiliser (1.29) pour discuter la question de l'observation des trajectoires dans l'expérience d'interférences avec des neutrons. Einstein avait proposé le dispositif de la figure 1.12 pour déterminer la trajectoire du neutron : passe-t-il par la fente supérieure ou inférieure ? Quand le neutron franchit la première fente F_0 , il donne par conservation de l'impulsion une impulsion vers le bas à l'écran E_0 s'il franchit la fente supérieure F_1 et une impulsion vers le haut s'il franchit la fente inférieure F_2 . On peut donc déterminer par quelle fente est passé le neutron ! La réponse de Bohr fut la

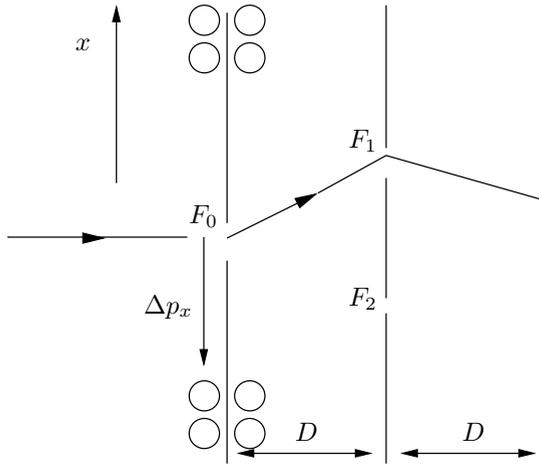


FIG. 1.12 – Une controverse Bohr-Einstein. Les fentes F_1 et F_2 sont les fentes d'Young. La fente F_0 est percée dans un écran mobile verticalement.

suivante : si l'écran E_0 reçoit une impulsion δp_x que l'on peut mesurer, alors cela veut dire que l'impulsion *initiale* Δp_x de l'écran était très inférieure à δp_x , et sa position initiale déterminée au mieux avec une précision de l'ordre de $h/\Delta p_x$. Cette imprécision dans la position de la source suffit à faire disparaître la figure d'interférences (exercice 1.6.3). Tous les dispositifs imaginés pour déterminer la trajectoire du neutron sont, soit efficaces, mais dans ce cas il n'y a pas d'interférences, soit inefficaces, et dans ce cas les interférences persistent, mais on ne sait pas par quelle fente est passé le neutron. La figure d'interférences se brouille au fur et à mesure que le dispositif devient de plus en plus efficace.

La discussion ci-dessus est en tout point correcte, mais elle masque le point essentiel : ce n'est pas la perturbation causée à la trajectoire du neutron par le choc sur le premier écran qui brouille les interférences³¹. Ce qui est crucial est la possibilité *d'étiqueter la trajectoire*. On peut imaginer et même réaliser expérimentalement des dispositifs qui étiquettent les trajectoires sans perturber en quoi que ce soit les degrés de liberté observés, et cet étiquetage suffit à détruire les interférences. Nous allons décrire brièvement un tel dispositif, qui

31. La même remarque vaut pour le dispositif imaginé par Feynman pour une expérience de fentes d'Young avec des électrons (Feynman *et al.* [1965], vol. III, chapitre 1). Une source de photons placée derrière les fentes permet en théorie d'observer le passage des électrons. Lorsque l'on utilise des photons de courte longueur d'onde, les collisions électron-photon permettent de discriminer entre les fentes, mais les collisions perturbent suffisamment les trajectoires pour brouiller les interférences. Si on augmente la longueur d'onde, les chocs sont moins violents, mais le pouvoir de résolution des photons diminue. Les interférences réapparaissent quand ce pouvoir de résolution ne permet plus de distinguer entre les fentes. Voir le § 15.3.5 pour une variante de cette expérience qui a été effectivement réalisée.

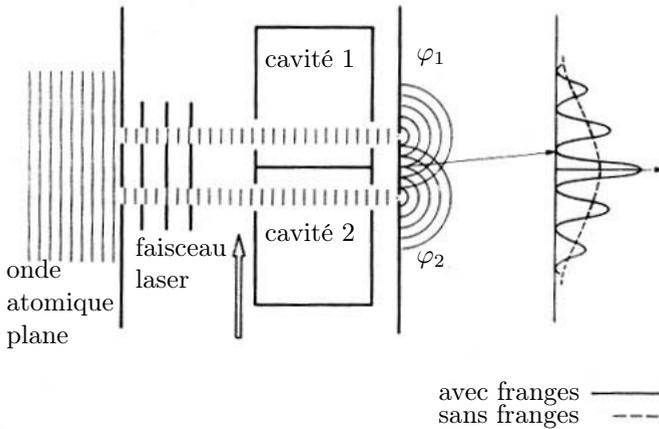


FIG. 1.13 – Étiquetage des trajectoires dans l'expérience des fentes d'Young. D'après Englert *et al.* [1991].

n'a pas encore été réalisé expérimentalement, mais qui ne semble pas hors de portée de développements technologiques futurs. Le dispositif proposé³² utilise des atomes, ce qui permet de jouer sur leurs degrés de liberté internes sans affecter la trajectoire de leur centre de masse. Avant leur passage à travers les fentes d'Young, les atomes sont portés dans un état excité par un faisceau laser (figure 1.13). Derrière chacune des fentes d'Young se trouve une cavité supraconductrice micro-onde, décrite plus en détail au § 11.4.3. L'atome en passant dans la cavité revient à son état fondamental en émettant avec une probabilité voisine de 100 % un photon qui reste confiné dans la cavité. La présence du photon dans l'une ou l'autre des cavités permet d'étiqueter la trajectoire de l'atome, ce qui détruit les interférences. La perturbation apportée à la trajectoire du centre de masse de l'atome est totalement négligeable : il n'y a pratiquement aucun transfert d'impulsion entre le photon et l'atome. Cependant les deux états finaux : atome arrivant au point d'abscisse x sur l'écran et photon dans la cavité 1, et atome arrivant au point x sur l'écran et photon dans la cavité 2 sont *différents*. Il faut donc prendre le module carré de chacune des amplitudes correspondantes et ajouter les probabilités. On note qu'il n'est pas nécessaire de détecter le photon, ce qui introduirait d'ailleurs une complication expérimentale supplémentaire. Il suffit de savoir que l'atome émet un photon de façon quasi certaine au cours de son passage dans la cavité. Comme nous l'avons déjà souligné, il n'est pas indispensable

32. Ce dispositif a été imaginé par Englert *et al.* [1991], et une version grand public en est donnée dans Englert *et al.* [1995]. Les atomes sont supposés se trouver dans des états de Rydberg (*cf.* exercice 15.6.4.) Une expérience voisine dans son principe, mais dont le schéma est plus complexe, a été effectivement réalisée par Dürr *et al.* [1998].

que l'observation de l'état final soit effectivement réalisée et il suffit qu'elle soit possible en principe, même si la technologie d'aujourd'hui ou même de demain est incapable de permettre cette observation.

1.4.5 Interféromètre de Mach-Zehnder

Les fentes d'Young sont l'exemple standard d'une expérience d'interférences, mais un interféromètre beaucoup plus largement utilisé pour réaliser des expériences de physique quantique, avec des photons, des neutrons, des atomes, etc., est celui de Mach-Zehnder, qui repose sur l'utilisation de lames séparatrices (figure 1.11). Nous allons partir du point de vue ondulatoire en nous plaçant dans le cas de l'optique. Le schéma de l'interféromètre est donné dans la figure 1.14. Examinons l'action d'une lame séparatrice sur des amplitudes ondulatoires : soit \bar{a} et \bar{b} les amplitudes d'une onde arrivant de chaque côté de la lame séparatrice, et soit \bar{c} et \bar{d} les amplitudes ondulatoires quittant la lame séparatrice (figure 1.14). Dans le cas des ondes électromagnétiques, ces amplitudes peuvent être identifiées par exemple aux champs électriques. En raison du principe de superposition, les amplitudes \bar{c} et \bar{d} sont reliées linéairement aux amplitudes \bar{a} et \bar{b}

$$\begin{aligned}\bar{c} &= t\bar{a} + r\bar{b} \\ \bar{d} &= r\bar{a} + t\bar{b}\end{aligned}\tag{1.31}$$

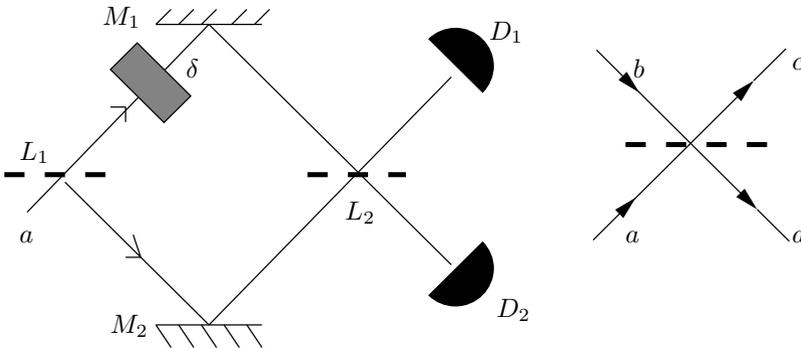


FIG. 1.14 – Interféromètre de Mach-Zehnder.

Dans cette équation, t décrit la transmission et r la réflexion. Nous avons supposé la lame séparatrice *symétrique* : les coefficients t et r sont identiques pour les deux lignes de (1.31), ce qui peut se déduire du principe de retour inverse de la lumière ; pour le cas non symétrique, voir Zeilinger [1981]. L'équation (1.31) s'écrit sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \bar{c} \\ \bar{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t & r \\ r & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix}\tag{1.32}$$

Nous supposons également la lame séparatrice sans pertes : l'intensité lumineuse à la sortie doit être égale à l'intensité d'entrée

$$|\bar{c}|^2 + |\bar{d}|^2 = |t\bar{a} + r\bar{b}|^2 + |r\bar{a} + t\bar{b}|^2 = |\bar{a}|^2 + |\bar{b}|^2 \quad (1.33)$$

Cette condition est équivalente à l'unitarité de la matrice $S : S^\dagger S = I$. On déduit de (1.33) les conditions suivantes sur r et t

$$|t|^2 + |r|^2 = 1 \quad \text{Re}(t^*r) = 0 \quad (1.34)$$

Si les phases α et β de t et r sont définies par $t = |t| \exp(i\alpha)$ et $r = |r| \exp(i\beta)$, l'équation(1.34) implique

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2} \pm n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.35)$$

Comme la phase globale de t et r est sans pertinence physique, on peut choisir t réel positif, $t = |t|$, et $r = \pm i|r|$.

Le raisonnement ci-dessus se transpose immédiatement au cas de particules quantiques : il suffit de remplacer les amplitudes ondulatoires \bar{a}, \dots, \bar{d} par des amplitudes de probabilité a, \dots, d . Dans le schéma de la figure 1.14, l'amplitude de probabilité pour la particule quantique d'arriver sur la première lame séparatrice est a ; l'amplitude de probabilité de la transmission est ta , celle de la réflexion est ra . La seconde lame séparatrice recombine les faisceaux réfléchis et transmis par la première lame. On suppose que la phase du faisceau supérieur peut être modifiée de façon contrôlée, et que ce faisceau subit un changement de phase δ variable : par exemple, dans le cas d'un photon, on insère une lame transparente d'épaisseur variable afin de modifier le chemin optique. Dans ces conditions, l'amplitude de probabilité de détection par le détecteur D_1 à la sortie du second diviseur de faisceau est

$$a_1 = atr(1 + e^{i\delta})$$

tandis que celle de détection par D_2 est

$$a_2 = a(r^2 + t^2 e^{i\delta})$$

Les probabilités p_1 et p_2 de détection par D_1 et D_2 sont donc

$$\begin{aligned} p_1 &= |a_1|^2 = 2|a|^2 |tr|^2 (1 + \cos \delta) \\ p_2 &= |a_2|^2 = |a|^2 (|r|^4 + |t|^4 - 2|tr|^2 \cos \delta) \end{aligned} \quad (1.36)$$

On vérifie que la probabilité totale de détection est bien $|a|^2$: $p_1 + p_2 = |a|^2$. Le phénomène d'interférences est mis en évidence en faisant varier δ : d'après (1.36), le taux de comptage du détecteur D_1 , par exemple, varie sinusoidalement en fonction de δ .

Les formules se simplifient lorsque les diviseurs de faisceau sont équilibrés, c'est-à-dire que les intensités transmises et réfléchies sont identiques : $|t| = |r| = 1/\sqrt{2}$. Dans ce cas (1.36) devient

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{1}{2}|a|^2(1 + \cos \delta) \\ p_2 &= \frac{1}{2}|a|^2(1 - \cos \delta) \end{aligned} \tag{1.37}$$

Une expérience dite « à choix retardé » permet de montrer que la lame L_2 peut être mise en place pendant que le photon est en vol entre L_1 et L_2 , sans affecter la figure d'interférences (Jacques *et al.* [2007]). Le photon ne « choisit » pas une trajectoire au passage de L_1 .

1.5 Niveaux d'énergie

Cette section a pour objectif de définir la notion de niveau d'énergie, en rappelant d'abord la notion classique. En nous appuyant sur l'atome de Bohr, nous pourrions passer simplement à la notion quantique, puis nous examinerons les transitions radiatives entre niveaux.

1.5.1 Niveaux d'énergie en mécanique classique et modèles classiques de l'atome

Considérons une particule classique se déplaçant pour simplifier sur une droite choisie comme axe des x , et dont l'énergie potentielle est $U(x)$. En mécanique quantique, on appelle en général $U(x)$ *le potentiel*. Il est bien connu que l'énergie mécanique E , somme de l'énergie cinétique K et de l'énergie potentielle U est une constante : $E = K + U = \text{cste}$. Supposons que l'énergie potentielle a la forme de la figure 1.15, celle d'un « puits de potentiel » : elle tend vers une même constante pour $x \rightarrow \pm\infty$. Il sera commode de fixer le zéro d'énergie de telle sorte que $E = 0$ pour une particule d'énergie cinétique nulle à l'infini.

Deux situations sont possibles

- (i) La particule possède une énergie $E > 0$; alors, si elle part par exemple de $x = -\infty$, elle est d'abord accélérée puis freinée au passage du puits de potentiel et elle rejoint $x = +\infty$ avec une vitesse finale égale à sa vitesse initiale. On dit que la particule est dans un *état de diffusion*.
- (ii) L'énergie est négative : $U_0 < E < 0$. Alors la particule ne peut pas sortir du puits : elle effectue des allers-retours dans le puits entre les deux points x_1 et x_2 qui vérifient $E = U(x_{1,2})$. Elle est confinée dans une région finie de l'axe des x , $x_1 \leq x \leq x_2$, et se trouve dans un *état lié*. Les points x_1 et x_2 sont appelés *points de rebroussement* de la trajectoire.

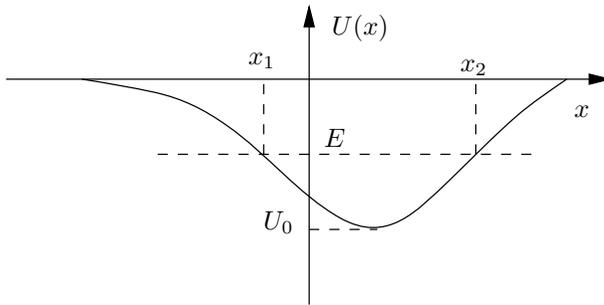


FIG. 1.15 – Puits de potentiel.

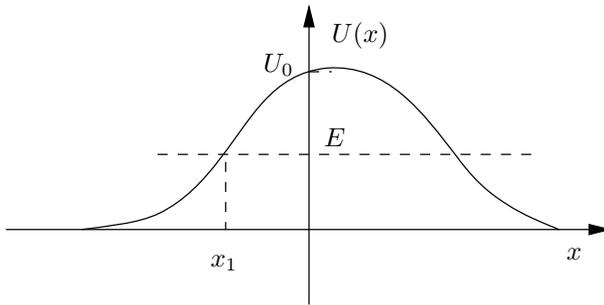


FIG. 1.16 – Barrière de potentiel.

Lorsque l'énergie potentielle est positive³³ (figure 1.16), on a affaire à une « barrière de potentiel » : dans ce cas $E > 0$ et on observe seulement des états de diffusion. Si $E < U_0$ la particule partant de $x = -\infty$ est d'abord freinée, puis elle repart en arrière au point x_1 qui vérifie $U(x_1) = E$: elle rebondit sur la barrière de potentiel. Si $E > U_0$, la particule franchit la barrière de potentiel et rejoint $x = +\infty$ en retrouvant sa vitesse initiale.

En mécanique classique, l'énergie d'un état lié peut prendre toutes les valeurs possibles entre U_0 et 0. En mécanique quantique cette énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes. En revanche, comme en mécanique classique, l'énergie d'un état de diffusion est arbitraire. Cependant on trouvera (sections 9.3 et 12.4.5) des différences notables avec la mécanique classique. Par exemple la particule peut franchir une barrière de potentiel même si $E < U_0$: c'est « l'effet tunnel ». Inversement elle peut repartir en arrière même si $E > U_0$, ce que l'on appelle réflexion quantique.

Appliquons ces considérations de mécanique classique aux atomes : le premier modèle d'atomes fut proposé par Thomson (figure 1.17a), qui le

33. Naturellement on peut envisager des situations plus complexes que celles de la figure (par exemple des double-puits) ; nous nous contentons de décrire les cas les plus simples.

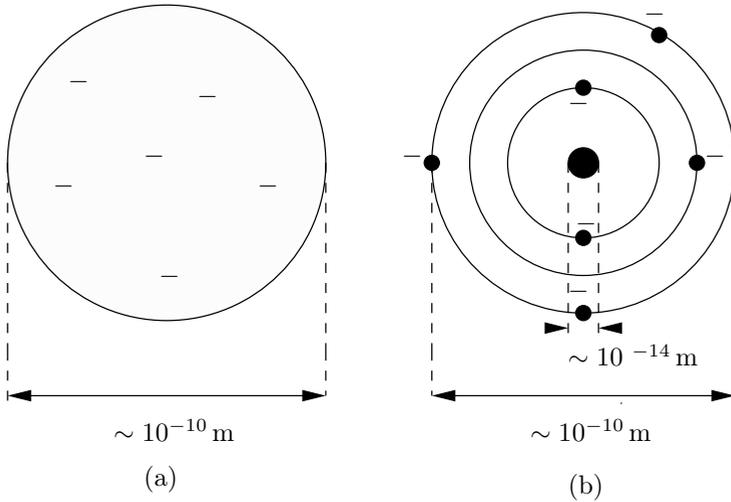


FIG. 1.17 – Modèles d'atome : (a) Thomson : les électrons sont situés dans une distribution de charge positive continue. (b) Rutherford : les électrons décrivent des orbites autour du noyau.

représentait par une sphère uniformément chargée positivement, avec des électrons en mouvement dans cette distribution de charge. Un résultat élémentaire d'électromagnétisme montre que les électrons se trouvent dans un potentiel harmonique, et leur niveau d'énergie fondamental (stable) est celui où ils sont immobiles au fond du puits de potentiel ; les états excités correspondent à des vibrations autour de la position d'équilibre. Ce modèle fut éliminé³⁴ par les expériences de Geiger et Marsden, qui montrèrent que la diffusion de particules α (noyaux d' ^4He) par des atomes était incompatible avec ce modèle. Rutherford déduisit de ces expériences l'existence du noyau atomique, de dimension inférieure à 10 fm, et proposa le modèle planétaire de l'atome (figure 1.17b) : les électrons tournent autour du noyau, tout comme les planètes tournent autour du Soleil, l'attraction gravitationnelle étant remplacée par l'attraction coulombienne. Ce modèle présente deux défauts majeurs, non indépendants : aucune échelle ne fixe les dimensions de l'atome et l'atome est instable, car les électrons sur orbite rayonnent et finissent par tomber sur le noyau. Dans ce processus, un spectre continu de fréquences est émis. Au contraire, les résultats expérimentaux de la fin du XIX^e siècle montraient que (figure 1.18) :

- les fréquences du rayonnement émis ou absorbé par un atome sont discrètes, elles s'expriment en fonction de deux indices entiers n et m et peuvent s'écrire comme des différences : $\omega_{nm} = A_n - A_m$;

34. Pourtant ce modèle fait encore le bonheur des physiciens atomistes. . .

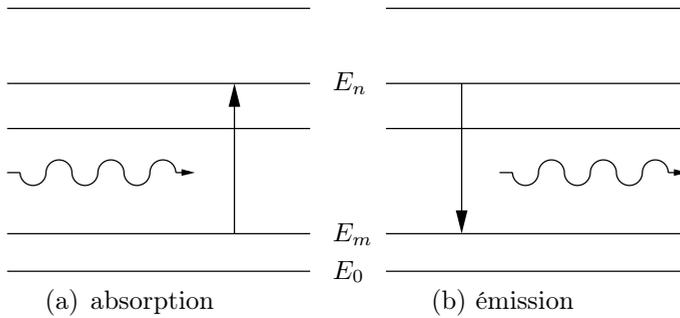


FIG. 1.18 – Émission et absorption de rayonnement entre deux niveaux E_n et E_m .

- il existe une configuration fondamentale de l'atome où celui-ci ne rayonne pas.

Ces résultats suggéraient que l'atome émettait ou absorbait un photon en passant d'un niveau à un autre, la fréquence ω_{nm} du photon étant donné par ($E_n > E_m$)

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m \quad (1.38)$$

Les fréquences ω_{nm} sont appelées *fréquences de Bohr*. Suivant ces arguments, seuls certains niveaux repérés par un indice discret peuvent exister : c'est la *quantification des niveaux d'énergie*.

1.5.2 L'atome de Bohr

Pour expliquer cette quantification, Bohr plaque sur la mécanique classique et l'atome de Rutherford une règle *ad hoc* de quantification. Nous utiliserons une version légèrement différente de l'argument original de Bohr. Considérant pour simplifier l'atome d'hydrogène et une orbite circulaire de rayon a pour l'électron de masse m_e et de charge q_e , nous postulons que le périmètre de l'orbite $2\pi a$ doit être un multiple entier de la longueur d'onde de de Broglie λ

$$2\pi a = n\lambda \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.39)$$

Intuitivement, ceci peut s'expliquer, car cette condition revient à exiger que la phase de l'onde de de Broglie revienne à sa valeur initiale après un tour complet, et on forme ainsi une onde stationnaire. On déduit de (1.39) et (1.26)

$$2\pi a = n \frac{h}{p} = \frac{nh}{m_e v}$$

D'après la loi de Newton

$$\frac{m_e v^2}{a} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 a^2} = \frac{e^2}{a^2} \quad \text{d'où} \quad v^2 = \frac{e^2}{m_e a}$$

où nous avons défini la quantité $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$. En éliminant la vitesse v entre ces deux équations on obtient le rayon de l'orbite

$$a = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (1.40)$$

Le cas $n = 1$ correspond à l'orbite de plus petit rayon, et ce rayon, appelé *rayon de Bohr*, est noté a_0

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.53 \text{ \AA} \quad (1.41)$$

L'énergie du niveau étiqueté par n est

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{a} = -\frac{e^2}{2a} = -\frac{m_e e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{R_\infty}{n^2}$$

Les niveaux d'énergie E_n s'expriment en fonction de la *constante de Rydberg*³⁵ R_∞

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (1.42)$$

sous la forme

$$E_n = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad (1.43)$$

Cette formule donne le *spectre* (des niveaux) de l'atome d'hydrogène. Le niveau fondamental correspond à $n = 1$ et l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène est R_∞ . Les photons émis par l'atome d'hydrogène ont des fréquences

$$\hbar\omega_{nm} = -R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad n > m \quad (1.44)$$

en parfait accord avec les données spectroscopiques sur l'hydrogène. La simplicité avec laquelle la théorie de Bohr permet de calculer le spectre de l'atome d'hydrogène ne doit cependant pas masquer son caractère artificiel.

La généralisation par Sommerfeld de la théorie de Bohr consiste à postuler la relation

$$\int p_i dq_i = nh \quad (1.45)$$

où q_i et p_i sont les coordonnées et les moments conjugués au sens de la mécanique classique et n un entier ≥ 1 . Cependant on sait aujourd'hui que les conditions (1.45) ne sont valables que pour certains systèmes très particuliers, les systèmes intégrables (§ 12.4.4) et pour n grand, sauf exception. La théorie de Bohr-Sommerfeld est incapable de décrire les atomes à plusieurs électrons, ainsi que les états de diffusion. Le succès de la théorie de Bohr pour l'atome d'hydrogène est un hasard heureux !

35. La raison pour l'indice ∞ est la suivante : la théorie exposée ici suppose le proton infiniment lourd. Tenir compte de la masse finie m_p du proton modifie R_∞ en $R_\infty/(1 + m_e/m_p)$: cf. exercice 1.6.5.

1.5.3 Ordres de grandeur en physique atomique

Les unités MKS, adaptées au monde à notre échelle, sont malcommodes en physique atomique. *A priori* doivent intervenir les constantes fondamentales \hbar et c , ainsi que la masse m_e de l'électron ; le proton peut être considéré comme infiniment lourd, ou mieux la masse de l'électron peut être remplacée par la masse réduite (*cf.* note 35). Rappelons la valeur de ces constantes, avec une précision de $\sim 10^{-3}$ qui nous suffira pour les applications numériques

$$\begin{aligned}\hbar &= 1.055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ c &= 3 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1} \\ m_e &= 0.911 \times 10^{-30} \text{ kg}\end{aligned}$$

À partir de ces constantes, on peut fabriquer des unités naturelles

- Unité de longueur³⁶ : $\frac{\hbar}{m_e c} = 3.86 \times 10^{-13} \text{ m}$
- Unité de temps : $\frac{\hbar}{m_e c^2} = 1.29 \times 10^{-21} \text{ s}$
- Unité d'énergie : $m_e c^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV}$

Ces unités sont déjà plus proches que les unités MKS des ordres de grandeur caractéristiques de la physique atomique, mais il manque encore quelques ordres de grandeur. En fait on doit faire intervenir une quantité mesurant l'intensité de la force, la constante de couplage $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$. À partir de \hbar , c et e^2 , on forme une quantité sans dimension, la *constante de structure fine*³⁷ α

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (1.46)$$

36. Appelée *longueur d'onde Compton* de l'électron.

37. Cette terminologie est utilisée pour des raisons historiques et prête à confusion ; il vaudrait bien mieux utiliser « constante atomique ». α est la *constante de couplage de l'électrodynamique* ; « constante » est à mettre entre guillemets, car α n'est pas vraiment une constante, en raison de propriétés subtiles de la théorie quantique des champs. Les fluctuations quantiques du champ électron-positron ont un effet d'écran sur la charge : en raison des paires (virtuelles) électron-positron, la charge d'une particule testée à grande distance est plus petite que la même charge testée à courte distance. D'après l'inégalité de Heisenberg (1.30), courte distance implique grande impulsion, et donc grande énergie : pour explorer à courte distance, il faut utiliser des particules de haute énergie. On peut donc conclure que la constante de structure fine est une fonction croissante de l'énergie, et de fait, si on se place à des échelles d'énergie de l'ordre de l'énergie au repos du boson Z^0 , $m_Z c^2 \simeq 90 \text{ GeV}$, alors $\alpha \simeq 1/129$, au lieu de la valeur de basse énergie $\alpha \simeq 1/137$. La procédure de renormalisation, qui élimine les infinis, permet de choisir une échelle d'énergie (ou de distance) arbitraire pour définir α . En résumé, α dépend de l'échelle d'énergie caractéristique du processus étudié, et aussi du détail de la procédure de renormalisation (*cf.* note 13). Cette dépendance en énergie de α est visible depuis quelques années dans les expériences de précision de la physique des hautes énergies. Voir aussi l'exercice 15.6.3.

Les relations entre unités atomiques et unités naturelles sont maintenant faciles à obtenir ; pour le rayon de Bohr, unité de longueur naturelle de la physique atomique, on obtient

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar}{m_e c} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} \simeq 0.53 \text{ \AA} \quad (1.47)$$

Le rydberg, unité naturelle d'énergie en physique atomique, est relié à $m_e c^2$ par

$$R_\infty = \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 m_e c^2 = \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (1.48)$$

La vitesse de l'électron sur l'orbite du niveau fondamental est $v = \alpha c = e^2/\hbar$, et la période de cette orbite, qui est l'unité de temps atomique, vaut

$$T = \frac{2\pi a_0}{v} = 2\pi \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} \frac{1}{\alpha c} = \frac{2\pi}{\alpha^2} \frac{\hbar}{m_e c^2} \simeq 1.5 \times 10^{-16} \text{ s} \quad (1.49)$$

Les équations (1.47–1.49) montrent qu'unités naturelles et unités atomiques sont reliées par des puissances de α .

Comme dernier exemple, donnons une estimation de la vie moyenne d'un électron dans un état excité. Nous allons utiliser une image classique, en admettant que cet électron tourne sur une orbite de rayon³⁸ a , image que nous allons corriger en la complétant judicieusement le moment venu par des considérations quantiques : c'est ce que l'on appelle un *raisonnement semi-classique*. Un calcul d'électromagnétisme classique montre qu'un électron sur une orbite circulaire parcourue avec une vitesse $v = \omega a \ll c$ rayonne une puissance

$$P = \frac{2}{3c^3} e^2 a^2 \omega^4 = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{a^2 \hbar \omega^4}{c^2} \sim \alpha \omega^2 \hbar \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 \quad (1.50)$$

C'est ici qu'intervient le raisonnement quantique : l'atome émettra un photon quand il aura accumulé une énergie $\sim \hbar\omega$, ce qui va lui prendre un temps τ qui sera précisément la *vie moyenne de l'état excité*

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{P}{\hbar\omega} \sim \alpha \omega \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 \quad (1.51)$$

Mais nous avons vu que $a\omega/c = v/c \sim \alpha$, et le rapport de la période T à la vie moyenne τ est

$$\frac{T}{\tau} \sim \frac{1}{\tau\omega} \sim \alpha^3 \sim 10^{-6} \quad (1.52)$$

L'orbite est parcourue environ un million de fois avant l'émission d'un photon : un état excité est donc bien défini. Pour l'état fondamental de l'atome

38. On peut aussi assimiler l'atome à un dipôle oscillant de fréquence ω , comme dans le modèle de Thomson. La seule différence est que le facteur $2/3$ dans (1.50) devient $1/3$, ce qui est sans influence sur les ordres de grandeur.

d'hydrogène dont l'énergie est ~ 10 eV, nous avons vu que $T \sim 10^{-16}$ s ; pour l'électron externe d'un alcalin avec une énergie ~ 1 eV, nous avons plutôt $T \sim 10^{-15}$ s, et l'ordre de grandeur de la vie moyenne d'un état excité est $\sim 10^{-7} - 10^{-9}$ s. Par exemple le premier niveau excité du rubidium a une vie moyenne de 2.7×10^{-8} s.

Les raisonnements utilisés dans cette section ont le mérite de la simplicité, mais ils ne sont pas satisfaisants. Ils consistent à plaquer arbitrairement une contrainte quantique sur un raisonnement classique, au moment où celui-ci devient intenable, et le lecteur pourra estimer à juste titre qu'il n'est pas convaincu par ce type de raisonnement. Il est donc indispensable de passer à une théorie entièrement nouvelle, qui ne soit plus guidée par la physique classique, mais qui *développe son propre cadre de façon autonome, sans référence à la physique classique*.

1.6 Exercices

1.6.1 Ordres de grandeur

1. On se propose d'explorer des distances de l'ordre de la taille d'un atome, soit 1 Å, avec des photons, des neutrons ou des électrons. Quel sera en eV l'ordre de grandeur de l'énergie de ces particules ?

2. Lorsque la longueur d'onde λ d'une onde sonore est grande par rapport au pas du réseau cristallin où se propage la vibration, la fréquence ω de cette onde sonore est linéaire dans le vecteur d'onde $k = 2\pi/\lambda$: $\omega = c_s k$, où c_s est la vitesse du son. Dans le cas de l'acier $c_s \simeq 5 \times 10^3$ m.s $^{-1}$. Quelle est l'énergie $\hbar\omega$ d'une onde sonore pour $k = 1$ nm $^{-1}$? La particule analogue du photon pour les ondes sonores est appelée *phonon*, et $\hbar\omega$ est l'énergie d'un phonon. Sachant qu'un phonon peut être créé par collision inélastique sur le cristal, utiliserez-vous des neutrons ou des photons pour étudier les phonons ?

3. Dans une expérience d'interférences avec des fullerènes C₆₀, qui sont aujourd'hui les plus gros objets avec lesquels on a vérifié le comportement ondulatoire³⁹, la vitesse moyenne des molécules est de 220 m.s $^{-1}$. Quelle est leur longueur d'onde de de Broglie ? Comment se compare-t-elle aux dimensions de la molécule ?

4. Une molécule diatomique est formée de deux atomes de masse M_1 et M_2 ; elle a la forme d'une haltère. Les deux noyaux atomiques sont distants de $r_0 = ba_0$, où a_0 est le rayon de Bohr (1.41) et b un coefficient numérique ~ 1 . On suppose que la molécule tourne autour de son centre d'inertie suivant un axe perpendiculaire à la droite joignant les noyaux, appelée droite des noyaux. Montrer que son moment d'inertie est $I = \mu r_0^2$ où $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ est la masse réduite. On suppose que son moment angulaire est \hbar . Quelle est alors la vitesse angulaire de rotation et quelle est l'énergie ε_{rot} correspondante ? Montrer que cette énergie est proportionnelle à $(m_e/\mu)R_\infty$ où m_e est la masse de l'électron et $R_\infty = m_e e^4 / (2\hbar^2) = e^2 / (2a_0)$.

5. La molécule peut aussi vibrer le long de la droite des noyaux autour de sa position d'équilibre $r = r_0$, la force de rappel étant de la forme $-K(r - r_0)$, avec $Kr_0^2 = cR_\infty$ où c est un coefficient numérique ~ 1 . Quelles sont la fréquence de vibration ω_v et l'énergie $\hbar\omega_v$ correspondante ? Montrer que cette énergie est proportionnelle à $\sqrt{m_e/\mu} R_\infty$. Exemple : la

39. Arndt *et al.* [1999] et [2005].

molécule de HCl^{35} , où les valeurs expérimentales sont $r_0 = 1.27 \text{ \AA}$, $\varepsilon_{\text{rot}} = 1.3 \times 10^{-3} \text{ eV}$, $\hbar\omega_v = 0.36 \text{ eV}$. Calculer les valeurs numériques de b et c . Quelle serait la longueur d'onde d'un photon ayant l'énergie ε_{rot} , $\hbar\omega_v$? Dans quels domaines se trouvent ces longueurs d'onde?

6. L'absence d'une théorie quantique de la gravitation oblige à limiter toute théorie à des énergies plus petites que E_P , l'énergie de Planck. Par un argument dimensionnel, construire E_P en fonction de la constante de gravitation G (1.5), \hbar et c et donner sa valeur numérique. Quelle est la longueur correspondante, ou longueur de Planck l_P ?

1.6.2 Le corps noir

1. Démontrer l'équation (note 22)

$$\int dx dp \delta\left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) f(E) = \frac{2\pi}{\omega} f(E)$$

2. On se propose de relier la densité d'énergie par unité de fréquence $\epsilon(\omega, T)$ à la puissance émise $u(\omega, T)$: équation (1.15). On considère une enceinte portée à la température T (figure 1.4). Soit $\bar{\epsilon}(k, T) d^3k$ la densité d'énergie dans d^3k autour de \vec{k} , qui ne dépend que de $k = |\vec{k}|$. Montrer que

$$\bar{\epsilon}(k, T) = \frac{c}{4\pi k^2} \epsilon(\omega, T)$$

Le vecteur de Poynting pour une onde s'échappant de l'enceinte avec un vecteur d'onde \vec{k} est $c\bar{\epsilon}(k, T)\hat{k}$. Montrer que le flux du vecteur de Poynting à travers une ouverture d'aire S est

$$\Phi = \frac{1}{4} cS \int_0^\infty \epsilon(\omega, T) d\omega$$

et en déduire (1.15).

3. Montrer par analyse dimensionnelle qu'en physique classique on doit avoir pour la densité d'énergie du corps noir

$$\epsilon(T) = A(k_B T)c^{-3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega$$

où A est un coefficient numérique.

4. Chaque mode \vec{k} du champ électromagnétique dans l'enceinte est un oscillateur harmonique. En mécanique statistique classique, l'énergie d'un tel mode est $2k_B T$ (pourquoi ce facteur 2?). Montrer que la densité d'énergie dans l'enceinte est

$$\epsilon(T) = \frac{1}{\pi^2} (k_B T)c^{-3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega$$

et en déduire A .

5. Démontrer (1.22) et vérifier que l'on retrouve l'expression classique pour $\hbar\omega \ll k_B T$, c'est-à-dire pour une température suffisamment grande à ω fixé. Ceci est un résultat très général : *l'approximation classique est valable à haute température.*

1.6.3 Inégalités de Heisenberg

Dans l'expérience théorique de la figure 1.12, montrer que l'impulsion δp_x communiquée à l'écran vaut $pa/(2D)$, où a est la distance entre les fentes F_1 et F_2 (figure 1.12) et p l'impulsion des photons. La détermination de la trajectoire implique que $\Delta p_x \ll \delta p_x$, où Δp_x est la dispersion sur l'impulsion *initiale* de l'écran. Quelle est alors la dispersion Δx sur la position de F_0 ? En déduire que les interférences sont alors détruites. Voir Wootters et Zurek [1979].

1.6.4 Diffraction de neutrons par un cristal

La diffraction des neutrons est une des principales techniques d'analyse de la structure des cristaux. On considère pour simplifier un cristal bidimensionnel composé d'atomes identiques, les vecteurs d'onde étant situés dans le plan du cristal⁴⁰. Les atomes du cristal se trouvent aux points du réseau (figure 1.19)

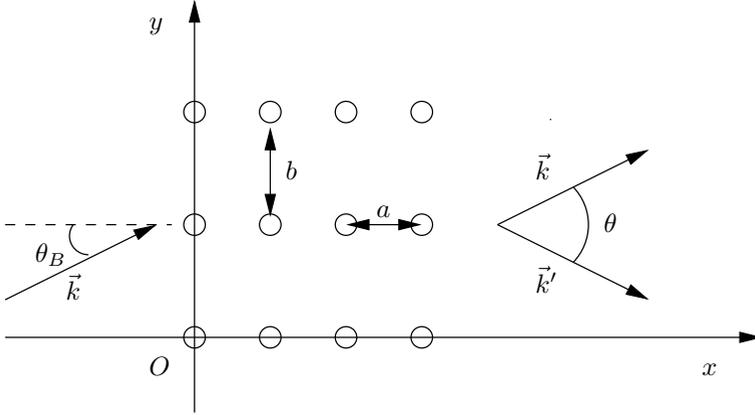


FIG. 1.19 – Diffraction de neutrons par un cristal.

$$\vec{r}_i = na\hat{x} + mb\hat{y} \quad n = 0, 1, \dots, N-1; \quad m = 0, 1, \dots, M-1$$

Les neutrons interagissent avec les noyaux des atomes⁴¹ par une interaction de type nucléaire. On appelle $f(\theta)$ l'amplitude de probabilité pour qu'un neutron d'impulsion $\hbar\vec{k}$ soit diffusé dans la direction \hat{k}' par un atome situé à l'origine des coordonnées, θ étant l'angle entre \hat{k} et \hat{k}' . Comme l'énergie des neutrons est très faible, ~ 0.01 eV, $f(\theta)$ est indépendant de θ (§ 13.2.4) : $f(\theta) = f$. La collision entre le neutron et le noyau atomique est élastique et l'état du cristal est inchangé dans la collision : il est impossible de savoir quel atome a diffusé un neutron.

1. Montrer que l'amplitude de diffusion par un atome situé au point \vec{r}_i est

$$f_i = f e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} = f e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$

avec $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$.

2. Montrer que l'amplitude de diffusion f_{tot} par le cristal est de la forme

$$f_{\text{tot}} = fF(aq_x, bq_y)$$

40. On peut aussi envisager une diffusion 3D par un cristal 2D : cf. Wichman [1974], chapitre 5, ce qui donne un modèle pour la diffraction par la surface d'un cristal.

41. Il existe aussi une interaction entre le moment magnétique du neutron et le magnétisme de l'atome, qui joue un rôle très important pour l'étude du magnétisme, mais qui ne nous concerne pas dans ce problème.

la fonction $F(aq_x, bq_y)$ étant donnée par

$$F(aq_x, bq_y) = \exp\left(-i\frac{aq_x(N-1)}{2}\right) \exp\left(-i\frac{bq_y(M-1)}{2}\right) \\ \times \left[\frac{\sin(aq_x N/2)}{\sin(aq_x/2)}\right] \left[\frac{\sin(bq_y M/2)}{\sin(bq_y/2)}\right]$$

3. Montrer que pour $N, M \gg 1$ la probabilité de diffusion est proportionnelle à $(NM)^2$ lorsque \vec{q} a pour composantes

$$q_x = \frac{2\pi n_x}{a} \quad q_y = \frac{2\pi n_y}{b}$$

les nombres n_x et n_y étant des nombres entiers : lorsque les composantes de \vec{q} sont de cette forme, on dit que \vec{q} appartient au *réseau réciproque* du réseau cristallin. On obtient des maxima de diffraction si \vec{q} est un vecteur du réseau réciproque. Quelle est la largeur du pic de diffraction autour d'un maximum ? En déduire que l'intensité dans le pic est proportionnelle à NM .

4. On doit tenir compte du caractère élastique de la diffusion. Montrer que la condition de diffusion élastique est

$$2\vec{k} \cdot \vec{q} + q^2 = 0$$

Un vecteur du réseau réciproque ne donnera un maximum de diffraction que si cette condition est vérifiée. Pour une longueur d'onde fixée, cette condition ne pourra être satisfaite que si l'angle d'incidence prend des valeurs particulières, appelées *angles de Bragg* θ_B . Une étude simple est possible si $n_x = 0$. Montrer que dans ce cas un angle d'incidence θ_B donne lieu à diffraction pour

$$\sin \theta_B = \frac{\pi n}{bk}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Dans le cas général, il est commode de donner une interprétation géométrique de la condition de Bragg : l'extrémité du vecteur \vec{k} étant située sur un point du réseau réciproque, on trace un cercle de rayon k . Si ce cercle passe par un autre point du réseau réciproque, alors on obtiendra un maximum de diffraction. En général un faisceau de neutrons incident sur un cristal ne donnera pas de pic de diffraction. Il faut choisir convenablement l'angle d'incidence et/ou la longueur d'onde. Pourquoi ce phénomène ne se produit-il pas pour la diffraction par un réseau à une dimension ? Que se passerait-il s'il y avait seulement la première rangée verticale d'atomes sur la droite $y = 0$?

5. On suppose maintenant que le cristal est formé de deux types d'atomes. Le motif élémentaire, ou *maille* du cristal, est formé de la façon suivante : deux atomes de type 1 sont situés respectivement en

$$\vec{r}_1 = 0 \quad \text{et} \quad \vec{r}_1' = a\hat{x} + b\hat{y}$$

et deux atomes de type 2 en

$$\vec{r}_2 = a\hat{x} \quad \text{et} \quad \vec{r}_2' = b\hat{y}$$

La maille se répète avec une périodicité $2a$ dans la direction x et $2b$ dans la direction y . Soit f_1 (f_2) l'amplitude de diffusion d'un neutron par un atome de type 1 (2) situé à l'origine des coordonnées ; on pourra prendre f_1 et f_2 réels. Si NM est le nombre de mailles, montrer que l'amplitude de diffusion par le cristal est proportionnelle à $F(2aq_x, 2bq_y)$. Déterminer le facteur de proportionnalité en fonction de f_1 et f_2 . Montrer que si q_x et q_y correspondent à un maximum de diffraction, ce facteur de proportionnalité vaut

$$f_1 [1 + (-1)^{n_x + n_y}] + f_2 [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}]$$

Discuter le résultat en fonction de la parité de n_x et de n_y .

6. Les atomes 1 et 2 forment un alliage⁴² : à basse température les atomes sont dans la configuration de la question 5, mais au-dessus d'une certaine température chaque atome a une probabilité de 50 % d'occuper un site quelconque et tous les sites sont équivalents. Comment va évoluer la figure de diffraction ?

1.6.5 Atomes hydrogénoïdes

Calculer en fonction de R_∞ le niveau d'énergie fondamental de l'atome d'hydrogène ordinaire, de l'atome de deutérium et de l'atome d'hélium une fois ionisé en tenant compte de ce que la masse des nucléons est finie. Suggestion : quelles sont les masses réduites ?

1.6.6 Interféromètre à neutrons et gravité

Un interféromètre à neutrons (figure 1.20), taillé dans un monocristal de silicium de quelques cm, est fondé sur le même principe que celui de Mach-Zehnder (§ 1.4.5) : le faisceau incident supposé monochromatique (c'est-à-dire de longueur d'onde fixée) arrive sur une première lame séparatrice en A , l'angle d'incidence et la longueur d'onde étant choisies de telle sorte que l'on obtienne un pic de diffraction (voir exercice 1.6.4, question 4) : l'angle d'incidence est un angle de Bragg θ_B . Une partie du faisceau est transmise dans le faisceau I avec une amplitude de probabilité t et l'autre partie est réfractée dans le faisceau II avec une amplitude de probabilité r . Ces amplitudes vérifient $|t|^2 + |r|^2 = 1$. Les faisceaux I et II arrivent sur une seconde lame séparatrice respectivement en B et en D et les parties réfractées de I et II sont recombinées par une troisième lame en C . Les neutrons sont détectés par deux compteurs D_1 et D_2 . Sur le trajet II les neutrons subissent un déphasage δ qui peut avoir diverses origines (différence de longueur entre les trajets, gravité, passage dans un champ magnétique, etc.), et l'objectif de l'interférométrie neutronique est précisément de mesurer ce déphasage.

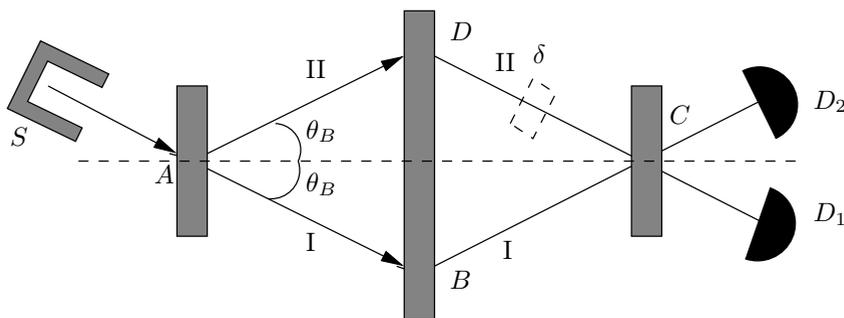


FIG. 1.20 – Interféromètre à neutrons. S est la source de neutrons.

1. Montrer que l'amplitude de probabilité a_1 pour qu'un neutron arrive sur D_1 est

$$a_1 = a_0(e^{i\delta} trr + rrt)$$

42. Un exemple du phénomène décrit dans cette question est donné par le bronze, pour une proportion de 50 % de cuivre et de 50 % de zinc.

et que la probabilité de détection par D_1 est

$$p_1 = 2|a_0|^2|t|^2|r|^4(1 + \cos \delta) = A(1 + \cos \delta)$$

a_0 étant l'amplitude incidente sur le premier cristal.

2. Quelle sont l'amplitude a_2 d'arrivée d'un neutron sur le détecteur D_2 en fonction de r , t et a_0 et la probabilité p_2 correspondante ? Pourquoi doit-on avoir $p_1 + p_2 = \text{cste}$? En déduire

$$p_2 = B - A \cos \delta$$

Quelle est l'expression de B en fonction de t , r et a_0 ? Posant

$$t = |t|e^{i\alpha} \quad r = |r|e^{i\beta}$$

montrer que

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2} \pm n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

3. On tient compte de la gravité : comment varie en fonction de l'altitude z le vecteur d'onde $k = 2\pi/\lambda$ d'un neutron lorsqu'il est placé dans un champ de pesanteur, l'accélération de la pesanteur étant g ? Comparer les valeurs numériques de l'énergie cinétique du neutron et de son énergie gravitationnelle⁴³ $m_n g z$ (m_n est la masse du neutron) et en déduire une approximation pour k . Le plan $ABDC$ étant initialement horizontal, on fait tourner autour de AB ce plan qui devient vertical. Montrer que cette rotation induit une différence de phase entre les deux trajets

$$\Delta\phi = \frac{m_n^2 g S}{\hbar^2 k} = \frac{2\pi m_n^2 g S \lambda}{h^2}$$

où S est l'aire du losange $ABDC$.

4. Si le plan $ABDC$ fait un angle variable θ avec la verticale, discuter qualitativement la variation de la probabilité de détection des neutrons en fonction de θ . Données numériques (Colella *et al.* [1975]) : $\lambda = 1.44 \text{ \AA}$, $S = 10.1 \text{ cm}^2$.

1.6.7 Diffusion cohérente et diffusion incohérente de neutrons par un cristal

On se propose d'étudier la diffusion de neutrons par un cristal formé de deux types de noyaux. Un site donné du cristal est occupé par un noyau de type 1 avec une probabilité p_1 ou par un noyau de type 2 avec une probabilité $p_2 = 1 - p_1$. Le nombre total de noyaux est \mathcal{N} , et il y a donc $p_1 \mathcal{N}$ noyaux de type 1 et $p_2 \mathcal{N}$ noyaux de type 2 dans le cristal. Au site i , $i = 1, \dots, \mathcal{N}$, on associe un nombre α_i qui prend la valeur 1 si le site est occupé par un noyau de type 1 et 0 s'il est occupé par un noyau de type 2. L'ensemble $\{\alpha_i\}$ des α_i , avec $\sum_i \alpha_i = p_1 \mathcal{N}$, définit une configuration du cristal. L'amplitude de diffusion d'un neutron par le cristal dans la configuration $\{\alpha_i\}$ est (*cf.* l'exercice 1.6.4)

$$f_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} (\alpha_i f_1 + (1 - \alpha_i) f_2) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$

où f_1 (f_2) est l'amplitude de diffusion d'un neutron par un noyau de type 1 (2).

43. L'énergie étant définie à une constante additive près, on fixe par convention le zéro d'énergie de la façon suivante : un neutron de vitesse nulle et d'altitude $z = 0$ a une énergie nulle.

1. On note $\langle \bullet \rangle$ la moyenne sur toutes les configurations possibles du cristal, en supposant que les occupations des sites ne sont pas corrélées (par exemple l'occupation d'un site par un noyau de type 1 ne doit pas augmenter la probabilité qu'un site plus proche voisin soit aussi occupé par un noyau de type 1). Démontrer les identités

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = p_1^2 + p_1 p_2 \delta_{ij} \quad \langle \alpha_i (1 - \alpha_j) \rangle = p_1 p_2 (1 - \delta_{ij})$$

2. Dédurre de ces identités la moyenne sur les configurations de $|f_{\text{tot}}|^2$

$$\langle |f_{\text{tot}}|^2 \rangle = (p_1 f_1 + p_2 f_2)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \mathcal{N} p_1 p_2 (f_1 - f_2)^2$$

Le premier terme décrit la *diffusion cohérente* et donne lieu à des pics de diffraction. Le deuxième est proportionnel au nombre de sites et est indépendant des angles : ce terme correspond à la *diffusion incohérente*.

1.7 Bibliographie

On trouve une introduction élémentaire à la physique quantique dans Scarani [2003] ou dans Hey et Walters [2004]. Il est également recommandé de lire les chapitres introductifs 1 à 3 de Feynman *et al.* [1965], volume III, 1 à 5 de Wichman [1974] ainsi que les chapitres 1 à 3 de Lévy-Leblond et Balibar [1984]. Pour une introduction pédagogique et actualisée à la physique des particules élémentaires, voir Perkins [2000] ; voir aussi l'article grand public Jacob [2002]. On trouvera une étude détaillée du rayonnement du corps noir par exemple dans Diu *et al.* [1990], chapitre 4 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 5. Les expériences d'interférences et de diffraction de neutrons froids ont été réalisées par Zeilinger *et al.* [1988], et les expériences d'interférences avec des atomes froids par Shimizu *et al.* [1992]. Pour la diffraction des neutrons par un cristal, on pourra se reporter à Kittel [1970], chapitre 2. Un livre récent sur l'interférométrie neutronique est celui de Rauch et Werner [2000].

Chapitre 2

Mathématiques de la mécanique quantique I : dimension finie

LE PRINCIPE DE SUPERPOSITION est un principe fondateur de la mécanique quantique, et nous nous sommes appuyés sur ce principe pour rendre compte des interférences. La mécanique quantique est une *théorie linéaire*, et il est naturel que les espaces vectoriels y jouent un rôle fondamental. Nous verrons qu'un état physique est représenté mathématiquement par un vecteur dans un espace dont nous allons préciser les caractéristiques, et qui sera appelé *espace des états*. Un second principe fondateur, également déduit des expériences d'interférences, est l'existence d'amplitudes de probabilité. Ces amplitudes de probabilité seront représentées mathématiquement par des produits scalaires définis sur l'espace des états. En physique des ondes, l'utilisation des nombres complexes est uniquement une commodité, mais en mécanique quantique les amplitudes de probabilité sont fondamentalement des nombres complexes : le produit scalaire sera *a priori* un nombre complexe. Les propriétés physiques : impulsion, position, énergie... seront représentées par des opérateurs agissant dans l'espace des états. Dans ce chapitre, nous introduisons les propriétés essentielles des *espaces de Hilbert*, c'est-à-dire les espaces vectoriels munis d'un produit scalaire défini positif, en nous limitant au cas de la dimension finie. Cette restriction devra être levée ultérieurement, car l'espace des états est en général de dimension infinie. La théorie mathématique des espaces de Hilbert de dimension infinie est beaucoup plus complexe que celle des espaces de dimension finie, et nous renvoyons leur étude au chapitre 7. Le lecteur familier des espaces vectoriels de dimension finie et des opérateurs dans ces espaces peut passer directement au chapitre 3 après un survol des notations.

2.1 Espaces de Hilbert de dimension finie

Soit \mathcal{H} un espace vectoriel de dimension N sur le corps des complexes. Nous noterons $|\varphi\rangle, |\chi\rangle, \dots$ les éléments de \mathcal{H} . Si $\lambda, \mu \dots$ sont des nombres complexes, et si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$, la linéarité implique que $\lambda|\varphi\rangle \equiv |\lambda\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ et que $(|\varphi\rangle + \lambda|\chi\rangle) \in \mathcal{H}$.

L'espace \mathcal{H} est muni d'un produit scalaire défini positif, ce qui en fait un *espace de Hilbert*. Le produit scalaire¹ de deux vecteurs $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sera noté $\langle\chi|\varphi\rangle$; il est linéaire par rapport à $|\varphi\rangle$

$$\langle\chi|(\varphi_1 + \lambda\varphi_2)\rangle = \langle\chi|\varphi_1\rangle + \lambda\langle\chi|\varphi_2\rangle \quad (2.1)$$

et vérifie la propriété de conjugaison complexe

$$\langle\chi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle^* \quad (2.2)$$

ce qui implique que $\langle\varphi|\varphi\rangle$ est un nombre réel. De (2.1) et (2.2) on déduit que le produit scalaire $\langle\chi|\varphi\rangle$ est antilinéaire par rapport à $|\chi\rangle$

$$\langle(\chi_1 + \lambda\chi_2)|\varphi\rangle = \langle\chi_1|\varphi\rangle + \lambda^*\langle\chi_2|\varphi\rangle \quad (2.3)$$

Enfin le produit scalaire est défini positif

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \iff |\varphi\rangle = 0 \quad (2.4)$$

Il sera commode de choisir dans \mathcal{H} une base orthonormée de N vecteurs $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle\}$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (2.5)$$

Tout vecteur $|\varphi\rangle$ peut se décomposer sur cette base avec des coefficients c_n qui sont les composantes de $|\varphi\rangle$ dans cette base

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle \quad (2.6)$$

Prenant le produit scalaire de (2.6) avec le vecteur de base $|m\rangle$, on trouve pour c_m

$$c_m = \langle m|\varphi\rangle \quad (2.7)$$

Si un vecteur $|\chi\rangle$ se décompose sur cette même base suivant $|\chi\rangle = \sum d_n |n\rangle$, alors le produit scalaire $\langle\chi|\varphi\rangle$ s'écrit, en utilisant (2.5)

$$\langle\chi|\varphi\rangle = \sum_{n,m=1}^N d_m^* c_n \langle m|n\rangle = \sum_{n=1}^N d_n^* c_n \quad (2.8)$$

1. Il pourra nous arriver d'utiliser la notation des mathématiciens $(\chi, \varphi) \equiv \langle\chi|\varphi\rangle$ pour le produit scalaire. Toutefois il faut prendre garde que pour les mathématiciens le produit scalaire (χ, φ) est linéaire par rapport à χ !

La *norme* de $|\varphi\rangle$, notée $\|\varphi\|$, est définie à partir du produit scalaire

$$\|\varphi\|^2 = \langle \varphi | \varphi \rangle = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 \geq 0 \quad (2.9)$$

Une propriété importante du produit scalaire est l'inégalité de Schwarz

$$\boxed{|\langle \chi | \varphi \rangle|^2 \leq \langle \chi | \chi \rangle \langle \varphi | \varphi \rangle = \|\chi\|^2 \|\varphi\|^2} \quad (2.10)$$

L'égalité est vraie si et seulement si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont proportionnels : $|\chi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$.

*Démonstration*². Le théorème est vérifié si $\langle \chi | \varphi \rangle = 0$, nous pouvons donc supposer que $\langle \chi | \varphi \rangle \neq 0 \Rightarrow |\varphi\rangle \neq 0$ et $|\chi\rangle \neq 0$. D'après la propriété (2.9) de la norme

$$\langle (\varphi - \lambda\chi) | (\varphi - \lambda\chi) \rangle = \|\varphi\|^2 - \lambda^* \langle \chi | \varphi \rangle - \lambda \langle \varphi | \chi \rangle + |\lambda|^2 \|\chi\|^2 \geq 0$$

Choisissant

$$\lambda = \frac{\|\varphi\|^2}{\langle \varphi | \chi \rangle} \quad \lambda^* = \frac{\|\varphi\|^2}{\langle \chi | \varphi \rangle}$$

on obtient

$$\|\varphi\|^2 - 2\|\varphi\|^2 + \frac{\|\varphi\|^4 \|\chi\|^2}{|\langle \chi | \varphi \rangle|^2} \geq 0$$

d'où (2.10) suit immédiatement. L'égalité ne peut avoir lieu d'après (2.4) que si $|\varphi\rangle = \lambda|\chi\rangle$ et réciproquement.

2.2 Opérateurs linéaires sur \mathcal{H}

2.2.1 Opérateurs linéaires, hermitiens, unitaires

Un opérateur linéaire A fait correspondre au vecteur $|\varphi\rangle$ un vecteur $|A\varphi\rangle$ vérifiant la propriété de linéarité

$$|A(\varphi + \lambda\chi)\rangle = |A\varphi\rangle + \lambda|A\chi\rangle \quad (2.11)$$

Dans une base déterminée, cet opérateur est représenté par une matrice³ d'éléments A_{mn} . En effet grâce à la linéarité et en utilisant la décomposition (2.6)

$$|A\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |An\rangle$$

2. Cette démonstration se transpose immédiatement au cas où l'espace est de dimension infinie.

3. On notera que par abus de langage les physiciens confondent souvent l'opérateur et sa matrice représentative dans une base donnée.

on obtient les composantes d_m de $|A\varphi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$

$$d_m = \langle m|A\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n \langle m|An\rangle = \sum_{n=1}^N A_{mn} c_n \quad (2.12)$$

L'élément de matrice A_{mn} est donc

$$A_{mn} = \langle m|An\rangle \quad (2.13)$$

L'opérateur *conjugué hermitien* (ou adjoint) A^\dagger de A est défini par

$$\langle \chi|A^\dagger\varphi\rangle = \langle A\chi|\varphi\rangle = \langle \varphi|A\chi\rangle^* \quad (2.14)$$

pour tout couple de vecteurs $|\varphi\rangle, |\chi\rangle$. On montre facilement que A^\dagger est bien un opérateur linéaire. Ses éléments de matrice dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle\}$ sont obtenus en prenant pour $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ les vecteurs de base et $(A^\dagger)_{mn}$ vérifie

$$(A^\dagger)_{mn} = A_{nm}^* \quad (2.15)$$

Le conjugué hermitien du produit AB de deux opérateurs est $B^\dagger A^\dagger$; en effet

$$\langle \chi|(AB)^\dagger\varphi\rangle = \langle AB\chi|\varphi\rangle = \langle B\chi|A^\dagger\varphi\rangle = \langle \chi|B^\dagger A^\dagger\varphi\rangle$$

Un opérateur vérifiant $A = A^\dagger$ est appelé *hermitien*, ou *auto-adjoint*. Les deux termes sont équivalents pour les espaces de dimension finie, mais non dans le cas de la dimension infinie.

Un opérateur tel que $UU^\dagger = U^\dagger U = I$, ou de façon équivalente $U^{-1} = U^\dagger$, est appelé opérateur *unitaire*: dans toute la suite du livre, I désignera l'*opérateur identité* de l'espace de Hilbert. Dans un espace de dimension finie, une condition nécessaire et suffisante pour qu'un opérateur U soit unitaire est qu'il conserve la norme

$$\|U\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 \quad \text{ou} \quad \langle U\varphi|U\varphi\rangle = \langle \varphi|\varphi\rangle \quad \forall \varphi \in \mathcal{H} \quad (2.16)$$

Démonstration. Calculons la norme carrée de $|U(\varphi + \lambda\chi)\rangle$, qui par hypothèse est égale à la norme carrée de $|\varphi + \lambda\chi\rangle$

$$\langle \varphi + \lambda\chi|\varphi + \lambda\chi\rangle = \langle \varphi|\varphi\rangle + |\lambda|^2 \langle \chi|\chi\rangle + 2\text{Re}(\lambda \langle \varphi|\chi\rangle)$$

tandis que

$$\langle U(\varphi + \lambda\chi)|U(\varphi + \lambda\chi)\rangle = \langle U\varphi|U\varphi\rangle + |\lambda|^2 \langle U\chi|U\chi\rangle + 2\text{Re}(\lambda \langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

En retranchant la seconde des équations ci-dessus de la première

$$\text{Re}(\lambda \langle \varphi|\chi\rangle) = \text{Re}(\lambda \langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

et en choisissant $\lambda = 1$ puis $\lambda = i$, on déduit

$$\langle U\varphi|U\chi\rangle = \langle \varphi|\chi\rangle \Rightarrow U^\dagger U = I$$

Dans un espace vectoriel de dimension finie, l'existence d'un inverse à gauche entraîne celle d'un inverse à droite, et on a également $UU^\dagger = I$. Un opérateur qui conserve la norme est une *isométrie*. Dans un espace de dimension finie, une isométrie est un opérateur unitaire.

Les opérateurs unitaires effectuent les changements de base orthonormée dans \mathcal{H} . Soit $|n'\rangle = |Un\rangle$, alors

$$\langle m'|n'\rangle = \langle Um|Un\rangle = \langle m|n\rangle = \delta_{mn} = \delta_{m'n'}$$

et l'ensemble des vecteurs $\{|n'\rangle\}$ forme une base orthonormée. Il faut prendre garde au fait que les composantes c_n d'un vecteur se transforment à l'aide de U^\dagger (ou U^{-1})

$$c'_n = \langle n'|\varphi\rangle = \langle Un|\varphi\rangle = \langle n|U^\dagger\varphi\rangle = \sum_{m=1}^N U_{nm}^\dagger c_m \quad (2.17)$$

Notons également la loi de transformation des éléments de matrice

$$A'_{mn} = \langle m'|An'\rangle = \langle Um|AU_n\rangle = \langle m|U^\dagger AU_n\rangle = \sum_{k,l=1}^N U_{mk}^\dagger A_{kl} U_{ln} \quad (2.18)$$

2.2.2 Projecteurs et notation de Dirac

Enfin nous ferons usage intensif des *projecteurs*. Soit \mathcal{H}_1 un sous-espace de \mathcal{H} et \mathcal{H}_2 le sous-espace orthogonal. Tout vecteur $|\varphi\rangle$ se décompose de façon unique en un vecteur $|\varphi_1\rangle$ appartenant à \mathcal{H}_1 et un vecteur $|\varphi_2\rangle$ appartenant à \mathcal{H}_2

$$|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle, \quad |\varphi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, \quad |\varphi_2\rangle \in \mathcal{H}_2, \quad \langle \varphi_1|\varphi_2\rangle = 0$$

On définit le projecteur \mathcal{P}_1 sur \mathcal{H}_1 par son action sur un vecteur arbitraire $|\varphi\rangle$

$$|\mathcal{P}_1\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle \quad (2.19)$$

\mathcal{P}_1 est manifestement un opérateur linéaire, et c'est aussi un opérateur hermitien car si la décomposition de $|\chi\rangle$ en vecteurs appartenant à \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 est $|\chi\rangle = |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \langle \chi|\mathcal{P}_1\varphi\rangle &= \langle \chi|\varphi_1\rangle = \langle \chi_1|\varphi_1\rangle \\ \langle \chi|\mathcal{P}_1^\dagger\varphi\rangle &= \langle \mathcal{P}_1\chi|\varphi\rangle = \langle \chi_1|\varphi\rangle = \langle \chi_1|\varphi_1\rangle \end{aligned}$$

On remarque également que

$$|\mathcal{P}_1^2\varphi\rangle = |\mathcal{P}_1\varphi_1\rangle = |\varphi_1\rangle \Rightarrow \mathcal{P}_1^2 = \mathcal{P}_1$$

Inversement, tout opérateur linéaire qui vérifie $\mathcal{P}_1^\dagger\mathcal{P}_1 = \mathcal{P}_1$ est un projecteur.

Démonstration. On observe d'abord que $\mathcal{P}_1^\dagger = \mathcal{P}_1$, et ensuite que les vecteurs de la forme $|\mathcal{P}_1\varphi\rangle$ forment un sous-espace vectoriel \mathcal{H}_1 de \mathcal{H} . Si l'on écrit

$$|\varphi\rangle = |\mathcal{P}_1\varphi\rangle + (|\varphi\rangle - |\mathcal{P}_1\varphi\rangle) = |\mathcal{P}_1\varphi\rangle + |\varphi_2\rangle$$

alors $|\varphi_2\rangle$ est orthogonal à tout vecteur $|\mathcal{P}_1\chi\rangle$

$$\langle\varphi - \mathcal{P}_1\varphi|\mathcal{P}_1\chi\rangle = \langle\mathcal{P}_1\varphi - \mathcal{P}_1^2\varphi|\chi\rangle = 0$$

On a bien décomposé $|\varphi\rangle$ en $|\mathcal{P}_1\varphi\rangle$ et un vecteur du sous-espace orthogonal à \mathcal{H}_1 .

La propriété $\mathcal{P}_1^2 = \mathcal{P}_1$ montre que les valeurs propres (voir § 2.3.1) d'un projecteur sont 0 ou 1, et $\text{Tr } \mathcal{P}_1$ (voir (2.23)) est égal à la dimension de l'espace de projection, comme on le voit aisément en écrivant \mathcal{P}_1 dans une base où il est diagonal : comme nous le verrons dans la section suivante, une telle base existe toujours car \mathcal{P}_1 est hermitien. De plus on vérifiera dans l'exercice 2.4.6 les propriétés suivantes

- Si \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}'_1 sont des projecteurs sur \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}'_1 respectivement, $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$. $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette alors sur l'intersection $\mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}'_1$.
- $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = 0$. Dans ce cas \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}'_1 sont orthogonaux et $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ projette sur la somme directe $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}'_1$.
- Si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$, alors $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1 - \mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette sur l'union $\mathcal{H}_1 \cup \mathcal{H}'_1$. La seconde propriété est un cas particulier de celle-ci.

Notation de Dirac. Au lieu d'écrire $|A\varphi\rangle$, nous écrirons désormais $A|\varphi\rangle$ suivant une notation introduite par Dirac⁴. Le produit scalaire $\langle\chi|A\varphi\rangle$ s'écrira en notation de Dirac $\langle\chi|A|\varphi\rangle$. Les vecteurs $|\varphi\rangle$ de \mathcal{H} sont appelés « kets », et les vecteurs $\langle\chi|$ de l'espace dual « bras ». Le bra associé au ket $|\lambda\varphi\rangle$ est $\lambda^*\langle\varphi|$; en effet

$$\langle\lambda\varphi|\chi\rangle = \lambda^*\langle\varphi|\chi\rangle$$

Dans $\langle\chi|A|\varphi\rangle$, A agit à droite sur $|\varphi\rangle$: $\langle\chi|A|\varphi\rangle = \langle\chi|(A|\varphi\rangle)$, et non $\langle A\chi|\varphi\rangle$. Comme $(A|\varphi\rangle)^\dagger = \langle\varphi|A^\dagger$, il n'y a pas d'ambiguïté si A est hermitien. La notation de Dirac permet d'écrire très simplement les projecteurs. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur normalisé à l'unité : $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$. La décomposition de $|\chi\rangle$ suivant $|\varphi\rangle$ et un vecteur $|\chi_\perp\rangle$ orthogonal à $|\varphi\rangle$ est

$$|\chi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle + (|\chi\rangle - |\varphi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle) = |\varphi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle + |\chi_\perp\rangle = \mathcal{P}_\varphi|\chi\rangle + |\chi_\perp\rangle$$

On peut donc écrire⁵

$$\boxed{\mathcal{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|} \quad (2.20)$$

4. Cette notation est commode et très largement utilisée, mais elle n'est pas exempte d'ambiguïtés. Elle est par exemple à éviter lorsque l'on traite du renversement du sens du temps, appendice A.

5. Si $\|\varphi\|^2 \neq 1$, alors $P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|/\|\varphi\|^2$.

Si une base orthonormée du sous-espace \mathcal{H}_1 est composée des vecteurs $\{|1\rangle, \dots, |M\rangle\}$, $M \leq N$, alors \mathcal{P}_1 s'écrit

$$\mathcal{P}_1 = \sum_{n=1}^M |n\rangle\langle n| \quad (2.21)$$

Si $M = N$ on obtient la décomposition de l'opérateur identité

$$I = \sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n| \quad (2.22)$$

Cette relation est appelée *relation de fermeture*. Elle est souvent très commode dans les calculs. Par exemple elle redonne simplement la loi de multiplication des matrices

$$(AB)_{nm} = \langle n|AB|m\rangle = \langle n|AIB|m\rangle = \sum_{l=1}^N \langle n|A|l\rangle\langle l|B|m\rangle = \sum_{l=1}^N A_{nl}B_{lm}$$

Donnons enfin une définition importante. La *trace* d'un opérateur est la somme de ses éléments diagonaux

$$\text{Tr } A = \sum_{n=1}^N A_{nn} \quad (2.23)$$

Il est facile de montrer (exercice 2.4.2) que la trace est invariante dans un changement de base et que

$$\text{Tr } AB = \text{Tr } BA \quad (2.24)$$

2.3 Décomposition spectrale des opérateurs hermitiens

2.3.1 Diagonalisation d'un opérateur hermitien

Soit A un opérateur linéaire ; s'il existe un vecteur $|\varphi\rangle$ et un nombre complexe a tels que

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \quad (2.25)$$

alors $|\varphi\rangle$ est appelé *vecteur propre* et a *valeur propre* de A . On obtient les valeurs propres en résolvant l'équation en a

$$\det(A - aI) = 0 \quad (2.26)$$

Les vecteurs propres et valeurs propres des opérateurs hermitiens ont des propriétés remarquables.

Théorème. Les valeurs propres d'un opérateur hermitiens sont réelles et les vecteurs propres correspondant à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux. ■

La démonstration est simple : il suffit de considérer le produit scalaire $\langle \varphi | A | \varphi \rangle$, où $|\varphi\rangle$ vérifie (2.25)

$$\begin{aligned} \langle \varphi | A | \varphi \rangle &= \langle \varphi | a \varphi \rangle = a \|\varphi\|^2 \\ &= \langle A \varphi | \varphi \rangle = \langle a \varphi | \varphi \rangle = a^* \|\varphi\|^2 \end{aligned}$$

ce qui entraîne $a = a^*$; d'autre part si $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ et $A|\chi\rangle = b|\chi\rangle$, alors

$$\langle \chi | A \varphi \rangle = a \langle \chi | \varphi \rangle = \langle A \chi | \varphi \rangle = b \langle \chi | \varphi \rangle$$

d'où $\langle \chi | \varphi \rangle = 0$ si $a \neq b$. Une conséquence immédiate de ce résultat est que les vecteurs propres d'un opérateur hermitien normalisés à l'unité forment une base orthonormée de \mathcal{H} si les valeurs propres sont toutes distinctes, c'est-à-dire si les racines de l'équation (2.26) sont toutes distinctes. Cependant il peut arriver que l'une (ou plusieurs) des racines de (2.26) soit racine multiple. Soit a_n une telle racine : la valeur propre a_n est alors dite *dégénérée*. Même dans ce cas il est possible de former avec les vecteurs propres de A une base orthonormée de \mathcal{H} . En effet on dispose du théorème suivant, que nous énonçons sans démonstration.

Théorème. Si un opérateur A est hermitien, il est toujours possible de trouver une matrice unitaire U (non unique) telle que $U^{-1}AU$ soit une matrice diagonale, dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres qui apparaissent sur la diagonale un nombre de fois égal à leur dégénérescence

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & a_3 & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a_N \end{pmatrix} \quad \blacksquare \quad (2.27)$$

Soit a_n une valeur propre dégénérée, et soit $G(n)$ sa multiplicité dans (2.26) ; on dit aussi que a_n est $G(n)$ fois dégénérée. Il existe alors $G(n)$ vecteurs propres indépendants correspondant à cette valeur propre. Ces $G(n)$ vecteurs propres sous-tendent un sous-espace vectoriel de dimension $G(n)$, appelé *sous-espace de la valeur propre a_n* , où l'on peut trouver une base orthonormée (non unique) $|n, r\rangle$, $r = 1, \dots, G(n)$

$$A|n, r\rangle = a_n|n, r\rangle \quad (2.28)$$

Le projecteur \mathcal{P}_n sur ce sous-espace vectoriel s'écrit d'après (2.21)

$$\mathcal{P}_n = \sum_{r=1}^{G(n)} |n, r\rangle \langle n, r| \quad (2.29)$$

La somme des \mathcal{P}_n donne l'opérateur identité, puisque l'ensemble des vecteurs $|n, r\rangle$ forme une base de \mathcal{H} , et on obtient la relation de fermeture (2.22)

$$\boxed{\sum_n \mathcal{P}_n = \sum_n \sum_{r=1}^{G(n)} |n, r\rangle \langle n, r| = I} \quad (2.30)$$

Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur quelconque de \mathcal{H}

$$A|\varphi\rangle = \sum_n A\mathcal{P}_n|\varphi\rangle = \sum_n a_n \mathcal{P}_n|\varphi\rangle$$

puisque $\mathcal{P}_n|\varphi\rangle$ appartient au sous-espace de la valeur propre a_n ; on peut donc faire l'identification suivante pour A

$$\boxed{A = \sum_n a_n \mathcal{P}_n = \sum_n \sum_{r=1}^{G(n)} |n, r\rangle a_n \langle n, r|} \quad (2.31)$$

Cette relation fondamentale est appelée *décomposition spectrale* de A . Réciproquement un opérateur de la forme $\sum_n a_n \mathcal{P}_n$ est hermitien si $a_n = a_n^*$ et de valeurs propres a_n si $\mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = \delta_{nm} \mathcal{P}_n$.

2.3.2 Diagonalisation d'une matrice 2×2 hermitienne

Nous aurons souvent l'occasion de diagonaliser des matrices 2×2 hermitiennes. La forme la plus générale d'une telle matrice dans une base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

est

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a' \end{pmatrix}$$

où a et a' sont des nombres réels, b étant *a priori* complexe. Cependant nous verrons qu'en mécanique quantique il est toujours possible de redéfinir la phase des vecteurs de base

$$|1\rangle \rightarrow |1'\rangle = e^{i\alpha}|1\rangle \quad |2\rangle \rightarrow |2'\rangle = e^{i\beta}|2\rangle$$

Dans cette nouvelle base, l'élément de matrice A'_{12} de l'opérateur A est

$$A'_{12} = \langle 1'|A|2'\rangle = e^{i(\beta-\alpha)} \langle 1|A|2\rangle = e^{i(\beta-\alpha)} A_{12} = e^{i(\beta-\alpha)} b$$

Si $b = |b| \exp(i\delta)$, il suffit de prendre $(\alpha - \beta) = \delta$ pour éliminer la phase de b , qui peut donc être choisi réel. Le cas le plus simple est celui où $a = a'$

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Dans ce cas, on vérifie immédiatement que les deux vecteurs $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

sont vecteurs propres de A avec les valeurs propres $(a+b)$ et $(a-b)$ respectivement. Ce résultat très simple a une origine intéressante : soit U_P l'opérateur unitaire qui effectue une permutation des vecteurs de base $|1\rangle$ et $|2\rangle$

$$U_P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

L'opérateur U_P est de carré unité : $U_P^2 = I$, et ses valeurs propres sont donc ± 1 . Les vecteurs propres correspondants sont $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$. Mais on peut écrire A sous la forme

$$A = aI + bU_P$$

ce qui montre que A et U_P commutent : $AU_P = U_PA$ et, comme on le verra à la sous-section suivante, on peut alors trouver une base formée de vecteurs propres communs à A et U_P . La diagonalisation de A est simple parce que A commute avec une opération de symétrie, propriété que nous utiliserons souvent par la suite.

Dans le cas général $a \neq a'$, la propriété de symétrie n'est plus valable et la diagonalisation n'est pas aussi simple. Il est commode d'écrire A sous la forme

$$A = \begin{pmatrix} a+c & b \\ b & a-c \end{pmatrix} = aI + \sqrt{b^2 + c^2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

où l'angle θ est défini par

$$\begin{aligned} c &= \sqrt{b^2 + c^2} \cos \theta \\ b &= \sqrt{b^2 + c^2} \sin \theta \end{aligned}$$

On notera que $\tan \theta = b/c$, et qu'il faut prendre garde à choisir la bonne détermination de θ . On vérifie alors que les vecteurs propres sont

$$|\chi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad |\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta/2 \\ \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

correspondant aux valeurs propres $a + \sqrt{b^2 + c^2}$ et $a - \sqrt{b^2 + c^2}$ respectivement. On retrouve le cas précédent si $c = 0$, ce qui correspond à $\theta = \pm\pi/2$.

2.3.3 Ensemble complet d'opérateurs compatibles

Par définition, deux opérateurs A et B commutent si $AB = BA$, et dans ce cas leur *commutateur* $[A, B]$ défini par

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.36)$$

est nul. Soit deux opérateurs hermitiens A et B qui commutent. On montre alors le théorème suivant.

Théorème. Soit A et B deux opérateurs hermitiens tels que $[A, B] = 0$. On peut alors trouver une base de \mathcal{H} formée de vecteurs propres communs à A et B . ■

Démonstration. Soit a_n les valeurs propres de A et $|n, r\rangle$ une base de \mathcal{H} formée avec les vecteurs propres correspondants. Multiplions les deux membres de (2.28) par B et exploitons la commutation

$$BA|n, r\rangle = A(B|n, r\rangle) = a_n(B|n, r\rangle)$$

ce qui implique que le vecteur $B|n, r\rangle$ appartient au sous-espace de la valeur propre a_n . Si a_n est non dégénérée, ce sous-espace est de dimension un, $B|n, r\rangle$ est nécessairement proportionnel à $|n, r\rangle$ qui est donc également vecteur propre de B . Si a_n est dégénérée, nous pouvons seulement déduire que $B|n, r\rangle$ est nécessairement orthogonal à tout vecteur propre $|m, s\rangle$ de A , avec $m \neq n$

$$\langle m, s|B|n, r\rangle = \delta_{nm}B_{sr}^{(n)}$$

ce qui veut dire que dans la base $|n, r\rangle$ la matrice représentative de B est diagonale par blocs

$$B = \begin{pmatrix} B^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & B^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & B^{(3)} \end{pmatrix}$$

Chaque bloc $B^{(k)}$ peut être diagonalisé séparément par un changement de base affectant seulement chacun des sous-espaces, sans toucher à la diagonalisation de A puisqu'à l'intérieur de chaque sous-espace A est représenté par une matrice diagonale.

Réciproquement, supposons que l'on ait trouvé une base $|(n, p)r\rangle$ de \mathcal{H} formée de vecteurs propres communs à A et B

$$A|(n, p)r\rangle = a_n|(n, p)r\rangle \quad B|(n, p)r\rangle = b_p|(n, p)r\rangle$$

Il est alors évident que

$$[A, B]|(n, p)r\rangle = 0$$

et comme les vecteurs $|(n, p)r\rangle$ forment une base, $[A, B] = 0$. Si $[A, B] = 0$, il est possible que la donnée des valeurs propres a_n et b_p suffise à spécifier les vecteurs de base de façon unique, à une constante multiplicative de module un près ; il existe un vecteur $|(n, p)\rangle$ et un seul tel que

$$A|(n, p)\rangle = a_n|(n, p)\rangle \quad B|(n, p)\rangle = b_p|(n, p)\rangle \quad (2.37)$$

On dira alors que A et B forment *un ensemble complet d'opérateurs compatibles*. S'il y a encore indétermination, c'est-à-dire s'il existe plusieurs vecteurs linéairement indépendants satisfaisant (2.37), il pourra arriver que la donnée

des valeurs propres d'un troisième opérateur C commutant avec A et B lève l'indétermination. Un ensemble d'opérateurs hermitiens A_1, \dots, A_M commutant deux à deux et dont les valeurs propres définissent sans ambiguïté les vecteurs d'une base de \mathcal{H} est appelé ensemble complet d'opérateurs compatibles (ou ensemble complet d'opérateurs qui commutent).

2.3.4 Opérateurs unitaires et opérateurs hermitiens

Les propriétés des opérateurs unitaires $U^\dagger = U^{-1}$ sont intimement liées à celles des opérateurs hermitiens, et en particulier ils peuvent toujours être diagonalisés. Le théorème de base pour les opérateurs unitaires s'énonce comme suit.

Théorème. (a) Les valeurs propres a_n d'un opérateur unitaire sont de module unité : $a_n = \exp(i\alpha_n)$, α_n réel. (b) Les vecteurs propres correspondant à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux. (c) La décomposition spectrale d'un opérateur unitaire s'écrit en fonction de projecteurs \mathcal{P}_n sous la forme

$$U = \sum_n a_n \mathcal{P}_n = \sum_n e^{i\alpha_n} \mathcal{P}_n \quad \text{avec} \quad \sum_n \mathcal{P}_n = I \quad \blacksquare \quad (2.38)$$

La démonstration de (a) et (b) est triviale. Pour obtenir (c) on écrit

$$U = \frac{1}{2}(U + U^\dagger) + i \frac{1}{2i}(U - U^\dagger) = A + iB \quad (2.39)$$

Les opérateurs A et B sont hermitiens et $[A, B] = 0$; (2.39) généralise aux opérateurs unitaires la décomposition en partie réelle et partie imaginaire d'un nombre complexe, les opérateurs hermitiens jouant le rôle des nombres réels. On peut diagonaliser simultanément A et B , et les vecteurs propres communs à A et B sont aussi vecteurs propres de U ; les valeurs propres de A et B sont cos α_n et sin α_n respectivement. L'opérateur C

$$C = \sum_n \alpha_n \mathcal{P}_n$$

est un opérateur hermitien et $U = \exp(iC)$. Inversement soit $A = \sum_n a_n \mathcal{P}_n$ un opérateur hermitien. L'opérateur

$$U = \sum_n e^{ia_n} \mathcal{P}_n = e^{iA} \quad (2.40)$$

est manifestement un opérateur unitaire. Cette écriture généralise aux opérateurs unitaires la représentation $\exp(i\alpha)$ d'un nombre complexe de module un.

2.3.5 Fonctions d'un opérateur

En écrivant (2.40), nous avons introduit l'exponentielle d'un opérateur. Plus généralement il est utile de savoir construire une fonction $f(A)$ d'un

opérateur. Cette construction est immédiate si l'opérateur A peut être diagonalisé : $A = XDX^{-1}$, où D est une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont d_n . Supposons la fonction f définie par un développement de Taylor convergent dans un certain domaine du plan complexe $|z| < R$

$$f(z) = \sum_{p=0}^{\infty} c_p z^p$$

L'opérateur $f(A)$ sera donné par

$$f(A) = \sum_{p=0}^{\infty} c_p A^p = \sum_{p=0}^{\infty} c_p X D^p X^{-1} = X \left[\sum_{p=0}^{\infty} c_p D^p \right] X^{-1} \quad (2.41)$$

L'expression entre crochets n'est autre qu'une matrice diagonale d'éléments $f(d_n)$ bien définie si $|d_n| < R$ quel que soit n . En général on pourra trouver un prolongement analytique pour $f(A)$ même si certaines valeurs propres d_n sont en dehors du rayon de convergence du développement de Taylor, de même que l'on prolonge analytiquement

$$\sum_{p=0}^{\infty} z^p = \frac{1}{1-z}$$

en dehors du rayon de convergence $|z| < 1$ pour toute valeur de z différente de un. Un cas particulièrement important est celui de l'exponentielle d'un opérateur

$$\exp A = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{A^p}{p!} \quad (2.42)$$

Le rayon de convergence de ce développement étant infini, l'argument ci-dessus implique que $\exp A$ est bien défini par le développement (2.42) si A est diagonalisable (en fait il n'est pas difficile de montrer que le développement est convergent dans tous les cas). Il faut prendre garde au fait qu'en général

$$\exp A \exp B \neq \exp B \exp A$$

une condition suffisante (mais non nécessaire !) pour l'égalité étant que A et B commutent (exercice 3.3.6).

En résumé, étant donné un opérateur hermitien A dont la décomposition spectrale est donnée par (2.31), il est immédiat de définir toute fonction de A par

$$f(A) = \sum_n f(a_n) P_n \quad (2.43)$$

par exemple son exponentielle $\exp A$, son logarithme $\ln A$ ou sa *résolvante* $R(z, A)$

$$e^{i\alpha A} = \sum_n e^{i\alpha a_n} \mathcal{P}_n \quad (2.44)$$

$$\ln A = \sum_n (\ln a_n) \mathcal{P}_n \quad (2.45)$$

$$R(z, A) = (zI - A)^{-1} = \sum_n \frac{1}{z - a_n} \mathcal{P}_n \quad (2.46)$$

La résolvante $R(z, A)$ n'est bien sûr définie que si $z \neq a_n$ quel que soit n , et le logarithme si aucune des valeurs propres a_n n'est nulle.

2.4 Exercices

2.4.1 Produit scalaire et norme

1. Soit une norme $\|\varphi\|$ dérivant d'un produit scalaire : $\|\varphi\|^2 = (\varphi, \varphi)$. Montrer que cette norme vérifie l'inégalité triangulaire

$$\|\chi + \varphi\| \leq \|\chi\| + \|\varphi\|$$

ainsi que

$$\left| \|\chi\| - \|\varphi\| \right| \leq \|\chi + \varphi\|$$

2. Vérifier également

$$\|\chi + \varphi\|^2 + \|\chi - \varphi\|^2 = 2(\|\chi\|^2 + \|\varphi\|^2)$$

Quelle est l'interprétation de cette égalité dans le plan réel \mathbb{R}^2 ? Inversement si une norme vérifie cette propriété dans un espace vectoriel réel, montrer que

$$(\varphi, \chi) = (\chi, \varphi) = \frac{1}{4} (\|\chi + \varphi\|^2 - \|\chi - \varphi\|^2)$$

définit un produit scalaire. Ce produit scalaire doit vérifier

$$(\chi, \varphi_1 + \varphi_2) = (\chi, \varphi_1) + (\chi, \varphi_2) \quad (\chi, \lambda\varphi) = \lambda(\chi, \varphi)$$

Dans le cas d'un espace vectoriel complexe, montrer que

$$(\chi, \varphi) = \frac{1}{4} [(\|\chi + \varphi\|^2 - \|\chi - \varphi\|^2) - i(\|\chi + i\varphi\|^2 - \|\chi - i\varphi\|^2)]$$

2.4.2 Commutateurs et traces

1. Montrer que

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad (2.47)$$

2. La trace (2.23) d'un opérateur est la somme des éléments diagonaux de sa matrice représentative dans une base donnée. Montrer que

$$\text{Tr } AB = \text{Tr } BA \quad (2.48)$$

et en déduire que la trace est invariante dans un changement de base $A \rightarrow A' = SAS^{-1}$. La trace d'un opérateur est (heureusement !) indépendante de la base.

3. Montrer que la trace est invariante par permutation circulaire

$$\text{Tr } ABC = \text{Tr } BCA = \text{Tr } CAB \quad (2.49)$$

2.4.3 Déterminant et trace

1. Soit une matrice $A(t)$ dépendant d'un paramètre t vérifiant

$$\frac{dA(t)}{dt} = A(t)B$$

Montrer que $A(t) = A(0)\exp(Bt)$. Quelle est la solution de

$$\frac{dA(t)}{dt} = BA(t) ?$$

2. Montrer que

$$\det e^{At_1} \times \det e^{At_2} = \det e^{A(t_1+t_2)}$$

En déduire

$$\det e^A = e^{\text{Tr } A}$$

ou de façon équivalente

$$\det B = e^{\text{Tr } \ln B} \quad (2.50)$$

Suggestion : obtenir une équation différentielle pour la fonction $g(t) = \det[\exp(At)]$. Les résultats sont évidents si A est diagonalisable.

2.4.4 Projecteur dans \mathbb{R}^3

Soit dans l'espace réel à trois dimensions \mathbb{R}^3 deux vecteurs \vec{u}_1 et \vec{u}_2 linéairement indépendants, mais non nécessairement orthogonaux et de norme quelconque, et \mathcal{P} le projecteur sur le plan défini par ces deux vecteurs. Montrer que l'action de \mathcal{P} sur un vecteur \vec{V} s'écrit

$$\mathcal{P}\vec{V} = \sum_{i,j=1}^2 C_{ij}^{-1} (\vec{V} \cdot \vec{u}_i) \vec{u}_j \quad (2.51)$$

où la matrice 2×2 $C_{ij} = \vec{u}_i \cdot \vec{u}_j$.

2. Généralisation : soit p vecteurs linéairement indépendants $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_p$ dans \mathbb{R}^N , $p < N$. Écrire le projecteur sur l'espace vectoriel engendré par ces p vecteurs.

2.4.5 Théorème de la projection

Soit \mathcal{H}_1 un sous-espace vectoriel de \mathcal{H} et $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$. Montrer qu'il existe alors un élément unique $|\varphi_1\rangle$ de \mathcal{H}_1 tel que la norme $\|\varphi_1 - \varphi\|$ soit minimale : $\|\varphi_1 - \varphi\|$ est la distance de $|\varphi\rangle$ à \mathcal{H}_1 . Déterminer $|\varphi_1\rangle$.

2.4.6 Propriétés des projecteurs

1. Si \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}'_1 sont des projecteurs sur \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}'_1 respectivement, $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$. $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette alors sur l'intersection $\mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}'_1$.
2. $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = 0$. Dans ce cas \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}'_1 sont orthogonaux et $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ projette sur la somme directe $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}'_1$.
3. Si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$, alors $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1 - \mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette sur l'union $\mathcal{H}_1 \cup \mathcal{H}'_1$. La propriété 2. est un cas particulier de ce résultat.
4. Soit un opérateur Ω tel que $\Omega^\dagger\Omega$ soit un projecteur

$$\Omega^\dagger\Omega = \mathcal{P}$$

Montrer que $\Omega\Omega^\dagger$ est aussi un projecteur. Suggestion : montrer que

$$\Omega|\varphi\rangle = 0 \iff \mathcal{P}|\varphi\rangle = 0$$

2.4.7 Intégrale gaussienne

Soit A une matrice réelle $N \times N$ symétrique et strictement positive (cf. exercice 2.4.10). Montrer que l'intégrale multiple

$$I(b) = \int \prod_{i=1}^N dx_i \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{jk} x_j A_{jk} x_k + b_j x_j\right)$$

vaut

$$I(b) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{jk} b_j A_{jk}^{-1} b_k\right) \quad (2.52)$$

Suggestion : écrire

$$\sum_{jk} x_j A_{jk} x_k = x^T A x = \langle x | A | x \rangle$$

où x est un vecteur colonne et x^T un vecteur ligne et effectuer le changement de variables

$$x' = x - A^{-1}b$$

Ces intégrales gaussiennes sont fondamentales en théorie des probabilités et interviennent dans nombre de problèmes de physique.

2.4.8 Commutateurs et valeur propre dégénérée

Soit trois matrices $N \times N$ A , B et C qui vérifient

$$[A, B] = 0 \quad [A, C] = 0 \quad [B, C] \neq 0$$

Montrer qu'au moins une valeur propre de A est dégénérée.

2.4.9 Matrices normales

Une matrice C est dite *normale* si elle commute avec la matrice conjuguée hermitienne

$$C^\dagger C = C C^\dagger$$

En écrivant

$$C = \frac{1}{2}(C + C^\dagger) + i \frac{1}{2i}(C - C^\dagger) = A + iB$$

montrer que C est diagonalisable.

2.4.10 Matrices positives

Une *matrice* A est dite *positive* si quel que soit le vecteur $|\varphi\rangle \neq 0$ la valeur moyenne est réelle et positive : $\langle \varphi|A|\varphi\rangle \geq 0$. Elle est dite *strictement positive* si $\langle \varphi|A|\varphi\rangle > 0$.

1. Montrer que toute matrice positive est hermitienne et qu'une condition nécessaire et suffisante pour qu'une matrice soit positive est que ses valeurs propres soient toutes ≥ 0 .

2. Montrer que dans un espace de Hilbert réel, où une matrice hermitienne est symétrique ($A = A^T$), une matrice positive n'est pas en général symétrique.

2.4.11 Identités opératorielles

1. Soit l'opérateur $f(t)$ fonction du paramètre t

$$f(t) = e^{tA} B e^{-tA}$$

où les opérateurs A et B sont représentés par des matrices $N \times N$. Montrer que

$$\frac{df}{dt} = [A, f(t)] \quad \frac{d^2f}{dt^2} = [A, [A, f(t)]] \quad \text{etc.}$$

En déduire

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + \frac{t}{1!} [A, B] + \frac{t^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (2.53)$$

2. On suppose que A et B commutent tous deux avec leur commutateur $[A, B]$. Écrire une équation différentielle pour l'opérateur

$$g(t) = e^{At} e^{Bt}$$

et en déduire

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]} \quad (2.54)$$

Attention! Cette identité n'est pas généralement valable. Elle n'est garantie que si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. Montrer également avec les mêmes hypothèses

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (2.55)$$

2.5 Bibliographie

Les résultats sur les espaces vectoriels de dimension finie et les opérateurs se trouvent dans tout cours d'algèbre linéaire niveau première année de licence. Comme complément, on pourra consulter Isham [1995], chapitres 2 et 3 ou Nielsen et Chuang [2000], chapitre 2, où l'on trouvera une démonstration élégante du théorème de décomposition spectrale d'un opérateur hermitien.

Chapitre 3

Polarisation : photon et spin $1/2$

DANS CE CHAPITRE, nous allons mettre progressivement en place les concepts de base de la mécanique quantique à l'aide de deux exemples simples, en utilisant une approche heuristique, plus inductive que déductive. Nous partirons d'un phénomène familier, celui de la polarisation de la lumière, qui nous permettra d'introduire le formalisme mathématique nécessaire. Nous montrerons que la description de la polarisation conduit naturellement à faire appel à un espace vectoriel complexe à deux dimensions, et nous établirons la correspondance entre un état de polarisation et un vecteur de cet espace, appelé espace des états de polarisation. Nous passerons ensuite à la description quantique de la polarisation d'un photon et nous illustrerons la construction des amplitudes de probabilité comme produits scalaires dans cet espace. Le second exemple sera celui du spin $1/2$, où l'espace des états est également de dimension deux. Nous construirons les états de spin $1/2$ les plus généraux en utilisant l'invariance par rotation. Enfin nous introduirons la dynamique, qui nous permettra de suivre l'évolution du vecteur d'état au cours du temps.

Alors que l'analogie avec la polarisation de la lumière nous servira de guide pour construire la théorie quantique de la polarisation d'un photon, nous ne disposerons pas d'une telle analogie classique pour construire celle du spin $1/2$. Dans ce dernier cas, la construction de la théorie quantique sera faite *sans référence à une théorie classique*, à partir d'une hypothèse sur la dimension de l'espace des états et en nous appuyant sur des principes de symétrie.

3.1 Polarisation de la lumière et polarisation d'un photon

3.1.1 Polarisation d'une onde électromagnétique

La polarisation de la lumière – ou plus généralement d'une onde électromagnétique – est un phénomène bien connu lié au caractère vectoriel du

champ électromagnétique. Considérons une onde lumineuse plane monochromatique de fréquence ω se propageant dans le sens des z positifs. Le champ électrique $\vec{E}(t)$ en un point donné est un vecteur orthogonal à la direction de propagation. Il est donc situé dans le plan xOy et a pour composantes $\{E_x(t), E_y(t), E_z(t) = 0\}$ (figure 3.1). Le cas le plus général est celui d'une polarisation elliptique, où le champ électrique est de la forme

$$\vec{E}(t) = \begin{cases} E_x(t) = E_{0x} \cos(\omega t - \delta_x) \\ E_y(t) = E_{0y} \cos(\omega t - \delta_y) \end{cases} \quad (3.1)$$

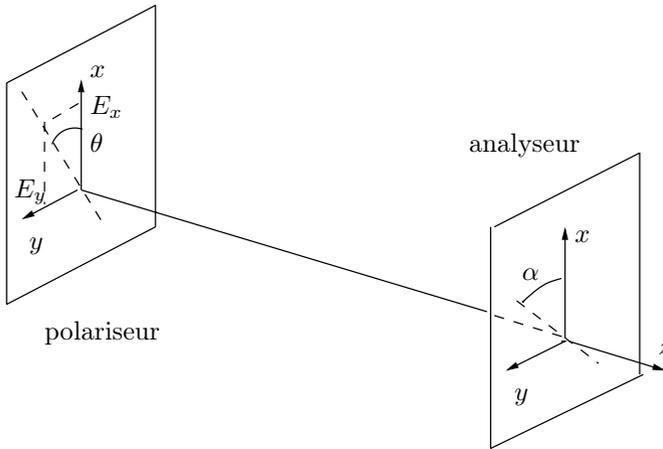


FIG. 3.1 – Ensemble polariseur-analyseur.

Nous n'avons pas explicité la dépendance en z car nous nous plaçons dans un plan $z = \text{cste}$. Par un changement d'origine des temps, il est toujours possible de choisir $\delta_x = 0$, $\delta_y = \delta$. L'intensité \mathcal{I} de l'onde lumineuse est proportionnelle au carré du champ électrique

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_x + \mathcal{I}_y = k(E_{0x}^2 + E_{0y}^2) = kE_0^2 \quad (3.2)$$

où k est une constante de proportionnalité qu'il ne sera pas indispensable de préciser. Lorsque $\delta = 0$ ou π , la polarisation est *linéaire* : si l'on pose $E_{0x} = E_0 \cos \theta$, $E_{0y} = E_0 \sin \theta$, l'équation (3.1) pour $\delta_x = \delta_y = 0$ montre que le champ électrique vibre dans une direction \hat{n}_θ du plan xOy faisant un angle θ avec l'axe Ox . Une telle onde lumineuse s'obtient à l'aide d'un *polariseur* linéaire dont l'axe est parallèle à \hat{n}_θ .

Lorsque nous nous intéressons uniquement à la polarisation de cette onde lumineuse, les paramètres pertinents sont les rapports $E_{0x}/E_0 = \cos \theta$ et $E_{0y}/E_0 = \sin \theta$, où l'on peut choisir θ dans l'intervalle $[0, \pi]$; E_0 est un simple facteur de proportionnalité qui ne joue aucun rôle dans la description de la polarisation. Nous pouvons faire correspondre aux ondes polarisées linéairement

suivant Ox et Oy des vecteurs unitaires orthogonaux $|x\rangle$ et $|y\rangle$ du plan xOy formant une base orthonormée de ce plan. À l'état de polarisation *linéaire* le plus général suivant \hat{n}_θ correspondra le vecteur $|\theta\rangle$ du plan xOy

$$|\theta\rangle = \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle \quad (3.3)$$

également de norme unité

$$\langle\theta|\theta\rangle = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$$

La raison fondamentale qui conduit à utiliser un espace vectoriel pour décrire la polarisation est le *principe de superposition* : on peut décomposer un état de polarisation en deux (ou plusieurs) autres états, ou au contraire additionner vectoriellement deux états de polarisation. Pour illustrer la décomposition, faisons passer l'onde polarisée suivant \hat{n}_θ à travers un second polariseur, appelé *analyseur*, orienté suivant la direction \hat{n}_α du plan xOy faisant un angle α avec Ox (figure 3.1). Seule sera transmise la composante du champ électrique suivant \hat{n}_α , sa projection sur \hat{n}_α : l'amplitude du champ électrique sera multipliée par un facteur $\cos(\theta - \alpha)$ et l'intensité lumineuse à la sortie de l'analyseur sera réduite par un facteur $\cos^2(\theta - \alpha)$. Nous noterons $\bar{a}(\theta \rightarrow \alpha)$ le facteur de projection, que nous appellerons *amplitude de la polarisation \hat{n}_θ suivant \hat{n}_α* , et nous remarquerons que cette amplitude n'est autre que le produit scalaire des vecteurs $|\theta\rangle$ et $|\alpha\rangle$

$$\bar{a}(\theta \rightarrow \alpha) = \langle\alpha|\theta\rangle = \cos(\theta - \alpha) = \hat{n}_\alpha \cdot \hat{n}_\theta \quad (3.4)$$

L'intensité à la sortie de l'analyseur est donnée par la loi de Malus

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_0 |\bar{a}(\theta \rightarrow \alpha)|^2 = \mathcal{I}_0 |\langle\alpha|\theta\rangle|^2 = \mathcal{I}_0 \cos^2(\theta - \alpha) \quad (3.5)$$

si \mathcal{I}_0 est l'intensité à la sortie du polariseur. Une autre illustration de la décomposition est fournie par le dispositif de la figure 3.2 : à l'aide d'une lame biréfringente uniaxe perpendiculaire à la direction de propagation et dont l'axe optique se trouve dans le plan xOz , on décompose le faisceau lumineux en une onde polarisée suivant Ox et une onde polarisée suivant Oy . L'onde polarisée suivant Ox se propage dans une direction qui est celle du rayon extraordinaire, dévié à l'entrée et à la sortie de la lame, et celle polarisée suivant Oy suit le rayon ordinaire qui se propage en ligne droite.

L'addition de deux états de polarisation est illustrée sur le dispositif de la figure 3.3 : les deux faisceaux sont recombinaés par une seconde lame biréfringente symétrique de la première par rapport à un plan vertical avant de passer dans l'analyseur¹. Afin de simplifier le raisonnement, nous négligeons

1. Cette recombinaison des amplitudes est possible parce que les deux faisceaux étant issus de la même source sont cohérents. Il serait bien sûr impossible d'additionner les amplitudes de deux faisceaux polarisés issus de sources différentes : le problème est identique à celui des interférences.

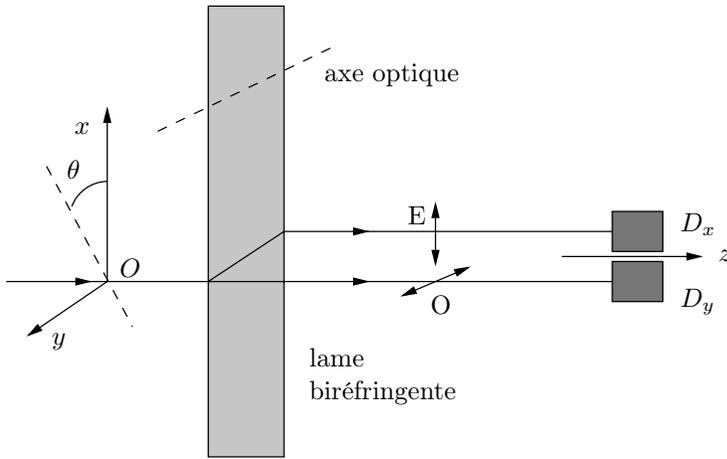


FIG. 3.2 – Décomposition de la polarisation par une lame biréfringente. Le rayon ordinaire O est polarisé horizontalement, le rayon extraordinaire E est polarisé verticalement.

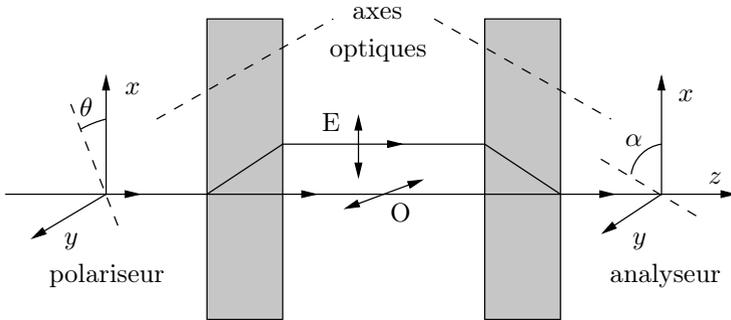


FIG. 3.3 – Décomposition et recombinaison de polarisations à l'aide de lames biréfringentes.

la différence de phase induite par la différence entre les indices ordinaire et extraordinaire dans les lames biréfringentes. Dans ces conditions, l'onde lumineuse à la sortie de la seconde lame biréfringente est polarisée suivant \hat{n}_θ : la recombinaison des deux faisceaux x et y donne la lumière initiale, polarisée suivant la direction \hat{n}_θ , et l'intensité à la sortie de l'analyseur est réduite comme précédemment par le facteur $\cos^2(\theta - \alpha)$.

Si nous nous limitons à des états de polarisation linéaire, nous pouvons décrire tout état de polarisation comme un vecteur unitaire réel du plan xOy , dont une base orthonormée possible est formée des vecteurs $|x\rangle$ et $|y\rangle$. Mais si nous voulons décrire une polarisation quelconque, nous devons introduire un

espace complexe à deux dimensions \mathcal{H} . Cet espace sera l'espace vectoriel des états de polarisation. Revenons donc au cas général (3.1) en introduisant une notation complexe $\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y)$ pour les amplitudes ondulatoires

$$\mathcal{E}_x = E_{0x} e^{i\delta_x} \quad \mathcal{E}_y = E_{0y} e^{i\delta_y} \quad (3.6)$$

ce qui permet d'écrire (3.1) sous la forme

$$\begin{aligned} E_x(t) &= E_{0x} \cos(\omega t - \delta_x) = \operatorname{Re} (E_{0x} e^{i\delta_x} e^{-i\omega t}) = \operatorname{Re} (\mathcal{E}_x e^{-i\omega t}) \\ E_y(t) &= E_{0y} \cos(\omega t - \delta_y) = \operatorname{Re} (E_{0y} e^{i\delta_y} e^{-i\omega t}) = \operatorname{Re} (\mathcal{E}_y e^{-i\omega t}) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Nous avons déjà remarqué qu'en raison de l'arbitraire sur l'origine des temps, seule la phase *relative* $\delta = (\delta_y - \delta_x)$ est physiquement pertinente et on peut multiplier simultanément \mathcal{E}_x et \mathcal{E}_y par un facteur de phase commun $\exp(i\beta)$ sans conséquence physique. Il est toujours possible de choisir par exemple $\delta_x = 0$. L'intensité lumineuse est donnée par (3.2)

$$\mathcal{I} = k(|\mathcal{E}_x|^2 + |\mathcal{E}_y|^2) = k|\vec{\mathcal{E}}|^2 = kE_0^2 \quad (3.8)$$

Un cas particulier important de (3.7) est celui de la *polarisation circulaire*, où $E_{0x} = E_{0y} = E_0/\sqrt{2}$ et $\delta_y = \pm\pi/2$, lorsque l'on a choisi par convention $\delta_x = 0$. Si $\delta_y = +\pi/2$, l'extrémité du champ électrique décrit un cercle dans le plan xOy parcouru dans le sens trigonométrique. En effet $E_x(t)$ et $E_y(t)$ sont donnés par

$$\begin{aligned} E_x(t) &= \operatorname{Re} \left(\frac{E_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} \right) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \cos \omega t \\ E_y(t) &= \operatorname{Re} \left(\frac{E_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} e^{i\pi/2} \right) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \cos(\omega t - \pi/2) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \sin \omega t \end{aligned} \quad (3.9)$$

Un observateur sur lequel arrive le rayon lumineux voit l'extrémité du vecteur champ électrique décrire dans le plan xOy un cercle de rayon $E_0/\sqrt{2}$ parcouru dans le sens trigonométrique : la polarisation correspondante est appelée *polarisation circulaire droite*². Lorsque $\delta_y = -\pi/2$, on obtient une *polarisation circulaire gauche* : le cercle est parcouru dans le sens inverse du sens trigonométrique

$$\begin{aligned} E_x(t) &= \operatorname{Re} \left(\frac{E_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} \right) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \cos \omega t \\ E_y(t) &= \operatorname{Re} \left(\frac{E_0}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} e^{-i\pi/2} \right) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \cos(\omega t + \pi/2) = -\frac{E_0}{\sqrt{2}} \sin \omega t \end{aligned} \quad (3.10)$$

2. Voir la figure 10.8. Notre définition des polarisations circulaires droite et gauche est celle adoptée en physique des particules élémentaires. Avec cette définition, la polarisation circulaire droite (gauche) correspond à une hélicité positive (négative), c'est-à-dire à une projection $+\hbar$ ($-\hbar$) du spin du photon sur sa direction de propagation. Cependant cette définition n'est pas universelle : les opticiens utilisent souvent la définition opposée, mais comme le remarque un opticien (E. Hecht [1987], chapitre 8) à propos de leur choix : « This choice of terminology is admittedly a bit awkward. Yet its use in optics is fairly common, even though it is completely antithetic to the more reasonable convention adopted in elementary particle physics. »

Ces états de polarisation circulaire droite et gauche sont obtenus expérimentalement en partant d'une polarisation linéaire à 45° par rapport aux axes et en déphasant de $\pm\pi/2$ le champ suivant Ox ou Oy par une lame quart d'onde.

En notation complexe, les champs \mathcal{E}_x et \mathcal{E}_y s'écrivent

$$\mathcal{E}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \quad \mathcal{E}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 e^{\pm i\pi/2} = \frac{\pm i}{\sqrt{2}} E_0$$

où le signe (+) correspond à la polarisation circulaire droite et le signe (−) à la polarisation circulaire gauche. Le facteur de proportionnalité E_0 commun à \mathcal{E}_x et \mathcal{E}_y définit l'intensité de l'onde lumineuse et ne joue aucun rôle dans la description de la polarisation, qui est caractérisée par les vecteurs unitaires

$$\boxed{|D\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle) \quad |G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle)} \quad (3.11)$$

Le signe (−) global dans la définition de $|D\rangle$ a été introduit par souci de cohérence avec les conventions du chapitre 10. L'équation (3.11) montre que la description mathématique de la polarisation nous amène naturellement à utiliser les vecteurs unitaires d'un espace vectoriel complexe bidimensionnel \mathcal{H} dont les vecteurs $|x\rangle$ et $|y\rangle$ forment une base orthonormée possible.

Nous avons établi précédemment une correspondance entre une polarisation linéaire orientée suivant \hat{n}_θ et un vecteur unitaire $|\theta\rangle$ de \mathcal{H} , ainsi qu'une correspondance entre les deux polarisations circulaires et les deux vecteurs (3.11) de \mathcal{H} . Nous allons généraliser cette correspondance en construisant la polarisation correspondant au vecteur unitaire $|\Phi\rangle$ de \mathcal{H} le plus général³

$$|\Phi\rangle = \lambda|x\rangle + \mu|y\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (3.12)$$

Il est toujours possible de choisir λ réel (on vérifiera dans l'exercice 3.3.1 que la physique n'est pas modifiée si λ est complexe). Les nombres λ et μ peuvent alors être paramétrés par deux angles θ et η

$$\lambda = \cos \theta \quad \mu = \sin \theta e^{i\eta}$$

Réalisons le dispositif suivant à l'aide de deux lames biréfringentes et d'un polariseur linéaire, sur lequel arrive une onde électromagnétique (3.7) : ce dispositif sera appelé *polariseur* (λ, μ).

- Une première lame biréfringente déphase \mathcal{E}_y de $-\eta$ en laissant \mathcal{E}_x inchangé

$$\mathcal{E}_x \rightarrow \mathcal{E}_x^{(1)} = \mathcal{E}_x \quad \mathcal{E}_y \rightarrow \mathcal{E}_y^{(1)} = \mathcal{E}_y e^{-i\eta}$$

3. Nous utilisons des lettres majuscules $|\Phi\rangle$ ou $|\Psi\rangle$ pour des vecteurs génériques de \mathcal{H} de la forme (3.12) ou (3.16), afin qu'il n'y ait pas de confusion possible avec un angle, comme dans $|\theta\rangle$ ou $|\alpha\rangle$.

- Le polariseur linéaire projette suivant \hat{n}_θ

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{E}}^{(1)} \rightarrow \vec{\mathcal{E}}^{(2)} &= \left(\mathcal{E}_x^{(1)} \cos \theta + \mathcal{E}_y^{(1)} \sin \theta \right) \hat{n}_\theta \\ &= \left(\mathcal{E}_x \cos \theta + \mathcal{E}_y \sin \theta e^{-i\eta} \right) \hat{n}_\theta\end{aligned}$$

- La seconde lame biréfringente laisse $\mathcal{E}_x^{(2)}$ inchangé et déphase $\mathcal{E}_y^{(2)}$ de η

$$\mathcal{E}_x^{(2)} \rightarrow \mathcal{E}'_x = \mathcal{E}_x^{(2)} \quad \mathcal{E}_y^{(2)} \rightarrow \mathcal{E}'_y = \mathcal{E}_y^{(2)} e^{i\eta}$$

La combinaison des trois opérations se traduit par la transformation $\vec{\mathcal{E}} \rightarrow \vec{\mathcal{E}}'$ de composantes

$$\begin{aligned}\mathcal{E}'_x &= \mathcal{E}_x \cos^2 \theta + \mathcal{E}_y \sin \theta \cos \theta e^{-i\eta} = |\lambda|^2 \mathcal{E}_x + \lambda \mu^* \mathcal{E}_y \\ \mathcal{E}'_y &= \mathcal{E}_x \sin \theta \cos \theta e^{i\eta} + \mathcal{E}_y \sin^2 \theta = \lambda^* \mu \mathcal{E}_x + |\mu|^2 \mathcal{E}_y\end{aligned} \quad (3.13)$$

L'opération (3.13) n'est autre que la *projection* sur $|\Phi\rangle$: en effet, si nous choisissons de représenter les vecteurs $|x\rangle$ et $|y\rangle$ par des vecteurs colonnes

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |y\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

le projecteur \mathcal{P}_Φ

$$\mathcal{P}_\Phi = |\Phi\rangle\langle\Phi| = (\lambda|x\rangle + \mu|y\rangle)(\lambda^*\langle x| + \mu^*\langle y|)$$

est représenté par la matrice

$$\mathcal{P}_\Phi = \begin{pmatrix} |\lambda|^2 & \lambda \mu^* \\ \lambda^* \mu & |\mu|^2 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Au champ incident $\vec{\mathcal{E}}$ (3.7) on peut faire correspondre un vecteur (non unitaire) $|\mathcal{E}\rangle$ de \mathcal{H} de composantes complexes \mathcal{E}_x et \mathcal{E}_y

$$|\mathcal{E}\rangle = \mathcal{E}_x|x\rangle + \mathcal{E}_y|y\rangle$$

À partir de $|\mathcal{E}\rangle$ on définit un vecteur unitaire $|\Psi\rangle$ par $|\mathcal{E}\rangle = E_0|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \nu|x\rangle + \sigma|y\rangle \quad |\nu|^2 + |\sigma|^2 = 1 \quad (3.16)$$

où

$$\nu = \frac{\mathcal{E}_x}{E_0} \quad \sigma = \frac{\mathcal{E}_y}{E_0}$$

Le vecteur unitaire $|\Psi\rangle$ qui décrit la polarisation de l'onde (3.7) est appelé *vecteur de Jones*. D'après (3.13) et (3.15) le champ électrique sera à la sortie du polariseur (λ, μ)

$$|\mathcal{E}'\rangle = \mathcal{P}_\Phi|\mathcal{E}\rangle = E_0\mathcal{P}_\Phi|\Psi\rangle = E_0|\Phi\rangle\langle\Phi|\Psi\rangle \quad (3.17)$$

Nous venons de généraliser à un polariseur (λ, μ) ce que nous avons obtenu pour un polariseur linéaire : le polariseur (λ, μ) projette tout état de polarisation $|\Psi\rangle$ sur $|\Phi\rangle$ avec une amplitude égale à $\langle\Phi|\Psi\rangle$

$$\bar{a}(\Psi \rightarrow \Phi) = \langle\Phi|\Psi\rangle \quad (3.18)$$

À la sortie du polariseur, l'intensité est réduite par un facteur $|\bar{a}(\Psi \rightarrow \Phi)|^2 = |\langle\Phi|\Psi\rangle|^2$. Si l'état de polarisation est décrit par le vecteur unitaire $|\Phi\rangle$ (3.12), alors la transmission par le polariseur (λ, μ) se fait à 100 %. Au contraire l'état de polarisation

$$|\Phi_{\perp}\rangle = -\mu^*|x\rangle + \lambda^*|y\rangle \quad (3.19)$$

est complètement arrêté par le polariseur (λ, μ) . L'état de polarisation (3.16) est en général un état de polarisation elliptique. Il est facile de déterminer les caractéristiques de l'ellipse correspondante et le sens de parcours (exercice 3.3.1).

Les états $|\Phi\rangle$ et $|\Phi_{\perp}\rangle$ forment une base orthonormée de \mathcal{H} , obtenue à partir de la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ par une transformation unitaire U

$$U = \begin{pmatrix} \lambda & \mu \\ -\mu^* & \lambda^* \end{pmatrix}$$

En résumé, nous avons montré qu'à un état de polarisation quelconque on peut faire correspondre un vecteur unitaire $|\Phi\rangle$ d'un espace à deux dimensions \mathcal{H} . Les vecteurs $|\Phi\rangle$ et $\exp(i\beta)|\Phi\rangle$ représentent le même état de polarisation. En toute rigueur, on fait donc correspondre à un état de polarisation un vecteur à une phase près.

3.1.2 Polarisation d'un photon

Nous allons maintenant montrer que le formalisme mathématique utilisé ci-dessus pour décrire la polarisation d'une onde lumineuse se transpose sans modification à la description de la polarisation d'un photon. Cependant, cette identité du formalisme mathématique ne doit pas masquer que *l'interprétation physique subit une modification radicale*. Reprenons l'expérience de la figure 3.2 et diminuons l'intensité lumineuse de telle sorte que les photons puissent être enregistrés individuellement par des photomultiplicateurs D_x et D_y détectant respectivement les photons polarisés suivant Ox et ceux polarisés suivant Oy . On observe alors

- que seul un des deux photomultiplicateurs est déclenché par un photon incident sur la lame. Comme les neutrons du chapitre 1, les photons arrivent entiers, ils ne se divisent jamais !
- que la probabilité p_x (p_y) de déclenchement de D_x (D_y) par un photon incident sur la lame est $p_x = \cos^2 \theta$ ($p_y = \sin^2 \theta$).

On doit nécessairement observer ce résultat si l'on veut retrouver l'optique classique à la limite où le nombre N de photons est grand⁴ : en effet, si N_x et N_y sont les nombres de photons détectés par D_x et D_y , on doit avoir

$$p_x = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_x}{N} \quad p_y = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_y}{N}$$

et $\mathcal{I}_x \propto N_x = N \cos^2 \theta$, $\mathcal{I}_y \propto N_y = N \sin^2 \theta$ à la limite où $N \rightarrow \infty$. Cependant le sort *individuel* d'un photon ne peut pas être prédit : on connaît seulement sa *probabilité* de détection par D_x ou D_y . En physique quantique, les probabilités sont associées à des systèmes quantiques *individuels* alors qu'en physique classique les probabilités sont associées à des ensembles, et le recours aux probabilités est une façon de prendre en compte la complexité de phénomènes que nous ne pouvons pas (ou ne voulons pas) connaître dans le détail. Par exemple, dans le jeu de pile ou face, la connaissance parfaite des conditions initiales du lancer de la pièce, la prise en compte de la résistance de l'air, de la configuration du sol d'arrivée, etc. permettraient en théorie de prévoir le résultat. Quelques physiciens (dont de Broglie, Bohm, etc.) ont proposé que le caractère probabiliste de la mécanique quantique avait une origine analogue : si nous avons accès à des variables supplémentaires, inconnues pour le moment, et appelées pour cette raison *variables cachées*, alors nous pourrions prédire avec certitude le sort individuel de chaque photon. Cette hypothèse de variables cachées est d'une certaine utilité dans les discussions des fondements de la physique quantique. Toutefois nous verrons au chapitre 6 que, moyennant des hypothèses très plausibles, de telles variables sont exclues par l'expérience. En résumé, la connaissance de l'état de polarisation d'un photon permet de déterminer la probabilité qu'il soit transmis par un analyseur : cette probabilité est attachée individuellement à chaque photon, mais pour vérifier cette loi de probabilité, il faut effectuer un grand nombre d'expériences sur des photons tous dans le même état. En théorie classique des probabilités, chaque individu de l'ensemble est dans un état où tous ses paramètres sont déterminés, même s'ils nous sont inconnus, mais ce n'est pas le cas en physique quantique. Nous aurons l'occasion de revenir sur cette question au chapitre 6.

Cependant la seule donnée de probabilités ne fournit qu'une description très incomplète de la polarisation d'un photon. Une description complète requiert l'introduction d'*amplitudes de probabilité*, et non simplement de probabilités. Les amplitudes de probabilité, notées a (nous soulignons la différence entre les amplitudes ondulatoires de la sous-section précédente et les amplitudes de probabilité en utilisant une notation différente : a au lieu de \bar{a}), sont des nombres complexes, et les probabilités sont données par leur module carré $|a|^2$. Pour mettre en évidence le caractère incomplet de la seule donnée des probabilités, reprenons le dispositif de la figure 3.3. Entre les deux

4. Cet énoncé est correct, mais nous passons pour le moment sous silence des problèmes qui seront examinés dans les sections 11.4 et 15.4 : certains effets physiques sont différents, selon que l'on a affaire à N photons isolés arrivant un par un, à un état cohérent contenant une moyenne de N photons ou à un état de Fock à N photons.

lames, un photon suit soit le trajet du rayon extraordinaire polarisé suivant Ox , étiqueté « trajet x », soit le trajet du rayon ordinaire polarisé suivant Oy , étiqueté « trajet y ». Dans un raisonnement purement probabiliste, un photon suivant le trajet x aurait une probabilité $\cos^2 \theta \cos^2 \alpha$ d'être transmis par l'analyseur, et le photon suivant le trajet y une probabilité $\sin^2 \theta \sin^2 \alpha$, ce qui donnerait une probabilité totale

$$p_{\text{tot}} = \cos^2 \theta \cos^2 \alpha + \sin^2 \theta \sin^2 \alpha \quad (3.20)$$

qu'un photon soit transmis par l'analyseur. Ce n'est pas ce que donne l'expérience, qui confirme le résultat établi précédemment par un raisonnement ondulatoire

$$p_{\text{tot}} = \cos^2(\theta - \alpha)$$

Il faut raisonner en amplitudes de probabilité, comme nous l'avons fait pour l'amplitude d'une onde : les amplitudes de probabilité sont données par les mêmes règles que les amplitudes ondulatoires, ce qui garantit que les résultats de l'optique sont reproduits lorsque le nombre de photons $N \rightarrow \infty$. L'amplitude de probabilité pour qu'un photon linéairement polarisé suivant la direction \hat{n}_θ soit polarisé suivant la direction \hat{n}_α est donnée par (3.4) : $a(\theta \rightarrow \alpha) = \cos(\theta - \alpha) = \hat{n}_\theta \cdot \hat{n}_\alpha$. On obtient le tableau suivant pour les amplitudes de probabilité intervenant dans l'expérience de la figure 3.3

$$\begin{array}{ll} a(\theta \rightarrow x) = \cos \theta & a(x \rightarrow \alpha) = \cos \alpha \\ a(\theta \rightarrow y) = \sin \theta & a(y \rightarrow \alpha) = \sin \alpha \end{array}$$

Cet exemple permet d'illustrer les règles qui régissent les combinaisons d'amplitudes de probabilité. L'amplitude de probabilité a_x pour que le photon incident suivant le trajet x soit transmis par l'analyseur est

$$a_x = a(\theta \rightarrow x)a(x \rightarrow \alpha) = \cos \theta \cos \alpha$$

Cette expression met en évidence la règle de *factorisation* des amplitudes : a_x est le produit des amplitudes $a(\theta \rightarrow x)$ et $a(x \rightarrow \alpha)$. Cette règle de factorisation garantit que la règle correspondante pour les probabilités est bien vérifiée. On a de même

$$a_y = a(\theta \rightarrow y)a(y \rightarrow \alpha) = \sin \theta \sin \alpha$$

Si la configuration de l'expérience ne permet pas de savoir quel trajet a suivi le photon, alors on doit ajouter les amplitudes. L'amplitude de probabilité totale pour que le photon soit transmis par l'analyseur est donc

$$a_{\text{tot}} = a_x + a_y = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha = \cos(\theta - \alpha) \quad (3.21)$$

et la probabilité correspondante $\cos^2(\theta - \alpha)$, en accord avec le résultat (3.5) de l'optique classique. S'il existe une possibilité de distinguer entre les deux

trajets, alors les interférences sont détruites et il faut ajouter les probabilités suivant (3.20).

Les règles de combinaison des amplitudes de probabilité étant les mêmes que pour les amplitudes ondulatoires, ces règles seront satisfaites si l'on décrit l'état de polarisation d'un photon par un vecteur unitaire dans un espace vectoriel à deux dimensions \mathcal{H} , appelé *espace des états*, dans le cas présent l'espace des états de polarisation. Lorsqu'un photon est polarisé linéairement suivant Ox (Oy), nous ferons correspondre à son état de polarisation un vecteur $|x\rangle$ ($|y\rangle$) de cet espace. Un tel état de polarisation est obtenu en faisant passer le photon à travers un polariseur linéaire orienté suivant Ox (Oy). La probabilité qu'un photon polarisé suivant Ox soit transmis par un analyseur orienté suivant Oy est nulle : l'amplitude de probabilité $a(x \rightarrow y) = 0$. Inversement, la probabilité qu'un photon polarisé suivant Ox ou Oy soit transmis par un analyseur dans la même direction est égale à un

$$|a(x \rightarrow x)| = |a(y \rightarrow y)| = 1 \quad a(x \rightarrow y) = a(y \rightarrow x) = 0$$

Ces relations sont satisfaites si $|x\rangle$ et $|y\rangle$ forment une base orthonormée de \mathcal{H} et si nous identifions les amplitudes de probabilité aux produits scalaires

$$a(x \rightarrow x) = \langle x|x\rangle = 1 \quad a(y \rightarrow y) = \langle y|y\rangle = 1 \quad a(y \rightarrow x) = \langle x|y\rangle = 0 \quad (3.22)$$

L'état de polarisation *linéaire* le plus général est un état dont la polarisation fait un angle θ avec Ox ; cet état sera représenté par le vecteur

$$|\theta\rangle = \cos\theta |x\rangle + \sin\theta |y\rangle \quad (3.23)$$

Les équations (3.22) et (3.23) assurent que les amplitudes de probabilité écrites précédemment sont correctement données par les produits scalaires, par exemple

$$a(\theta \rightarrow x) = \langle x|\theta\rangle = \cos\theta$$

ou en général, si $|\alpha\rangle$ est un état de polarisation linéaire

$$a(\theta \rightarrow \alpha) = \langle \alpha|\theta\rangle = \cos(\theta - \alpha)$$

L'état de polarisation le plus général sera décrit par un vecteur unitaire, appelé *vecteur d'état*

$$|\Phi\rangle = \lambda|x\rangle + \mu|y\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

Comme dans le cas ondulatoire, les vecteurs $|\Phi\rangle$ et $\exp(i\beta)|\Phi\rangle$ représentent le même état physique : un état physique est représenté par un vecteur à une phase près dans l'espace des états. *L'amplitude de probabilité pour trouver un état de polarisation $|\Psi\rangle$ dans $|\Phi\rangle$* sera donnée par le produit scalaire $\langle \Phi|\Psi\rangle$, et la projection sur un état de polarisation déterminé sera réalisée par le dispositif décrit à la sous-section précédente. En résumé, nous avons illustré

sur un exemple concret, celui de la polarisation d'un photon, la construction de l'espace de Hilbert des états de polarisation.

La polarisation d'un photon est un exemple de *propriété physique quantique*. L'interprétation d'une propriété physique quantique diffère radicalement de celle d'une propriété physique classique. Nous allons l'illustrer en examinant la polarisation d'un photon. Nous nous limiterons dans un premier temps au cas le plus simple des états de polarisation linéaire. À l'aide d'un polariseur linéaire orienté suivant Ox , préparons un ensemble de photons tous dans un état de polarisation linéaire $|x\rangle$: les photons arrivent un par un sur le polariseur, et seuls ceux dont la polarisation est parallèle à Ox sont transmis. C'est la phase de *préparation du système quantique*, où l'on ne conserve donc que les photons ayant traversé le polariseur orienté suivant Ox . La phase suivante, ou *phase de test*, consiste à tester cette polarisation en faisant passer le photon dans un analyseur linéaire : si cet analyseur est parallèle à Ox , les photons sont transmis avec une probabilité un, s'il est parallèle à Oy avec une probabilité nulle. Dans les deux cas le résultat du test peut être prédit avec certitude. La propriété physique « polarisation d'un photon préparé dans l'état $|x\rangle$ » prend des valeurs *certaines* si l'on choisit la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ pour le test.

En revanche, si nous utilisons des analyseurs orientés dans la direction \hat{n}_θ , correspondant à l'état $|\theta\rangle$ (3.23), et dans la direction perpendiculaire \hat{n}_{θ_\perp} , correspondant à l'état

$$|\theta_\perp\rangle = -\sin\theta|x\rangle + \cos\theta|y\rangle \quad (3.24)$$

nous pouvons seulement prédire une *probabilité* de transmission $|\langle\theta|x\rangle|^2 = \cos^2\theta$ dans le premier cas et $|\langle\theta_\perp|x\rangle|^2 = \sin^2\theta$ dans le second. La propriété physique « polarisation du photon dans l'état $|x\rangle$ » n'a pas de valeur certaine dans la base $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$. Autrement dit, la propriété physique polarisation est attachée à une base déterminée, et les deux bases $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ et $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ sont dites *incompatibles* (sauf pour $\theta = 0$ et $\theta = \pi/2$). Un cas intéressant de bases incompatibles est celui des *bases complémentaires* : dans un espace de Hilbert de dimension N , deux bases $|n\rangle$ et $|\alpha\rangle$ sont complémentaires si $|\langle\alpha|n\rangle|^2 = 1/N$, quels que soient $|n\rangle$ et $|\alpha\rangle$. Les bases de polarisation linéaires $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ et $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ pour $\theta = \pi/4$ sont complémentaires ; de même une base de polarisation circulaire $\{|D\rangle, |G\rangle\}$ (3.11) est complémentaire de toute base de polarisation linéaire $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$.

La discussion précédente mérite d'être précisée sur deux points. Tout d'abord, il est clair que l'on ne peut pas déterminer la polarisation d'un photon *isolé*. Le test de polarisation suppose que l'on dispose d'un nombre $N \gg 1$ de photons préparés dans des conditions identiques. Supposons que l'on prépare N photons dans un certain état de polarisation et qu'on les teste en orientant un analyseur linéaire suivant Ox ; si on constate – dans la limite des imperfections du dispositif expérimental – que les photons traversent l'analyseur avec une probabilité de 100 %, on pourra en déduire que les photons

ont été préparés dans l'état $|x\rangle$. L'observation d'un seul photon ne permet évidemment pas d'arriver à cette conclusion, sauf si on connaît par avance la base dans laquelle il a été préparé. Le second point est que si les photons sont transmis avec une probabilité $\cos^2 \theta$, on ne pourra pas en déduire qu'ils ont été préparés dans l'état de polarisation linéaire (3.23). En effet on observera la même probabilité de transmission si les photons ont été préparés dans l'état de polarisation elliptique (3.12), avec

$$\lambda = \cos \theta e^{i\delta_x} \quad \mu = \sin \theta e^{i\delta_y}$$

et il faut effectuer une autre série d'expériences avec une orientation différente de l'analyseur pour mesurer les phases (exercice 3.3.1). Seul un test dont les résultats ont une probabilité 0 ou 1 permet de déterminer sans ambiguïté l'état de polarisation des photons.

Dans la représentation (3.14) des vecteurs de base de \mathcal{H} , les projecteurs \mathcal{P}_x et \mathcal{P}_y sur les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont représentés par les matrices

$$\mathcal{P}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{P}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

qui commutent : $[\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y] = 0$. Les deux opérateurs sont compatibles suivant la définition du § 2.3.3. Les projecteurs \mathcal{P}_θ et $\mathcal{P}_{\theta_\perp}$ que l'on calcule immédiatement à partir de (3.15) sont donnés par

$$\mathcal{P}_\theta = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \sin \theta \cos \theta \\ \sin \theta \cos \theta & \sin^2 \theta \end{pmatrix} \quad \mathcal{P}_{\theta_\perp} = \begin{pmatrix} \sin^2 \theta & -\sin \theta \cos \theta \\ -\sin \theta \cos \theta & \cos^2 \theta \end{pmatrix}$$

Ils commutent entre eux, mais ne commutent ni avec \mathcal{P}_x , ni avec \mathcal{P}_y : \mathcal{P}_x et \mathcal{P}_θ par exemple sont incompatibles. La commutation (ou la non-commutation) d'opérateurs traduit mathématiquement la compatibilité (ou la non-compatibilité) de propriétés physiques.

Un autre choix de base consiste à utiliser les états de polarisation circulaire droite $|D\rangle$ et gauche $|G\rangle$ (3.11). La base $\{|D\rangle, |G\rangle\}$ est incompatible avec toute base formée avec des états de polarisation linéaire (et même complémentaire de ces bases). Les projecteurs \mathcal{P}_D et \mathcal{P}_G sur les états de polarisation circulaire sont

$$\mathcal{P}_D = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad \mathcal{P}_G = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Avec \mathcal{P}_D et \mathcal{P}_G on forme l'opérateur hermitique remarquable Σ_z

$$\boxed{\Sigma_z = \mathcal{P}_D - \mathcal{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}} \quad (3.26)$$

Cet opérateur a pour vecteurs propres les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ dont les valeurs propres respectives sont +1 et -1

$$\Sigma_z |D\rangle = |D\rangle \quad \Sigma_z |G\rangle = -|G\rangle \quad (3.27)$$

Ce résultat suggère d'associer à la propriété physique « polarisation circulaire » un opérateur hermitien Σ_z dont les vecteurs propres sont $|D\rangle$ et $|G\rangle$. Nous verrons au chapitre 10 que $\hbar\Sigma_z = J_z$ est l'opérateur représentant la propriété physique composante suivant Oz du moment angulaire (ou spin) du photon. Nous verrons également que $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ est l'opérateur qui effectue des rotations d'un angle θ autour de l'axe Oz . Un calcul simple (exercice 3.3.3) donne en effet

$$\exp(-i\theta\Sigma_z) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

et $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ transforme bien l'état $|x\rangle$ en l'état $|\theta\rangle$ et $|y\rangle$ en $|\theta_\perp\rangle$

$$\exp(-i\theta\Sigma_z)|x\rangle = |\theta\rangle \quad \exp(-i\theta\Sigma_z)|y\rangle = |\theta_\perp\rangle \quad (3.29)$$

3.1.3 Cryptographie quantique

La cryptographie quantique est une invention récente fondée sur l'incompatibilité de deux bases différentes d'états de polarisation linéaire. La cryptographie usuelle repose sur une clé de chiffage connue seulement de l'expéditeur et du destinataire. Ce système est appelé à *clé secrète*. Il est en principe très sûr⁵, mais il faut que l'expéditeur et le destinataire aient le moyen de se transmettre la clé sans que celle-ci soit interceptée par un espion. Or la clé doit être changée fréquemment, car une suite de messages codés avec la même clé est susceptible de révéler des régularités permettant le déchiffrement du message par une tierce personne. Le processus de transmission d'une clé secrète est un processus à risque, et c'est pour cette raison que l'on préfère maintenant les systèmes fondés sur un principe différent, dits systèmes à *clé publique*, où la clé est diffusée publiquement, par exemple sur Internet. Un système à clé publique courant⁶ est fondé sur la difficulté de décomposer un nombre très grand N en facteurs premiers, alors que l'opération inverse est immédiate : sans calculatrice on obtiendra en quelques secondes $137 \times 53 = 7261$, mais étant donné 7261, cela prendra un certain temps pour le décomposer en facteurs premiers. Avec les meilleurs algorithmes actuels, le temps de calcul sur ordinateur nécessaire pour décomposer un nombre N en facteurs premiers croît avec N comme $\simeq \exp[1.9(\ln N)^{1/3}(\ln \ln N)^{2/3}]$. Le record actuel est de 176 chiffres, et il faut plusieurs mois à une grappe de PC pour arriver au résultat. Dans le système de chiffrement à clé publique, le destinataire, appelé conventionnellement Bob, diffuse publiquement à l'expéditeur, appelé conventionnellement Alice, un nombre très grand $N = pq$ produit de deux nombres premiers p et q . Ce nombre suffit à Alice pour chiffrer le message, mais il faut disposer des nombres p et q pour le déchiffrer. Bien sûr un espion (appelé par convention Ève) disposant d'un ordinateur suffisamment puissant finira par casser le

5. Un chiffrement absolument sûr a été découvert par Vernam en 1917. Cependant la sécurité absolue suppose que la clé soit aussi longue que le message et ne soit utilisée qu'une seule fois!

6. Appelé chiffrement RSA, découvert par Rivest, Shamir et Adleman en 1977.

code, mais on peut en général se contenter de conserver secret le contenu du message pendant un temps limité. Cependant, on ne peut pas exclure que l'on dispose un jour d'algorithmes très performants pour décomposer un nombre en facteurs premiers, et de plus, si des ordinateurs quantiques (§ 6.5.2) voient le jour, les limites de la factorisation seront repoussées très loin. Heureusement la mécanique quantique vient à point nommé pour contrecarrer les efforts des espions !

« Cryptographie quantique » est une expression médiatique, mais quelque peu trompeuse : en effet, il ne s'agit pas de chiffrer un message à l'aide de la physique quantique, mais d'utiliser celle-ci pour s'assurer que la transmission de la clé n'a pas été espionnée. Une expression plus correcte est « distribution quantique de clé » (QKD, *Quantum Key Distribution*). La transmission d'un message, chiffré ou non, peut se faire en utilisant les deux états de polarisation linéaire orthogonaux d'un photon, par exemple $|x\rangle$ et $|y\rangle$. On peut décider d'attribuer par convention la valeur 1 à la polarisation $|x\rangle$ et la valeur 0 à la polarisation $|y\rangle$: chaque photon transporte donc un bit d'information. Tout message, chiffré ou non, peut être écrit en langage binaire, comme une suite de 0 et de 1, et le message 1001110 sera codé par Alice grâce à la séquence de photons $xyyxxy$, qu'elle expédiera à Bob par exemple par une fibre optique. À l'aide d'une lame biréfringente, Bob sépare les photons de polarisation verticale et horizontale comme dans la figure 3.2, et deux détecteurs placés derrière la lame lui permettent de décider si le photon était polarisé horizontalement ou verticalement : il peut donc reconstituer le message. S'il s'agissait d'un message ordinaire, il y aurait bien sûr des façons bien plus simples et efficaces de le transmettre ! Remarquons simplement que si Ève s'installe sur la fibre en connaissant la base utilisée par Alice, détecte les photons et renvoie à Bob des photons de polarisation identique à ceux expédiés par Alice, Bob ne peut pas savoir que la ligne a été espionnée. Il en serait de même pour tout dispositif fonctionnant de façon classique (c'est-à-dire sans utiliser le principe de superposition) : si l'espion prend suffisamment de précautions, il est indétectable.

C'est ici que la mécanique quantique et le principe de superposition viennent au secours d'Alice et de Bob, en leur permettant de s'assurer que leur message n'a pas été intercepté. Ce message n'a pas besoin d'être long (le système de transmission par la polarisation est très peu performant). Il s'agira en général de transmettre une clé permettant de chiffrer un message ultérieur, clé qui pourra être remplacée à la demande. En effectuant un choix de base aléatoire, Alice envoie vers Bob quatre types de photon : polarisés suivant Ox : \uparrow et Oy : \leftrightarrow comme précédemment, et polarisés suivant des axes inclinés à $\pm 45^\circ$ Ox' : \nearrow et Oy' : \nwarrow , correspondant respectivement aux valeurs 1 et 0 des bits. De même Bob analyse les photons envoyés par Alice à l'aide de bases pouvant prendre deux directions, verticale/horizontale, et $\pm 45^\circ$, à nouveaux choisis de façon aléatoire. Une possibilité serait d'utiliser un cristal biréfringent orienté aléatoirement soit verticalement, soit à 45° de

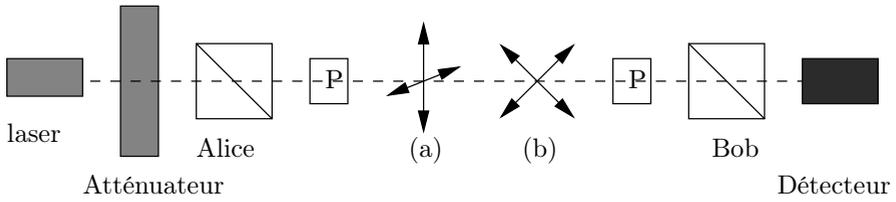


FIG. 3.4 – Schéma du protocole BB84. Un faisceau laser est atténué de façon à envoyer des photons individuels. Une lame biréfringente sélectionne la polarisation, que l'on peut faire tourner à l'aide des cellules de Pockels P. Les photons sont soit polarisés vertical/horizontal (a), soit à $\pm 45^\circ$ (b).

la verticale et de détecter les photons sortant de ce cristal comme dans la figure 3.3. Cependant, au lieu de faire tourner l'ensemble cristal+détecteurs, on utilise plutôt une cellule de Pockels, qui permet de transformer une polarisation donnée en une polarisation orientée de façon arbitraire et de maintenir fixe l'ensemble cristal+détecteur (figure 3.4). La figure 3.5 donne un exemple d'échanges entre Alice et Bob : Bob enregistre 1 si le photon est polarisé \uparrow ou \searrow , 0 s'il est polarisé \leftrightarrow ou \nearrow . Après enregistrement d'un nombre suffisant de photons, Bob annonce publiquement la suite des bases qu'il a utilisées, mais non ses résultats. Alice compare sa séquence de bases à celle de Bob et lui donne toujours publiquement la liste des bases compatibles avec les siennes. Les bits qui correspondent à des analyseurs et des polariseurs incompatibles sont rejetés (-), et, pour les bits restants, Alice et Bob sont certains que leurs valeurs sont les mêmes : ce sont les bits qui serviront à composer la clé, et ils sont connus seulement de Bob et Alice, car l'extérieur ne connaît que la liste des orientations, pas les résultats ! Le protocole décrit ci-dessus est appelé BB84, du nom de ses inventeurs Bennett et Brassard en 1984.

polariseurs d'Alice	\updownarrow	\leftrightarrow	\nearrow	\updownarrow	\nearrow	\nearrow	\searrow	\updownarrow	\searrow
séquences de bits	1	0	0	1	0	0	1	1	1
analyseurs de Bob	\leftrightarrow	\times	\leftrightarrow	\leftrightarrow	\times	\times	\leftrightarrow	\leftrightarrow	\times
mesures de Bob	1	1	0	1	0	0	1	1	1
bits retenus	1	-	-	1	0	0	-	1	1

FIG. 3.5 – Cryptographie quantique : transmission de photons polarisés entre Bob et Alice.

Il reste à s'assurer que le message n'a pas été intercepté et que la clé qu'il contenait peut être utilisée sans risque. Alice et Bob choisissent au hasard un sous-ensemble de leur clé et le comparent publiquement. La conséquence de l'interception de photons par Ève serait une réduction de la corrélation entre les valeurs de leurs bits : supposons par exemple qu'Alice envoie un photon polarisé suivant Ox . Si Ève l'intercepte avec un analyseur orienté suivant Ox' , et que le photon est transmis par son analyseur, elle ne sait pas que ce photon était initialement polarisé suivant Ox ; elle renvoie donc à Bob un photon polarisé dans la direction Ox' , et dans 50 % des cas Bob ne va pas trouver le bon résultat. Comme Ève a une chance sur deux d'orienter son analyseur dans la bonne direction, Alice et Bob vont enregistrer une différence dans 25 % des cas et en conclure que le message a été intercepté. En résumé, la sécurité du protocole dépend du fait qu'Ève ne peut pas déterminer l'état de polarisation d'un photon si elle ne sait pas par avance dans quelle base il a été préparé.

La discussion précédente est bien sûr simplifiée : elle ne tient pas compte des possibilités d'erreurs qu'il faut corriger par un code correcteur d'erreurs classique, auquel se rajoute une procédure appelée amplification des données privées (*privacy amplification*), au cas où Ève aurait deviné correctement certains bits. D'autre part il faudrait utiliser des photons uniques, et non des paquets d'états cohérents qui sont moins sûrs, mais que l'on doit choisir pour des raisons pratiques⁷. Le taux d'erreur sur les bits quantiques (QBER, *Quantum Bit Error Rate*) est simplement la probabilité que Bob mesure une valeur erronée de la polarisation, alors qu'il connaît la base utilisée par Alice. On peut montrer que ce QBER doit être inférieur à 11 % si Alice et Bob veulent disposer d'une clé fiable. Plusieurs prototypes ont été réalisés récemment pour des transmissions sur plusieurs kilomètres dans l'air. Lorsque l'on utilise des fibres optiques, il est difficile de contrôler la polarisation sur de longues distances, et les bits sont codés dans la phase des photons. Dans ce cas on peut transmettre la clé sur une centaine de kilomètres avec des taux d'une centaine de kbits.s⁻¹, et deux versions du dispositif sont aujourd'hui disponibles sur le marché.

3.2 Spin 1/2

3.2.1 Moment angulaire et moment magnétique en physique classique

Notre second exemple de système quantique élémentaire sera celui du spin 1/2. En l'absence d'une limite ondulatoire classique comme dans le cas

7. Une impulsion laser atténuée utilisée en cryptographie quantique contient typiquement 0.1 photon en moyenne. On peut alors montrer qu'une impulsion non vide a une probabilité de 5 % de contenir deux photons (voir (11.34)), un fait qui peut être exploité par Ève. Dans le cas de transmission de photons uniques, le théorème de non-clonage quantique (§ 6.5.1) garantit qu'il est impossible à Ève de tromper Bob, même s'il lui est possible de faire moins de 50 % d'erreurs en utilisant une technique d'interception plus sophistiquée.

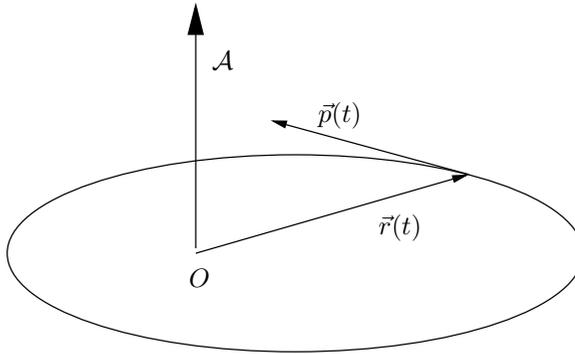


FIG. 3.6 – Facteur gyromagnétique.

du photon, la partie classique sera beaucoup plus sommaire que celle de la section précédente. Considérons une particule de masse m et de charge q décrivant une orbite fermée dans un champ de forces central (figure 3.6), $\vec{r}(t)$ et $\vec{p}(t)$ désignant la position et l'impulsion de cette particule. Soit $d\vec{\mathcal{A}}$ l'aire orientée balayée par le rayon vecteur en un temps dt , qui vérifie

$$\frac{d\vec{\mathcal{A}}}{dt} = \frac{1}{2m} \vec{r} \times \vec{p} = \frac{1}{2m} \vec{j}$$

où \vec{j} est le moment angulaire. Rappelons que pour un mouvement dans un champ de forces central, ce moment angulaire est un vecteur fixé, perpendiculaire au plan de l'orbite. En intégrant sur une période on relie l'aire totale orientée de l'orbite $\vec{\mathcal{A}}$ à \vec{j} et à la période T

$$\vec{\mathcal{A}} = \frac{T}{2m} \vec{j}$$

Le courant induit par la charge est $I = q/T$ car la charge q passe $1/T$ fois par seconde devant un point donné, et le moment magnétique $\vec{\mu}$ induit par ce courant vaut

$$\boxed{\vec{\mu} = I\vec{\mathcal{A}} = \frac{q}{2m} \vec{j} = \gamma \vec{j}} \quad (3.30)$$

Le *facteur gyromagnétique* γ défini par (3.30) vaut $q/(2m)$. Le mouvement des électrons dans les atomes entraîne l'existence d'un magnétisme atomique et le mouvement des protons dans les noyaux atomiques celle d'un magnétisme nucléaire. Cependant le mouvement des charges ne peut expliquer quantitativement ni le magnétisme atomique, ni le magnétisme nucléaire. Il faut tenir compte d'un magnétisme intrinsèque aux particules. L'expérience montre que les particules élémentaires – de spin non nul – portent un moment magnétique associé à un moment angulaire intrinsèque, appelé *spin* de la particule, que nous noterons \vec{s} . On peut essayer de se représenter de façon intuitive ce

moment angulaire comme provenant d'une rotation de la particule sur elle-même. Cette image intuitive peut être utile, mais il ne faut pas la prendre très au sérieux : prise à la lettre, elle conduit à des contradictions insurmontables, et seule la mécanique quantique permet une description correcte du spin. L'expérience montre que l'électron, le proton et le neutron ont un spin $\frac{1}{2}\hbar$. On omet souvent le facteur \hbar , et on dit simplement que *l'électron, le proton et le neutron sont des particules de spin 1/2*. Le facteur gyromagnétique associé au spin est différent de (3.30). Il vaut par exemple pour l'électron⁸ et le proton

$$\text{électron : } \gamma_e = 2 \frac{q_e}{2m_e} \quad \text{proton : } \gamma_p = 5.59 \frac{q_p}{2m_p}$$

où ($q_e, q_p = -q_e$) et (m_e, m_p) sont les charges et les masses de l'électron et du proton ; le facteur 2 pour l'électron est justifié au § 8.4.2. Mieux, bien que de charge nulle, le neutron possède un moment magnétique ! Son facteur gyromagnétique est donné par

$$\gamma_n = -3.83 \frac{q_p}{2m_p}$$

Le magnétisme des atomes est dû à la combinaison du mouvement des électrons (magnétisme orbital) et du magnétisme associé au spin des électrons. Le magnétisme des noyaux atomiques est dû au mouvement des protons et au magnétisme associé aux spins des neutrons et des protons. L'équation (3.30) montre que le facteur gyromagnétique est inversement proportionnel à la masse : le magnétisme d'origine nucléaire est plus faible que le magnétisme d'origine électronique par un facteur $\sim m_e/m_p \sim 1/1\,000$. Malgré ce facteur défavorable, le magnétisme nucléaire joue un rôle pratique considérable en étant à la base de la résonance magnétique nucléaire (RMN : section 5.2) et de ses dérivés comme l'imagerie par résonance magnétique (IRM).

Examinons en physique classique le mouvement d'un moment magnétique $\vec{\mu}$ dans un champ magnétique constant \vec{B} . Ce moment magnétique est soumis à un couple $\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \times \vec{B}$, et l'équation du mouvement est

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \frac{q}{2m} \vec{s} \times \vec{B} = -\frac{qB}{2m} \hat{B} \times \vec{s} \quad (3.31)$$

Cette équation implique que \vec{s} et $\vec{\mu}$ tournent autour de \vec{B} avec une vitesse angulaire constante $\omega = -qB/(2m)$, appelée *fréquence de Larmor*. Il est commode de donner une valeur algébrique à ω : la rotation se fait dans le sens trigonométrique pour $q < 0$ ($\omega > 0$). Le mouvement de rotation est appelé précession de Larmor (figure 3.7).

8. À des corrections près de l'ordre de 0.1 % : ces corrections sont calculables grâce à l'électrodynamique quantique.

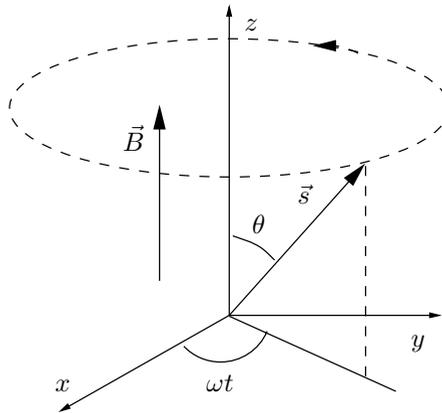


FIG. 3.7 – Précession de Larmor : le spin \vec{s} précesse autour de \vec{B} avec une fréquence angulaire ω .

3.2.2 Expérience de Stern-Gerlach et filtres de Stern-Gerlach

L'expérience réalisée par Stern et Gerlach en 1921 est schématisée sur la figure 3.8. Un jet d'atomes d'argent sort d'un four et est collimaté par deux fentes, avant de passer dans l'entrefer d'un aimant où règne un champ magnétique dirigé suivant⁹ Oz . Le champ magnétique est inhomogène : B_z est une fonction de z . L'atome d'argent porte un moment magnétique qui est en fait le moment magnétique de son électron de valence. Du point de vue des forces magnétiques, tout se passe comme si un électron traversait l'entrefer de l'aimant. Cependant on doit utiliser dans la dynamique la masse de l'atome et non celle de l'électron et noter l'absence de force de Lorentz, l'atome d'argent étant électriquement neutre. L'énergie potentielle U d'un moment magnétique dans \vec{B} est $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, et la force correspondante

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U \quad F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (3.32)$$

En réalité \vec{B} ne peut pas être strictement parallèle à Oz : si $\vec{B} = (0, 0, B)$, $\partial B/\partial z \neq 0$ est incompatible avec l'équation de Maxwell $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$. Une justification complète de (3.32) se trouve dans l'exercice 9.6.12, où l'on montre que la force effective sur l'atome est bien donnée par (3.32). Lorsque le champ magnétique est nul, les atomes arrivent au voisinage d'un point de l'écran et forment une tache de dimension finie en raison de la dispersion des vitesses, car la collimation n'est pas parfaite. L'orientation des moments magnétiques

9. Le lecteur prendra garde au fait que l'orientation des axes est différente de celle de la section précédente : la direction de propagation est maintenant Oy . Ce nouveau choix est dicté par le souhait de respecter les conventions usuelles.

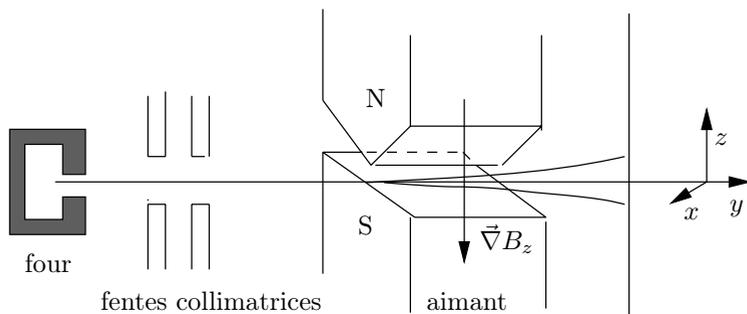


FIG. 3.8 – Expérience de Stern-Gerlach.

à la sortie du four est *a priori* aléatoire, et en présence du champ magnétique, on s'attendrait à un élargissement de la tache : les atomes dont le moment magnétique $\vec{\mu}$ est antiparallèle à Oz subissent une déviation maximale vers le haut pour $(\partial B_z/\partial z) < 0$, ceux dont $\vec{\mu}$ est parallèle à Oz une déviation maximale vers le bas, toutes les déviations intermédiaires étant possibles. En fait on observe expérimentalement *deux* taches symétriques par rapport au point d'arrivée en l'absence de champ magnétique. Tout se passe comme si μ_z , et donc s_z , ne pouvait prendre que deux valeurs, et deux seulement, dont on constate¹⁰ qu'elles correspondent à $s_z = \pm\hbar/2$: s_z est *quantifié*. On remarquera que comme le facteur gyromagnétique est négatif ($\gamma < 0$), la déviation vers le haut (resp. bas) correspond à $s_z > 0$ (resp. < 0). L'appareil de Stern-Gerlach agit comme la lame biréfringente de la figure 3.2 : à la sortie de l'appareil, l'électron suit une trajectoire¹¹ où son spin est orienté soit vers le haut : $s_z = +\hbar/2$, soit vers le bas : $s_z = -\hbar/2$. L'analogie avec la polarisation des photons nous suggère de prendre comme espace des états de spin 1/2 un espace vectoriel à deux dimensions, ce qui s'avèrera être le bon choix. Une base possible de cet espace est formée des deux vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$, décrivant les états physiques obtenus en sélectionnant les atomes déviés vers le haut ou vers le bas par l'appareil de Stern-Gerlach, et correspondant respectivement aux valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$ de s_z . Les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont souvent appelés « spin up » et « spin down ». Ces états de spin sont l'analogue de deux états de polarisation orthogonale $|\Phi\rangle$ et $|\Phi_\perp\rangle$ dans le cas des photons¹².

Le dispositif schématisé sur la figure 3.9 permet de recombinaison les atomes déviés vers le haut ou vers le bas sur une trajectoire unique, de même que

10. La connaissance de $\partial B_z/\partial z$ et de γ permet en principe de remonter à la valeur de s_z à partir de la déviation : exercice 9.6.12.

11. On peut montrer (exercice 9.6.12) que les trajectoires peuvent être traitées classiquement.

12. Toutefois il ne faut pas pousser trop loin cette analogie ; comme nous le verrons au chapitre 10, le photon a un spin \hbar , et non $\hbar/2$. Un spin \hbar a normalement trois états de polarisation possibles. Il y en a seulement deux dans le cas du photon parce que le photon a une masse nulle.

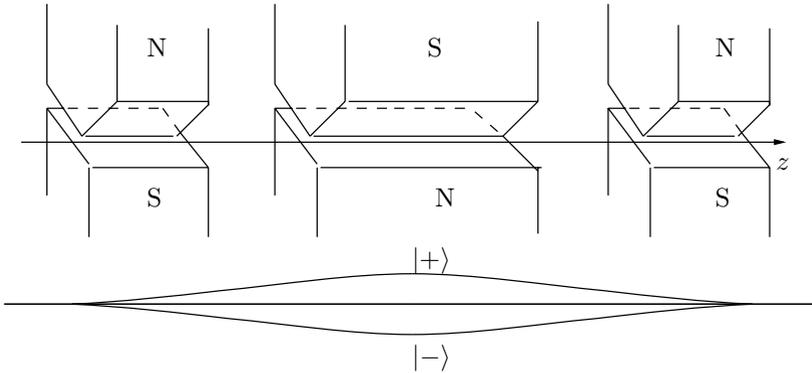


FIG. 3.9 – Filtre de Stern-Gerlach.

la combinaison de deux lames biréfringentes de la figure 3.3 permettait de recombiner les trajectoires des photons polarisés suivant Ox et suivant Oy . Ce dispositif, que nous appellerons « filtre de Stern-Gerlach » n'a pas été réalisé expérimentalement par Stern et Gerlach. Il a été imaginé 40 ans plus tard par Wigner pour les besoins d'une discussion théorique. Si l'on place deux filtres de Stern-Gerlach à la suite l'un de l'autre avec la même orientation de \vec{B} en bloquant par exemple les deux voies du bas (figure 3.10a), on constate que 100 % des atomes qui passent le premier filtre sont aussi transmis par le second, de même qu'un photon sélectionné par un polariseur orienté suivant Ox est transmis avec une probabilité de 100 % par un analyseur de même orientation. Si au contraire la voie du bas est bloquée sur le premier filtre et la voie du haut sur le second (figure 3.10b), alors aucun atome n'est transmis, de même qu'aucun photon n'est transmis si l'analyseur et le polariseur sont croisés. Comme dans la section précédente, on rend compte de ces résultats en écrivant les amplitudes de probabilité $a(+ \rightarrow +)$ et $a(+ \rightarrow -)$ comme des produits scalaires de vecteurs de base¹³

$$a(+ \rightarrow +) = \langle + | + \rangle = 1 \quad a(- \rightarrow -) = \langle - | - \rangle = 1 \quad a(+ \rightarrow -) = \langle - | + \rangle = 0 \quad (3.33)$$

Si l'on représente les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sous la forme de vecteurs colonnes

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

le vecteur d'état (unitaire) le plus général $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ s'écrira

$$|\chi\rangle = \lambda|+\rangle + \mu|-\rangle \quad \text{ou} \quad |\chi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (3.35)$$

13. En toute rigueur on sait seulement que $|a(+ \rightarrow +)| = |a(- \rightarrow -)| = 1$, mais un choix de phase convenable permet toujours de se ramener à (3.33).

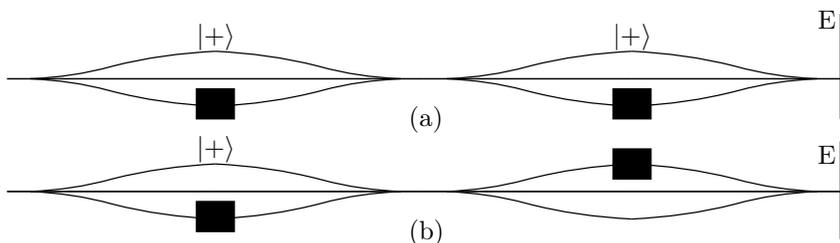


FIG. 3.10 – Filtres de Stern-Gerlach en série. En (b), aucun atome n’arrive sur l’écran E .

Avec les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ on peut construire un opérateur hermitien S_z tel que ces vecteurs soient vecteurs propres de S_z avec les valeurs propres $\pm\hbar/2$

$$S_z = \frac{1}{2}\hbar(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) = \frac{1}{2}\hbar(\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

où \mathcal{P}_+ et \mathcal{P}_- sont les projecteurs sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. À la propriété physique S_z , composante suivant z du spin, on associe un opérateur hermitien S_z agissant dans l’espace des états \mathcal{H} . Les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont aussi appelés *états propres de S_z* , et forment la base où S_z est diagonal : dans cette base S_z est représenté par la matrice diagonale (3.36). La propriété physique : composante suivant z du spin, a une valeur bien déterminée $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ si le vecteur d’état $|\chi\rangle$ est égal à $|+\rangle$ ou $|-\rangle$.

3.2.3 États de spin d’orientation arbitraire

Poursuivons l’analogie avec la polarisation d’un photon en faisant tourner la direction du champ magnétique du filtre de Stern-Gerlach et en l’alignant dans la direction \hat{n} : seule la composante $B_{\hat{n}} = \vec{B} \cdot \hat{n}$ du champ magnétique est non nulle. Avec cette nouvelle orientation, le filtre de Stern-Gerlach va fabriquer des états que nous noterons $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$, obtenus en sélectionnant les atomes déviés respectivement dans le sens de \hat{n} et dans la direction opposée¹⁴. Par analogie avec le cas des photons, nous dirons que le spin 1/2 est *polarisé* dans la direction $+\hat{n}$ ou $-\hat{n}$. Nous procédons comme pour l’étude de la polarisation d’un photon, en utilisant un premier filtre de Stern-Gerlach, jouant le rôle de polariseur, dont le champ magnétique orienté suivant Oz sélectionne les spins dans l’état $|+\rangle$. Le deuxième filtre a son champ magnétique orienté dans la direction \hat{n} et joue le rôle d’analyseur. Il permet de mesurer expérimentalement les probabilités $\mathbf{p}(+ \rightarrow [+, \hat{n}]) = |\langle +, \hat{n} | + \rangle|^2$ et $\mathbf{p}(+ \rightarrow [-, \hat{n}]) = |\langle -, \hat{n} | + \rangle|^2$; comme dans la section précédente, nous supposons que ces probabilités sont données par le module carré de produits

14. Ceci suppose que l’on sache changer la direction de propagation des électrons pour la rendre orthogonale à \hat{n} . Comme nous discutons une « expérience théorique », nous ne nous attarderons pas sur les moyens qui pourraient être utilisés pour ce faire.

scalaires. De même que les états¹⁵ $|+\rangle$ et $|-\rangle$, les états $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ sont orthogonaux : $\langle +, \hat{n} | -, \hat{n} \rangle = 0$. Si le polariseur et l'analyseur sont orientés dans la même direction, un état préparé par le polariseur est transmis à 100 % par l'analyseur, et à 0 % si leurs orientations sont opposées¹⁶ : le résultat du test de la polarisation est certain. Si les directions ne sont pas les mêmes, on observe seulement une certaine probabilité de transmission. De même que les bases d'états de polarisation d'un photon $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ et $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ étaient incompatibles (§ 3.1.2), les bases $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ et $\{|+, \hat{n}\rangle, |-, \hat{n}\rangle\}$ sont incompatibles pour les états de spin 1/2.

Nous allons maintenant utiliser l'invariance par rotation pour déterminer les probabilités de transmission : la physique de ce problème ne doit pas dépendre de l'orientation du système d'axes. La première conséquence de cette invariance est que la direction Oz n'a aucune raison d'être privilégiée, et qu'il doit exister un opérateur hermitien $S_{\hat{n}} = \vec{S} \cdot \hat{n}$, projection du spin sur l'axe \hat{n} , ayant des valeurs propres $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ et la forme (3.36) dans une base $\{|+, \hat{n}\rangle, |-, \hat{n}\rangle\}$ qui reste à déterminer. L'opérateur $S_{\hat{n}}$ s'écrira en fonction de ses valeurs propres et de ses vecteurs propres

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \left(|+, \hat{n}\rangle \langle +, \hat{n}| - |-, \hat{n}\rangle \langle -, \hat{n}| \right) \quad (3.37)$$

Introduisons la notion de *valeur moyenne* de la composante suivant \hat{n} du spin, que nous noterons $\langle S_{\hat{n}} \rangle$. Comme la déviation dans la direction $\pm \hat{n}$ correspond à une valeur $s_{\hat{n}} = \pm \hbar/2$ lorsque le spin est dans un état $|\chi\rangle$ arbitraire, cette valeur moyenne, notée $\langle S_{\hat{n}} \rangle$, sera donnée par

$$\begin{aligned} \langle S_{\hat{n}} \rangle &= \frac{1}{2} \hbar \left(\mathbf{p}(\chi \rightarrow [+ , \hat{n}]) - \mathbf{p}(\chi \rightarrow [- , \hat{n}]) \right) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \left(\langle \chi | +, \hat{n} \rangle \langle +, \hat{n} | \chi \rangle - \langle \chi | -, \hat{n} \rangle \langle -, \hat{n} | \chi \rangle \right) \\ &= \langle \chi | \frac{1}{2} \hbar \left(|+, \hat{n}\rangle \langle +, \hat{n}| - |-, \hat{n}\rangle \langle -, \hat{n}| \right) | \chi \rangle \\ &= \langle \chi | S_{\hat{n}} | \chi \rangle \end{aligned} \quad (3.38)$$

La matrice représentative de $S_{\hat{n}}$ dans la base (3.34) où S_z est diagonal est *a priori* donnée par la matrice hermitienne 2×2 la plus générale de valeurs propres $\pm \hbar/2$

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar A \quad (3.39)$$

où a et c sont des nombres réels. L'équation aux valeurs propres λ_{\pm} de la matrice A s'écrit

$$\lambda^2 - (a + c)\lambda + ac - |b|^2 = 0$$

15. Les notations $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont donc des notations abrégées pour $|+, \hat{z}\rangle$ et $|-, \hat{z}\rangle$.

16. Et non orthogonales comme dans le cas des photons !

On doit avoir $\lambda_+ + \lambda_- = 0$ et $\lambda_+ \lambda_- = -1$, soit

$$a + c = 0 \quad ac - |b|^2 = -1 \Rightarrow a^2 + |b|^2 = 1$$

Paramétrons a et b à l'aide de deux angles α et β : $a = \cos \beta$ et $b = \exp(-i\alpha) \sin \beta$. Nous obtenons pour $S_{\hat{n}}$

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \cos \beta & e^{-i\alpha} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta & -\cos \beta \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

dont les vecteurs propres sont à un facteur de phase près (cf. (2.35))

$$|+, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \sin \beta/2 \end{pmatrix} \quad |-, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2} \sin \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

3.2.4 Rotation d'un spin 1/2

Il nous reste à trouver une interprétation géométrique aux angles α et β . Nous allons faire l'hypothèse que la valeur moyenne $\langle \vec{S} \rangle$, dont les composantes sont $(\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle)$, se transforme par rotation comme un vecteur de l'espace à trois dimensions, c'est-à-dire comme l'objet classique \vec{s} correspondant. Reprenons l'expérience type polariseur/analyseur. Dans un premier temps, le champ magnétique du polariseur est orienté suivant Oz , et de même pour l'analyseur. Nous savons que dans ce cas 100 % des spins traversent l'analyseur. Si le champ de l'analyseur est orienté antiparallèlement à Oz , alors aucun spin ne le traverse. Nous pouvons exprimer ce résultat sous la forme suivante : à la sortie du polariseur, la valeur moyenne de S_z , $\langle S_z \rangle$ est égale à $\hbar/2$. Orientons maintenant le champ magnétique de l'analyseur suivant Ox : on constate expérimentalement que les spins ont alors une chance sur deux d'être déviés vers les x positifs et une chance sur deux d'être déviés vers les x négatifs, ce qui correspond à une valeur moyenne nulle de S_x : $\langle S_x \rangle = 0$. Ce résultat ne doit pas surprendre. Un premier argument fait appel à un raisonnement classique : un spin classique parallèle à Oz n'est pas dévié par un gradient de champ suivant Ox . Un deuxième argument plus général fait appel à l'invariance par rotation¹⁷ : dans notre problème, les variables de spin sont découplées des variables spatiales liées à la propagation de l'atome et, pour les rotations du spin, le problème est invariant par rotation autour de Oz : en l'absence de direction privilégiée dans le plan xOy , $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$. Le vecteur $\langle \vec{S} \rangle$ a donc pour composantes $(0, 0, \hbar/2)$.

Supposons maintenant que l'expérimentateur décide d'utiliser un système d'axes $x'Oz'$ obtenu à partir de xOz par une rotation d'angle $-\theta$ autour de Oy (figure 3.11a). Si $\langle \vec{S} \rangle$ est un vecteur, ses composantes dans le nouveau système d'axes seront $\hbar/2(\sin \theta, 0, \cos \theta)$. On obtient une situation physique équivalente¹⁸ en conservant le système d'axes original et en orientant le gradient

17. On peut aussi invoquer l'invariance par parité sans faire appel au découplage des variables de spin et des variables spatiales : voir exercice 9.6.12.

18. Nous verrons au § 8.1.1 que ceci consiste à passer du point de vue passif au point de vue actif pour une opération de symétrie.

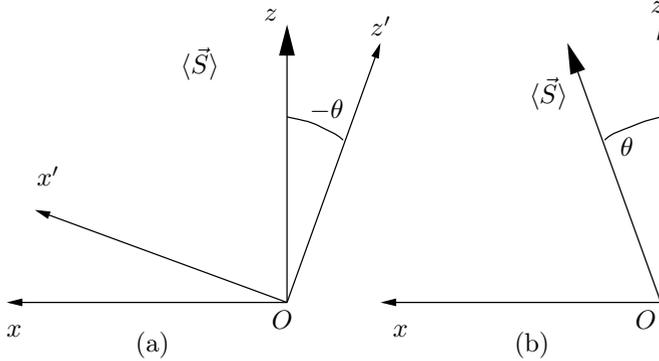


FIG. 3.11 – (a) $\langle \vec{S} \rangle$ dans deux systèmes d’axes. (b) Rotation de $\langle \vec{S} \rangle$.

du champ magnétique du polariseur suivant une direction faisant un angle θ avec Oz (figure 3.11b). Le polariseur prépare alors les spins dans un état que nous noterons $|+, \hat{n}_\theta\rangle$. On a donc pour les valeurs moyennes

$$\langle S_x \rangle = \langle +, \hat{n}_\theta | S_x | +, \hat{n}_\theta \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \quad \langle S_z \rangle = \langle +, \hat{n}_\theta | S_z | +, \hat{n}_\theta \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (3.42)$$

En général on pourra orienter le champ magnétique \vec{B} du polariseur suivant une direction quelconque \hat{n} : le polariseur prépare les spins dans l’état $|+, \hat{n}\rangle$. Soit θ et ϕ les angles polaire et azimutal définissant la direction de \hat{n} (figure 3.12). La généralisation immédiate de l’argument précédent montre que les valeurs moyennes de \vec{S} sont alors

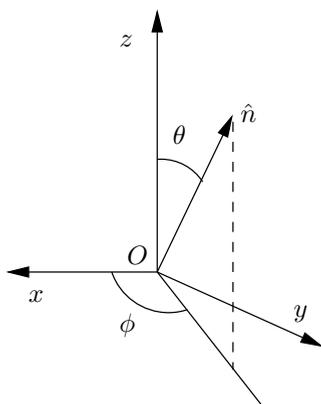
$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_x | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \phi = \frac{\hbar}{2} n_x \\ \langle S_y \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_y | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \phi = \frac{\hbar}{2} n_y \\ \langle S_z \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_z | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta = \frac{\hbar}{2} n_z \end{aligned} \quad (3.43)$$

ou bien, en notation vectorielle

$$\langle \vec{S} \rangle = \langle +, \hat{n} | \vec{S} | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \hat{n} \quad (3.44)$$

Nous avons détaillé le raisonnement menant à (3.44), mais nous aurions pu arriver directement au résultat en remarquant que le seul vecteur à notre disposition est \hat{n} , et $\langle \vec{S} \rangle$ est nécessairement parallèle à \hat{n} . Calculons maintenant les valeurs moyennes compte tenu de (3.41)

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \beta/2 - \sin^2 \beta/2) = \frac{\hbar}{2} \cos \beta$$

FIG. 3.12 – Orientation de \hat{n} .

On doit donc avoir $\beta = \pm\theta$. Choisissons la solution $\beta = \theta$ et calculons les matrices représentatives de S_x et S_y dans la base (3.34) ; comme $\theta = \beta = \pi/2$ dans les deux cas, (3.40) devient

$$S_x = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_x} \\ e^{i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_y} \\ e^{i\alpha_y} & 0 \end{pmatrix}$$

Ceci donne pour les valeurs moyennes

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{2} \hbar \sin \theta \cos(\alpha - \alpha_x) \quad \langle S_y \rangle = \frac{1}{2} \hbar \sin \theta \cos(\alpha - \alpha_y)$$

On obtient par identification avec (3.43)

$$\cos(\alpha - \alpha_x) = \cos \phi \quad \cos(\alpha - \alpha_y) = \sin \phi \quad (3.45)$$

La solution de (3.45) n'est pas unique¹⁹ ; nous choisirons par convention

$$\alpha_x = 0 \quad \alpha_y = \pi/2$$

Avec ce choix $\alpha = \phi$ et les opérateurs S_x , S_y et S_z dans la base (3.34) prennent la forme

$$S_x = \frac{1}{2} \hbar \sigma_x \quad S_y = \frac{1}{2} \hbar \sigma_y \quad S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \quad (3.46)$$

Les matrices σ_x , σ_y et σ_z sont appelées *matrices de Pauli*

$$\boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} \quad (3.47)$$

¹⁹. Les autres solutions correspondent à un système d'axes obtenu par rotation autour de Oz des axes Ox et Oy ou à un système d'axes obtenu par inversion de Oy : cf. exercice 3.3.4.

Ces matrices vérifient des relations importantes souvent utilisées

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \quad \text{et permutations} \quad (3.48)$$

que l'on peut rassembler en

$$\boxed{\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k} \quad (3.49)$$

où les indices (i, j, k) prennent les valeurs (x, y, z) et ε_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique, égal à $+1$ si (ijk) est une permutation paire de (xyz) , à -1 dans le cas d'une permutation impaire et à zéro dans tous les autres cas²⁰. Une forme équivalente de (3.49) est la suivante : si \vec{a} et \vec{b} sont deux vecteurs

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \quad (3.50)$$

où l'on a utilisé pour le produit vectoriel

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} a_j b_k \quad (3.51)$$

L'équation (3.49) implique aussi les relations de commutation²¹

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.52)$$

ou, de façon équivalente pour les composantes du spin

$$\boxed{[S_i, S_j] = i \hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k} \quad (3.53)$$

Les matrices de Pauli forment avec la matrice identité I une base pour l'espace vectoriel des matrices sur \mathcal{H} . En effet toute matrice 2×2 peut s'écrire

$$A = \lambda_0 I + \sum_i \lambda_i \sigma_i \quad (3.54)$$

où les coefficients λ_0 et λ_i sont réels pour une matrice hermitique $A = A^\dagger$; ils sont donnés par (exercice 3.3.5)

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \text{Tr } A \quad \lambda_i = \frac{1}{2} \text{Tr } A \sigma_i \quad (3.55)$$

Le fait que les matrices de Pauli forment une base pour les matrices sur tout espace de Hilbert à deux dimensions entraîne que ces matrices sont souvent

20. Par exemple $\varepsilon_{yzz} = 1$, $\varepsilon_{yzz} = -1$ et $\varepsilon_{xxz} = 0$.

21. En écrivant les indices explicitement : $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z$ et deux autres relations obtenues par permutation circulaire des indices (x, y, z) .

utilisées pour des problèmes où l'espace des états est à deux dimensions, même si le problème physique n'a rien à voir avec un spin 1/2. Elles sont par exemple très utiles pour traiter un modèle standard de la physique atomique, l'atome dit « à deux niveaux » (voir section 5.4 et § 15.5.1).

Les vecteurs propres $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ de $S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$ se déduisent de (3.41) avec $\beta = \theta$ et $\alpha = \varphi$

$$|+, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad |-, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

Les états $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ sont les transformés des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ par une rotation qui amène l'axe Oz sur l'axe \hat{n} : un choix possible, cohérent avec celui qui sera fait ultérieurement au chapitre 10, consiste à effectuer une première rotation de θ autour de Oy , suivie d'une rotation de ϕ autour de Oz . On peut écrire (3.56) sous la forme

$$\begin{aligned} |+, \hat{n}\rangle &= D_{++}^{(1/2)}(\theta, \phi)|+\rangle + D_{-+}^{(1/2)}(\theta, \phi)|-\rangle \\ |-, \hat{n}\rangle &= D_{+-}^{(1/2)}(\theta, \phi)|+\rangle + D_{--}^{(1/2)}(\theta, \phi)|-\rangle \end{aligned} \quad (3.57)$$

Cette équation définit une matrice²² $D^{(1/2)}(\theta, \phi)$, appelée *matrice de rotation* pour le spin 1/2

$$D^{(1/2)}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 & -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 & e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Cette matrice est unitaire, car elle effectue un changement de base dans \mathcal{H} , et de plus on vérifie qu'elle est de déterminant 1, et c'est donc une matrice appartenant au groupe $SU(2)$: cf. exercice 8.5.2. Il est intéressant de considérer les rotations de 2π , qui ramènent le système physique à sa position initiale. On remarque que par exemple $D^{1/2}(\theta = 2\pi, \phi = 0) = -I$. Dans une rotation de 2π autour de Oy , le vecteur d'état $|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle$! Mais il n'y a là aucun paradoxe : les vecteurs $|\chi\rangle$ et $-|\chi\rangle$ représentent le même état physique, et, comme il se doit, une rotation de 2π ne modifie pas l'état physique. Ce comportement du spin 1/2 est à contraster avec celui des photons : d'après (3.28), $\exp(-2i\pi\Sigma_z) = +I$, et le vecteur d'état est inchangé dans une rotation de 2π . Nous observons là une différence remarquable entre spins entiers et spins demi-entiers, sur laquelle nous reviendrons au chapitre 10.

Nous allons mettre la matrice de rotation $D^{(1/2)}(\theta, \phi)$ sous une forme qui nous sera très utile pour la suite. Appelons $\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)$ la rotation dans \mathbb{R}^3 d'angle θ autour d'un vecteur unitaire \hat{p} . Nous allons montrer que l'opérateur unitaire de rotation $U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)]$ pour un spin 1/2, est donné par

$$U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)] = \exp\left(-i\frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{p}\right) = I \cos \frac{\theta}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{p}) \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.59)$$

22. On remarque que cette matrice s'écrit en fonction de $\theta/2$, et non de θ comme dans le cas d'un photon (3.28) : le photon a un spin 1 et non 1/2 !

Pour établir la seconde identité, on remarque que $(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})^2 = 1$ d'après (3.50), et en développant l'exponentielle

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{\sigma} \cdot \hat{p}\right) = I + \frac{-i\theta}{2}\vec{\sigma} \cdot \hat{p} + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^2 I + \frac{1}{3!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^3 \vec{\sigma} \cdot \hat{p} + \dots$$

On reconnaît en facteur de I le développement de $\cos\theta/2$ et en facteur de $-i\vec{\sigma} \cdot \hat{p}$ celui de $\sin\theta/2$, ce qui montre la seconde égalité dans (3.59). Pour vérifier que l'opérateur $U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)]$ est bien l'opérateur qui effectue une rotation de θ autour de l'axe \hat{p} , prenons $\hat{p} = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$: une rotation de θ autour de cet axe amène l'axe Oz sur \hat{n} . Avec ce choix de \hat{p} , nous écrivons sous forme matricielle

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{\sigma} \cdot \hat{p}\right) = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & -e^{-i\phi}\sin\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

Cette matrice ne semble pas coïncider avec la matrice (3.58), mais la différence est absorbée dans des facteurs de phase qui ne sont pas physiquement pertinents. On peut aisément vérifier que

$$U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)]|+\rangle = e^{i\phi/2}|+\rangle, \hat{n}\rangle \quad U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)]|-\rangle = e^{-i\phi/2}|-\rangle, \hat{n}\rangle$$

ou remarquer que

$$U[\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)] = D^{(1/2)}(\theta, \phi) e^{i\phi\sigma_z/2} = D^{(1/2)}(\theta, \phi) U[\mathcal{R}_{\hat{z}}(-\phi)]$$

et qu'une rotation de ϕ autour de Oz laisse invariant l'axe Oz : dans cette opération, les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont multipliés par un facteur de phase. Il est commode de visualiser géométriquement un état de spin $|\chi\rangle$ en se donnant un vecteur unitaire, le *vecteur de Bloch* \vec{b} , dont on trouvera la généralisation au § 6.2.3, qui définit un point sur la sphère de rayon unité, la *sphère de Poincaré-Bloch*

$$\vec{b} = \langle\vec{\sigma}\rangle = \langle\chi|\vec{\sigma}|\chi\rangle$$

Ce vecteur est représenté dans la figure 3.13 dans les cas suivants

$$|\chi\rangle = |\pm\rangle \quad |\chi\rangle = |+\rangle, \hat{x}\rangle \quad |\chi\rangle = |+\rangle, \hat{n}\rangle$$

La forme (3.56) des vecteurs propres de $S_{\hat{n}}$ permet de calculer les amplitudes de probabilité

$$\begin{aligned} a(+ \rightarrow [+], \hat{n}) &= \langle+, \hat{n}|+\rangle = \cos\theta/2 e^{i\phi/2} \\ a(+ \rightarrow [-], \hat{n}) &= \langle-, \hat{n}|+\rangle = -\sin\theta/2 e^{i\phi/2} \end{aligned}$$

et les probabilités correspondantes

$$\begin{aligned} p(+ \rightarrow [+], \hat{n}) &= |\langle+, \hat{n}|+\rangle|^2 = \cos^2\theta/2 \\ p(+ \rightarrow [-], \hat{n}) &= |\langle-, \hat{n}|+\rangle|^2 = \sin^2\theta/2 \end{aligned}$$

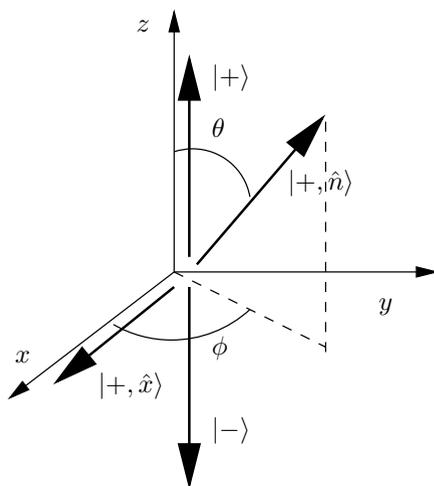


FIG. 3.13 – Représentation géométrique d'un état de spin $|\chi\rangle$. Le vecteur de Bloch $\vec{b} = \langle \vec{\sigma} \rangle$ est représenté par une flèche épaisse.

Nous avons obtenu l'essentiel des propriétés du spin 1/2, et ceci à partir des trois seules hypothèses, dont les deux premières découlent de l'invariance par rotation.

- La valeur moyenne $\langle \vec{S} \rangle$ se transforme comme un vecteur dans une rotation.
- Les valeurs propres de $\vec{S} \cdot \hat{n}$ sont indépendantes de \hat{n} .
- L'espace des états est de dimension deux.

Certaines de ces propriétés comme les relations de commutation (3.53) ou l'existence de matrices de rotation vont se transposer à un moment angulaire \vec{J} quelconque (chapitre 10). Toutefois d'autres propriétés sont spécifiques au spin 1/2 : par exemple c'est seulement dans ce cas que tout état de \mathcal{H} peut s'écrire comme un vecteur propre de $\vec{J} \cdot \hat{n} = \vec{S} \cdot \hat{n}$.

3.2.5 Dynamique et évolution temporelle

Reprenons le problème du spin plongé dans un champ magnétique uniforme et constant \vec{B} , que nous supposerons orienté suivant l'axe des z . Notre étude classique du § 3.2.1 avait mis en évidence le phénomène de la précession de Larmor. En physique classique, l'énergie est un nombre

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{s} \cdot \vec{B} = -\gamma s_z B = \omega s_z \quad (3.61)$$

où $\omega = -\gamma B$ est la fréquence de Larmor. En physique quantique, l'énergie devient un opérateur hermitien, que l'on appelle le *hamiltonien*, noté H , agissant dans l'espace des états. Comme cet espace est de dimension deux, le hamiltonien sera représenté par une matrice 2×2 . Nous *admettrons*²³ qu'en mécanique quantique le hamiltonien conserve formellement l'expression (3.61), à condition de remplacer la quantité classique s_z par l'opérateur S_z , la projection suivant Oz de l'opérateur de spin \vec{S}

$$H = \omega S_z = \frac{\omega}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

La deuxième forme de H donne sa représentation matricielle dans une base où S_z est diagonal. Les valeurs propres de H sont $+\hbar\omega/2$ et $-\hbar\omega/2$. Ce sont les deux valeurs possibles de l'énergie et les vecteurs propres correspondants sont bien sûr ceux de S_z : $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Le schéma des niveaux d'énergie est donné dans la figure 3.14 pour $\omega > 0$, et les deux niveaux sont appelés *niveaux Zeeman* d'un spin $1/2$ dans un champ \vec{B} .

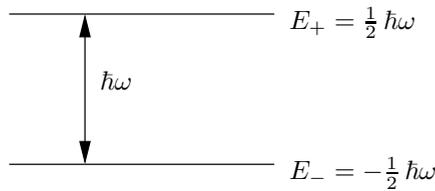


FIG. 3.14 – Spectre du hamiltonien (3.62).

Supposons qu'au temps $t = 0$ le spin se trouve dans l'état propre $|+, \hat{n}\rangle$. On peut alors se poser la question suivante : quel sera l'état de spin à un temps t ultérieur ? Pour répondre à cette question, nous avons besoin d'un postulat supplémentaire. Ce postulat, qui sera explicité avec plus de détails au chapitre suivant, stipule que le vecteur d'état $|\chi(t)\rangle$ au temps t se déduit du vecteur d'état au temps $t = 0$, $|\chi(t = 0)\rangle$, par

$$|\chi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |\chi(0)\rangle \quad (3.63)$$

Cette loi d'évolution est particulièrement simple pour les vecteurs propres de H , appelés *états stationnaires*

$$|+\rangle \rightarrow \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) |+\rangle \quad |-\rangle \rightarrow \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right) |-\rangle$$

²³. En dernier ressort, l'expression du hamiltonien trouve sa justification dans son accord avec l'expérience.

Si $|\psi\rangle$ est un état arbitraire, la probabilité de trouver un état stationnaire dans $|\psi\rangle$ est *indépendante du temps* : par exemple

$$\left| \langle \psi | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | + \rangle \right|^2 = |\langle \psi | + \rangle|^2$$

Supposons le spin orienté au temps $t = 0$ dans la direction \hat{n}

$$|\chi(0)\rangle = \cos \theta/2 \exp(-i\phi/2) | + \rangle + \sin \theta/2 \exp(i\phi/2) | - \rangle$$

ceci donnera au temps t

$$|\chi(t)\rangle = \cos \theta/2 \exp[-i(\phi + \omega t)/2] | + \rangle + \sin \theta/2 \exp[i(\phi + \omega t)/2] | - \rangle \quad (3.64)$$

Si au temps $t = 0$ le spin est orienté suivant la direction \hat{n} définie par les angles θ et ϕ : $\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \hat{n}$, au temps t le spin sera orienté dans la direction $(\theta, \phi + \omega t)$: le sens de rotation est le sens trigonométrique pour $q < 0$ et coïncide bien sûr avec celui du spin classique. La valeur moyenne du spin précesse autour de \vec{B} avec la fréquence de Larmor.

La loi d'évolution (3.64) va nous permettre d'introduire une relation entre la dispersion ΔE sur l'énergie et le temps caractéristique d'évolution d'un système quantique, qui sera donnée sous la forme générale de *l'inégalité de Heisenberg temporelle* au § 4.2.4. Récrivons (3.64) en utilisant les notations c_+ et c_- pour les composantes de $|\chi(0)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$c_+ = \cos \theta/2 \exp(-i\phi/2) \quad c_- = \sin \theta/2 \exp(i\phi/2)$$

et définissons les fréquences ω_{\pm}

$$\omega_+ = \frac{E_+}{\hbar} = +\frac{1}{2}\omega \quad \omega_- = \frac{E_-}{\hbar} = -\frac{1}{2}\omega$$

ce qui donne pour $|\chi(t)\rangle$

$$|\chi(t)\rangle = c_+ \exp(-i\omega_+ t) | + \rangle + c_- \exp(-i\omega_- t) | - \rangle$$

Calculons la probabilité de trouver le vecteur d'état $|\chi(t)\rangle$ dans un état $|\psi\rangle$ arbitraire

$$\begin{aligned} |\langle \psi | \chi(t) \rangle|^2 &= |c_+|^2 |\langle \psi | + \rangle|^2 + |c_-|^2 |\langle \psi | - \rangle|^2 \\ &+ 2\text{Re} \left[c_+^* c_- \exp[i(\omega_+ - \omega_-)t] \langle + | \psi \rangle \langle \psi | - \rangle \right] \end{aligned} \quad (3.65)$$

Les deux premiers termes de (3.65) sont indépendants du temps et le troisième oscille avec une fréquence

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{E_+ - E_-}{\hbar} = \frac{\Delta E}{\hbar}$$

ΔE est la dispersion sur l'énergie : l'énergie du système n'a pas une valeur bien définie car le système passe d'un niveau à l'autre avec un temps caractéristique $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$, ce que l'on traduit par une *relation entre dispersion sur l'énergie et temps caractéristique d'évolution*

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar \quad (3.66)$$

Cette relation, que nous démontrerons sous la forme d'une inégalité par une méthode plus générale au § 4.2.4, est un exemple d'inégalité de Heisenberg temporelle.

3.3 Exercices

3.3.1 Polarisation elliptique et détermination de la polarisation

1. La polarisation d'une onde lumineuse est décrite par deux paramètres complexes

$$\lambda = \cos \theta e^{i\delta_x} \quad \mu = \sin \theta e^{i\delta_y}$$

vérifiant $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$. De façon plus explicite, le champ électrique est

$$\begin{aligned} E_x(t) &= E_0 \cos \theta \cos(\omega t - \delta_x) = E_0 \operatorname{Re} \left(\cos \theta e^{i\delta_x} e^{-i\omega t} \right) \\ E_y(t) &= E_0 \sin \theta \cos(\omega t - \delta_y) = E_0 \operatorname{Re} \left(\sin \theta e^{i\delta_y} e^{-i\omega t} \right) \end{aligned}$$

Déterminer les axes de l'ellipse parcourue par l'extrémité du champ électrique et le sens de parcours.

2. On fait passer cette onde lumineuse à travers un Polaroid dont l'axe est parallèle à Ox . Montrer que la mesure de l'intensité à la sortie du Polaroid permet de déterminer θ .

3. On oriente maintenant le Polaroid suivant une direction faisant un angle de $\pi/4$ avec Ox . Quelle est la réduction d'intensité à la sortie du Polaroid ? Montrer que cette seconde mesure permet de déterminer la différence de phase $\delta = \delta_y - \delta_x$.

4. Vérifier que l'état $|\Phi_\perp\rangle$ (3.19) orthogonal à $|\Phi\rangle$

$$|\Phi_\perp\rangle = -\mu^* |x\rangle + \lambda^* |y\rangle$$

est arrêté par le polariseur linéaire du polariseur (λ, μ) .

5. Vérifier que les propriétés physiques du polariseur (λ, μ) sont inchangées si l'on utilise la paramétrisation générale avec λ et μ complexes

$$\lambda = \cos \theta e^{i\eta_x} \quad \mu = \sin \theta e^{i\eta_y}$$

avec $\eta = \eta_y - \eta_x$. Retrouver l'expression de \mathcal{P}_Φ .

3.3.2 Une stratégie optimale pour Ève

Supposons qu'Ève analyse la polarisation du photon envoyé par Alice à l'aide d'un analyseur orienté \uparrow . Si Alice oriente son polariseur \downarrow , la probabilité pour Ève de trouver un photon \uparrow , que l'on associera au résultat $+1$ d'une mesure, est de 100 %, mais elle est seulement de 50 % quand Alice utilise un polariseur \searrow . Sa probabilité de mesurer $+1$ quand Alice envoie aléatoirement \uparrow ou \searrow est donc

$$p = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \right) = \frac{3}{4}$$

Supposons que Ève oriente son analyseur suivant une direction faisant un angle ϕ avec Ox . Montrer que la probabilité $p(\phi)$ pour Ève de mesurer $+1$ quand Alice envoie $+1$ est maintenant

$$p(\phi) = \frac{1}{4} (2 + \cos 2\phi + \sin 2\phi)$$

Montrer que pour un choix optimal $\phi = \phi_0 = \pi/4$

$$p(\phi_0) \simeq 0.854$$

une valeur plus élevée que précédemment. Pouvait-on prévoir sans calcul que la valeur optimale était $\phi = \phi_0 = \pi/8$?

2. Supposons qu'au lieu d'utiliser une base $|\pm \pi/4\rangle$, Alice et Bob utilisent une base $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$. Montrer que la probabilité d'erreur d'Ève est maintenant

$$p = \frac{1}{2} \sin^2(2\theta) \quad 0 < \theta < \frac{\pi}{4}$$

C'est l'utilisation d'une base complémentaire de la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ qui maximise le taux d'erreur d'Ève.

3.3.3 Polarisation circulaire et opérateur de rotation pour les photons

1. Justifier les expressions suivantes pour les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ représentant des photons polarisés respectivement à droite et à gauche

$$|D\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle) \quad |G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)$$

où $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont les vecteurs d'état de photons polarisés linéairement suivant Ox et Oy . Suggestion : quel est le champ électrique d'une onde lumineuse polarisée circulairement ? Écrire la forme matricielle des projecteurs \mathcal{P}_D et \mathcal{P}_G sur les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ dans la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$.

2. On définit les états $|\theta\rangle$ et $|\theta_\perp\rangle$ (3.11) représentant des photons polarisés linéairement suivant les directions faisant un angle θ avec respectivement Ox et Oy ainsi que

$$|D'\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta\rangle + i|\theta_\perp\rangle) \quad |G'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta\rangle - i|\theta_\perp\rangle)$$

Comment $|D'\rangle$ et $|G'\rangle$ sont-ils reliés à $|D\rangle$ et $|G\rangle$? Ces vecteurs d'état représentent-ils des états physiques différents de $|D\rangle$ et $|G\rangle$, et sinon pourquoi ?

3. On construit l'opérateur hermitien

$$\Sigma = \mathcal{P}_D - \mathcal{P}_G$$

Quelle est l'action de Σ sur les vecteurs $|D\rangle$ et $|G\rangle$? En déduire l'action de $\exp(-i\theta\Sigma)$ sur ces vecteurs.

4. Écrire la matrice représentative de Σ dans la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$. Montrer que $\Sigma^2 = I$ et retrouver $\exp(-i\theta\Sigma)$. En comparant avec la question 2, donner l'interprétation physique de l'opérateur $\exp(-i\theta\Sigma)$.

3.3.4 Autres solutions de (3.45)

Dans l'espace des états de spin 1/2, la matrice unitaire $D^{(1/2)}(\theta, \psi)$ transforme l'état $|+\rangle$ en l'état $|+, \hat{n}\rangle$ où le vecteur unitaire \hat{n} est donné par $\hat{n} = (\sin\theta \cos\psi, \sin\theta \sin\psi, \cos\theta)$. Si la rotation s'effectue autour de l'axe des z , alors $\theta = 0$ dans (3.58) et

$$D^{(1/2)}(\theta = 0, \psi) = U = \begin{pmatrix} e^{-i\psi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\psi/2} \end{pmatrix}$$

Discuter l'action de U sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

2. L'opérateur U peut-être considéré comme un changement de base, où un opérateur A se transforme suivant (2.18) en

$$A \rightarrow A' = U^\dagger A U$$

Quels sont les opérateurs transformés de σ_x , σ_y et σ_z ?

3. Les conditions (3.45) ont pour solution soit (1) $\alpha - \alpha_x = \phi$ soit (2) $\alpha - \alpha_x = -\phi$. Montrer que, dans le cas (1), σ_x et σ_y sont donnés par

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_x} \\ e^{-i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i e^{-i\alpha_x} \\ i e^{-i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix}$$

et que, par rapport à la solution standard (3.47), cette solution correspond à une simple rotation des axes autour de Oz .

4. Montrer que si l'on choisit $\alpha - \alpha_x = -\phi$ la solution standard est

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Quelle est l'interprétation de ce résultat?

3.3.5 Décomposition d'une matrice 2×2

1. On introduit la notation :

$$\hat{\sigma}_0 = I \quad \hat{\sigma}_i = \sigma_i, \quad i = 1, 2, 3$$

Montrer que si une matrice 2×2 A vérifie $\text{Tr}(\hat{\sigma}_i A) = 0 \quad \forall i = 0, \dots, 3$, alors $A = 0$.

2. Soit la matrice 2×2

$$A = \lambda_0 I + \sum_{i=1}^3 \lambda_i \sigma_i = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

Montrer que

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(A\hat{\sigma}_i)$$

En déduire qu'une matrice 2×2 quelconque peut toujours s'écrire

$$A = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

À quelle condition doivent obéir les coefficients λ_i lorsque A est hermitien, $A = A^\dagger$?

3.3.6 Exponentielles de matrices de Pauli

1. Montrer que toute matrice 2×2 unitaire et de déterminant unité U peut se mettre sous la forme (3.59). Suggestion : montrer que U est de la forme

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

et écrire $a = a_1 + ia_2$, $b = b_1 + ib_2$. Montrer que $a_1 = \cos \theta/2$.

2. Trouver deux matrices 2×2 A et B telles que

$$e^A e^B = e^{(A+B)} \quad \text{avec} \quad [A, B] \neq 0$$

3.3.7 Tenseur ε_{ijk}

1. Montrer l'identité

$$\sum_k \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmk} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$$

En déduire

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c}$$

Que vaut

$$\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ljk} ?$$

2. On peut écrire la composante i du rotationnel d'un vecteur \vec{A} comme

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

avec $\partial_j = \partial/\partial x_j$. Montrer à partir de l'identité de la question 1 que

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$$

3.3.8 Rotation de 2π d'un spin 1/2

On reprend l'interféromètre à neutrons de l'exercice 1.6.6, le plan $ABDC$ étant horizontal. Un déphasage variable δ est obtenu en faisant passer les neutrons du faisceau I dans un champ magnétique uniforme et constant B sur une longueur l , le champ magnétique étant perpendiculaire au plan de la figure 3.15. Les neutrons sont supposés polarisés parallèlement au plan de la figure 3.15. Déterminer l'angle de la rotation subie par le spin du neutron à la sortie du champ magnétique en fonction de l , de la vitesse v (connue) du neutron et de son facteur gyromagnétique γ_n . Montrer que les taux de comptage par les détecteurs D_1 et D_2 dépendent sinusoidalement de B . Montrer que l'on peut déduire de ces oscillations que le vecteur d'état de spin est multiplié par -1 dans une rotation de 2π (Werner *et al.* [1975]).

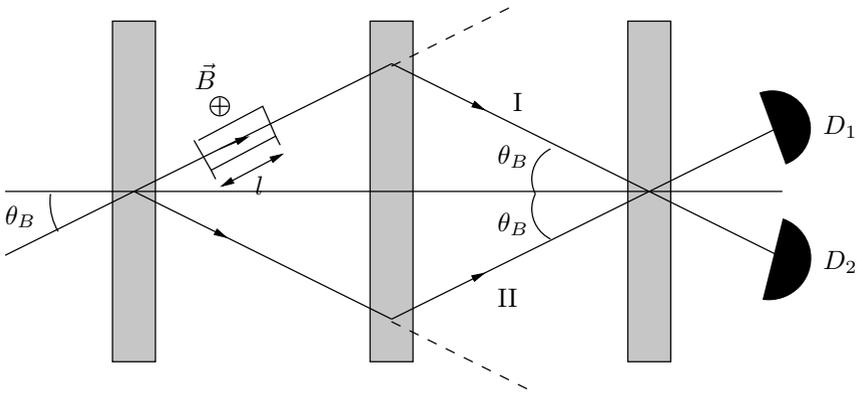


FIG. 3.15 – Mise en évidence expérimentale de la rotation de 2π d'un spin $1/2$.

3.3.9 Diffusion de neutrons par un cristal : noyaux de spin $1/2$

On reprend l'expérience décrite dans l'exercice 1.6.6 de diffraction de neutrons par un cristal en supposant que les noyaux atomiques ont un spin $1/2$ (exemples : H^1 , C^{13} , F^{19} , etc.). On se limitera dans un premier temps (questions **1** et **2**) au cas où les neutrons ont un spin up (\uparrow) et les noyaux un spin down (\downarrow) : les neutrons et les noyaux sont polarisés. Dans ces conditions il y a deux amplitudes de diffusion possibles car on peut montrer (§ 13.2.4) que la composante z du spin total est conservée dans la diffusion neutron-noyau. Ces deux amplitudes sont

- Une amplitude f_a où la diffusion se fait sans changement de l'état de spin
neutron \uparrow + noyau $\downarrow \rightarrow$ neutron \uparrow + noyau \downarrow
- Une amplitude f_b où la diffusion s'effectue avec renversement du spin (spin flip)
neutron \uparrow + noyau $\downarrow \rightarrow$ neutron \downarrow + noyau \uparrow

1. Montrer que dans le premier cas on retrouve les résultats de la diffusion sans spin.
2. Montrer que dans le second cas la diffraction disparaît et que la probabilité de diffusion est indépendante de \vec{q} .
3. En général les noyaux atomiques ne sont pas polarisés, c'est-à-dire qu'ils ont une chance sur deux d'avoir spin up et une chance sur deux d'avoir spin down. On doit prendre en considération une troisième amplitude f_c correspondant à la diffusion

$$\text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \uparrow \rightarrow \text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \uparrow$$

Suivant la méthode utilisée dans l'exercice 1.6.6, introduisons un nombre α_i qui prend la valeur 0 si le noyau i a un spin up et la valeur 1 si ce noyau a un spin down. L'ensemble des $\{\alpha_i\}$ caractérise une configuration des spins dans le cristal. Montrer que l'amplitude de diffusion d'un neutron par le cristal dans la configuration $\{\alpha_i\}$ est

$$\sum_i (\alpha_i f_a + (1 - \alpha_i) f_c) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} + \sum_i \alpha_i f_b e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$

Que vaudrait l'intensité si la configuration $\{\alpha_i\}$ était fixée ? On prendra garde à additionner les probabilités pour des états finaux différents. On doit enfin prendre la moyenne sur les différentes configurations du cristal, le spin de chaque noyau étant supposé indépendant des autres spins. Si $\langle \bullet \rangle$ désigne la moyenne sur les configurations, montrer que

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \delta_{ij}$$

En déduire que la probabilité de diffusion est proportionnelle à

$$\mathcal{I} = \frac{1}{4} (f_a + f_c)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{\mathcal{N}}{4} [(f_a - f_c)^2 + 2f_b^2]$$

où \mathcal{N} est le nombre de noyaux. En réalité les trois amplitudes f_a , f_b et f_c ne sont pas indépendantes : on montre dans l'exercice 13.5.5 que

$$-f_a = \frac{1}{2} (a_t + a_s) \quad -f_b = \frac{1}{2} (a_t - a_s) \quad -f_c = a_t$$

où a_t et a_s sont les longueurs de diffusion dans les états triplet et singulet.

4. Que se passe-t-il si, comme c'est le cas courant en pratique, les neutrons ne sont pas polarisés ?

3.4 Bibliographie

La polarisation de la lumière et sa propagation dans les milieux anisotropes sont expliquées en détail dans May et Cazabat [1996], chapitres 19 et 20 ou Hecht [1987], chapitre 8. Comme complément à la discussion de la polarisation des photons, on pourra consulter Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 4 ou Baym [1969], chapitre 1. Un article de revue récent sur la cryptographie quantique, avec de nombreuses références aux travaux antérieurs, est celui de Gisin *et al.* [2002] ; une version grand public de la cryptographie quantique se trouve dans Bennett *et al.* [1992]. L'expérience de Stern-Gerlach est discutée par Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 5, par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre IV, ou par Peres [1993], chapitre 1.

Chapitre 4

Postulats de la physique quantique

NOUS ALLONS ÉNONCER DANS CE CHAPITRE les postulats de base de la physique quantique, en généralisant les résultats établis au chapitre précédent dans deux cas particuliers : la polarisation du photon et le spin $1/2$. Au lieu d'être de dimension deux, l'espace des états sera *a priori* de dimension quelconque N , voire de dimension infinie. Les postulats tels qu'ils sont énoncés dans ce chapitre *fixent le cadre conceptuel général de la mécanique quantique*, et ne donnent pas directement les outils nécessaires pour résoudre des problèmes spécifiques. La résolution d'un problème de physique concret *suppose toujours une phase de modélisation*, où l'on simplifie le système à étudier, où l'on définit un cadre d'approximations, etc., et cette phase de modélisation s'appuie inévitablement sur des considérations plus ou moins heuristiques qui ne peuvent pas se déduire du cadre général de la physique quantique¹. Le § 3.2.5 donne un exemple d'une telle démarche heuristique, conduisant à la solution d'un problème concret, celui du mouvement d'un spin $1/2$ dans un champ magnétique.

Il est possible d'utiliser d'autres ensembles de postulats : par exemple une autre approche de la mécanique quantique consiste à énoncer des postulats sur les intégrales de chemin (chapitre 12). Comme c'est souvent le cas, une même théorie physique peut revêtir plusieurs habillages mathématiques différents. Enfin il faut souligner que les postulats de la physique quantique soulèvent des problèmes épistémologiques difficiles, qui sont encore largement débattus aujourd'hui ; un exemple de ces problèmes sera évoqué à la section 6.4.

1. Cette démarche n'est pas fondamentalement différente de celle utilisée en physique classique. Par exemple les trois lois de Newton fixent le cadre conceptuel de la mécanique classique, mais la solution d'un problème concret requiert toujours une phase de modélisation : simplification du problème posé, approximations pour les forces, etc.

4.1 Vecteurs d'état et propriétés physiques

4.1.1 Principe de superposition

Nous avons appris au chapitre 3 à caractériser l'état de polarisation d'un photon ou celui d'un spin 1/2 par un vecteur appartenant à un espace de Hilbert complexe, l'espace des états. Le postulat **I** généralise les notions de vecteur d'état et d'espace des états à tout système quantique.

Postulat I : espace des états

Les propriétés d'un système quantique sont entièrement définies par la donnée de son *vecteur d'état* $|\varphi\rangle$, qui fixe la représentation mathématique de l'état physique du système². Le vecteur d'état est un élément d'un espace de Hilbert complexe \mathcal{H} appelé *espace des états*. Il sera commode de choisir $|\varphi\rangle$ unitaire, c'est-à-dire de norme un : $\|\varphi\|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle = 1$.

Le fait qu'un état physique soit représenté par un vecteur implique sous certaines conditions le *principe de superposition*, caractéristique de la *linéarité* de la théorie : si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont des vecteurs de \mathcal{H} représentant des états physiques, alors le vecteur unitaire de \mathcal{H}

$$|\psi\rangle = \frac{\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle}{\|\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle\|} \quad (4.1)$$

où λ et μ sont des nombres complexes représente aussi un état physique.

Au chapitre précédent, nous avons défini les amplitudes de probabilité comme produits scalaires de vecteurs appartenant à l'espace des états. Par exemple, si $|\varphi\rangle$ représente l'état de polarisation linéaire suivant Ox d'un photon : $|\varphi\rangle = |x\rangle$, et $|\theta\rangle$ un état de polarisation linéaire suivant \hat{n}_θ (3.3) : $|\chi\rangle = |\theta\rangle$, l'amplitude de probabilité $a(x \rightarrow \theta) = \langle\theta|x\rangle = \cos\theta$. Nous avons également montré que le module carré de cette amplitude possède une interprétation physique remarquable : si l'on teste la polarisation en faisant passer le photon $|x\rangle$ à travers un analyseur linéaire d'orientation \hat{n}_θ , on obtient une probabilité de transmission

$$p(x \rightarrow \theta) = |a(x \rightarrow \theta)|^2 = |\langle\theta|x\rangle|^2 = \cos^2\theta$$

qui est la *probabilité pour le photon dans l'état $|x\rangle$ de passer le test $|\theta\rangle$* . Nous allons généraliser les notions d'amplitude de probabilité et de test en énonçant le postulat **II**.

2. Le point de vue de l'auteur est que le vecteur d'état décrit un système quantique *individuel*. Ce point de vue est loin d'être universellement partagé et le lecteur trouvera aisément d'autres interprétations, par exemple « le vecteur d'état décrit l'information disponible sur un système quantique », ou « le vecteur d'état n'est pas la propriété d'un système physique individuel, mais un protocole pour préparer un ensemble de tels états » ou encore « la mécanique quantique est un ensemble de règles permettant de calculer la probabilité d'un résultat expérimental ». Cette diversité de points de vue n'a pas de conséquences sur l'utilisation *pratique* de la mécanique quantique.

Postulat II : amplitudes de probabilité et probabilités

Si $|\varphi\rangle$ est le vecteur représentant l'état du système et si $|\chi\rangle$ représente un autre état physique, il existe une *amplitude de probabilité* $a(\varphi \rightarrow \chi)$ de trouver $|\varphi\rangle$ dans l'état $|\chi\rangle$, qui est donnée par un produit scalaire sur \mathcal{H} : $a(\varphi \rightarrow \chi) = \langle \chi | \varphi \rangle$. La probabilité $p(\varphi \rightarrow \chi)$ pour l'état $|\varphi\rangle$ de passer le test $|\chi\rangle$ s'obtient en prenant le module carré $|\langle \chi | \varphi \rangle|^2$ de cette amplitude³

$$\boxed{p(\varphi \rightarrow \chi) = |a(\varphi \rightarrow \chi)|^2 = |\langle \chi | \varphi \rangle|^2} \quad (4.2)$$

Ajoutons quelques remarques pour compléter l'énoncé des deux premiers postulats.

- Sauf mention explicite du contraire, nous supposons les vecteurs d'état de norme unité. Si ce n'est pas le cas, il faut prendre garde à diviser par les normes. Par exemple l'équation (4.2) devient

$$p(\varphi \rightarrow \chi) = \frac{|\langle \chi | \varphi \rangle|^2}{\|\chi\|^2 \|\varphi\|^2}$$

- Les vecteurs $|\varphi\rangle$ et $|\varphi'\rangle = \exp(i\beta)|\varphi\rangle$ représentent le même état physique. En effet on sait seulement mesurer des probabilités, et

$$|\langle \chi | \varphi \rangle|^2 = |\langle \chi | \varphi' \rangle|^2 \quad \forall |\chi\rangle \in \mathcal{H}$$

Il n'est donc pas possible de distinguer entre $|\varphi\rangle$ et $|\varphi'\rangle$, qui diffèrent par un *facteur de phase*. En toute rigueur, un état physique est représenté par un *rayon*, ou vecteur à un facteur de phase près, de l'espace de Hilbert. L'ensemble des rayons forme un *espace de Hilbert projectif* : dans le cas du spin 1/2, cet espace peut être identifié à la sphère de Poincaré-Bloch. En revanche la superposition $\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle$ représente un état physique *différent* de $\lambda|\varphi'\rangle + \mu|\chi\rangle$! Décider entre les phases qui sont physiquement pertinentes et celles qui ne le sont pas peut être un exercice délicat, comme le montre la phase de Berry (section 12.6).

- Nous nous limitons aux systèmes physiques qui sont appelés *cas purs*, ceux où l'information sur l'état physique est maximale. Dans le cas d'une information incomplète, on doit avoir recours au formalisme de l'opérateur statistique, qui sera exposé dans la section 6.2.
- Nous avons bien pris soin de préciser « système quantique », et non « particule » (quantique), qui en est un cas particulier. En effet, nous

3. Afin que l'ordre des facteurs corresponde à celui du produit scalaire, il est parfois commode de noter les amplitudes de probabilité $a(\chi \leftarrow \varphi)$ et les probabilités $p(\chi \leftarrow \varphi)$. On peut aussi observer qu'à défaut d'être intuitive, l'équation (4.2) est au moins cohérente : la probabilité de trouver l'état en lui-même est un et d'après l'inégalité de Schwarz, $0 \leq |\langle \chi | \varphi \rangle|^2 \leq 1$.

verrons au chapitre 6 que pour un système de deux ou plusieurs particules, il est en général impossible d'attribuer un vecteur d'état individuel à chacune des particules, et c'est seulement à l'ensemble des particules, c'est-à-dire à l'ensemble du système quantique, que l'on peut attribuer un vecteur d'état. Ce point sera développé et illustré dans la section 6.3.

- Il existe des restrictions au principe de superposition, appelées « règles de supersélection »⁴, que nous n'aurons pas à prendre en compte dans ce livre.

4.1.2 Propriétés physiques et mesure

Au chapitre 3 nous avons montré qu'à la propriété physique « composante du spin suivant un axe \hat{n} » on pouvait faire correspondre un opérateur hermitien $\vec{S} \cdot \hat{n}$ agissant dans l'espace des états. Le postulat **III** généralise ce résultat à toute propriété physique.

Postulat III : propriétés physiques et opérateurs

À toute propriété physique \mathcal{A} (énergie, position, impulsion, moment angulaire...) est associé un opérateur hermitien A agissant dans l'espace des états \mathcal{H} : A fixe la représentation mathématique de \mathcal{A} .

Afin de simplifier dans un premier temps la discussion qui va suivre, examinons le cas d'une propriété physique \mathcal{A} représentée par un opérateur hermitien A dont les valeurs propres a_n sont non dégénérées : $A|n\rangle = a_n|n\rangle$. On peut alors écrire la décomposition spectrale

$$A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n|$$

Si le système quantique est dans un état $|\varphi\rangle \equiv |n\rangle$, la valeur de l'opérateur A dans cet état est a_n : la propriété physique \mathcal{A} prend la valeur numérique exacte a_n . Si $|\varphi\rangle$ n'est pas état (ou vecteur) propre de A , on sait d'après **II** que la probabilité $\mathbf{p}_n \equiv \mathbf{p}(a_n)$ de trouver $|\varphi\rangle$ dans $|n\rangle$, et donc de mesurer la valeur a_n de \mathcal{A} , est $\mathbf{p}_n = |\langle n|\varphi\rangle|^2$. Pour déterminer si le système quantique est dans l'état $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$, on peut imaginer une généralisation de l'expérience de Stern-Gerlach avec N voies de sortie au lieu des deux voies $|+\rangle$ et $|-\rangle$ et un détecteur associé à chaque voie. Effectuons une série de tests sur des systèmes

4. Il est généralement admis que l'on ne peut pas superposer un état de spin $1/2$ $|\chi\rangle_{1/2}$ et un état de spin 1 $|\varphi\rangle_1$: cette impossibilité est un exemple de règle de supersélection. Comme nous l'avons vu au chapitre 3 (et cette observation sera généralisée au chapitre 10), le vecteur d'état d'une particule de spin $1/2$ est multiplié par -1 dans une rotation de 2π , tandis que celui d'une particule de spin 1 est multiplié par $+1$. Dans une rotation de 2π qui ramène le système à sa situation initiale, si le vecteur d'état est de la forme $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle_1 + \mu|\chi\rangle_{1/2}$, ce vecteur d'état est transformé dans une rotation de 2π en $|\psi'\rangle = \lambda|\varphi\rangle_1 - \mu|\chi\rangle_{1/2} \neq |\psi\rangle$. Le fait que $|\chi\rangle_{1/2}$ soit transformé en $-|\chi\rangle_{1/2}$ ne pose aucun problème, car les deux vecteurs ne diffèrent que par un facteur de phase. Un autre exemple est la règle de supersélection sur la masse, dans le cas de l'invariance galiléenne. Pour un point de vue critique sur les règles de supersélection, voir Weinberg [1995], chapitre 2.

quantiques qui se trouvent tous dans l'état $|\varphi\rangle$. On dit que ces systèmes ont été *préparés dans l'état $|\varphi\rangle$* : nous avons déjà rencontré la notion de préparation d'un système quantique dans le cas de la polarisation des photons, et nous y reviendrons ultérieurement. Si le nombre de tests \mathcal{N} est très grand, on peut en déduire expérimentalement la *valeur moyenne de la propriété physique \mathcal{A} dans l'état $|\varphi\rangle$* , notée $\langle A \rangle_\varphi$

$$\langle A \rangle_\varphi = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{p=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{A}_p \quad (4.3)$$

où \mathcal{A}_p est le résultat de la mesure $n^\circ p$. \mathcal{A}_p varie d'un test à l'autre, mais est toujours égal à l'une des valeurs propres a_n . Cette valeur moyenne est donnée en fonction de A et $|\varphi\rangle$ par

$$\langle A \rangle_\varphi = \sum_n \mathbf{p}_n a_n = \sum_n \langle \varphi | n \rangle a_n \langle n | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$$

Nous avons déjà rencontré un cas particulier de cette relation dans (3.38). Il n'est pas difficile de généraliser au cas des valeurs propres dégénérées. Si le système est dans un état $|\varphi\rangle$ quelconque, nous pouvons décomposer $|\varphi\rangle$ sur la base des vecteurs propres de A en utilisant la relation de fermeture (2.30)

$$|\varphi\rangle = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r | \varphi \rangle = \sum_{n,r} c_{nr} |n, r\rangle$$

Pour trouver la probabilité $\mathbf{p}(a_n)$ d'observer la valeur propre a_n , il faut maintenant sommer sur l'indice r à n fixé toutes les probabilités de trouver $|\varphi\rangle$ dans l'un quelconque des états $|n, r\rangle$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(a_n) &= \sum_r |c_{nr}|^2 = \sum_r \langle \varphi | n, r \rangle \langle n, r | \varphi \rangle \\ &= \langle \varphi | \mathcal{P}_n | \varphi \rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

où \mathcal{P}_n est le projecteur sur le sous-espace de la valeur propre a_n (cf. (2.29))

$$\mathcal{P}_n = \sum_r |n, r\rangle \langle n, r| \quad (4.5)$$

Comme ci-dessus, la répétition d'un grand nombre de mesures sur des systèmes quantiques préparés dans des conditions identiques permet d'obtenir la valeur moyenne $\langle A \rangle_\varphi$ de \mathcal{A} dans l'état $|\varphi\rangle$

$$\langle A \rangle_\varphi = \sum_n a_n \mathbf{p}(a_n) = \sum_{n,r} \langle \varphi | n, r \rangle a_n \langle n, r | \varphi \rangle$$

soit en utilisant (2.31)

$$\boxed{\langle A \rangle_\varphi = \langle \varphi | A | \varphi \rangle} \quad (4.6)$$

ce qui généralise le résultat précédent. Les opérateurs représentant des propriétés physiques sont souvent appelés « observables » dans la littérature. Nous éviterons cette terminologie qui n'a pas de véritable intérêt⁵.

L'opérateur hermitien le plus simple est le projecteur sur un vecteur de \mathcal{H} , et faire passer un test $|\chi\rangle$ à un système quantique est équivalent à mesurer le projecteur $\mathcal{P}_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|$: \mathcal{P}_χ prend la valeur un si le système passe le test $|\chi\rangle$ et zéro s'il échoue. Compte tenu de la décomposition spectrale d'un opérateur hermitien comme somme de projecteurs, on voit que *les notions de test et de mesure d'une propriété physique sont étroitement liées*. On mettra plutôt l'accent sur l'aspect « mesure » si l'on est intéressé par la valeur propre⁶ de A , et plutôt sur l'aspect « test » si l'on est intéressé par la probabilité de trouver le système dans un état propre de A . Illustrons-le sur l'expérience de Stern-Gerlach du § 3.2.2. Dans l'interprétation « mesure du spin », l'appareil de Stern-Gerlach mesure la composante z du spin en déviant les atomes d'argent vers le haut ou vers le bas, et la détection de l'atome sur un écran à la sortie de l'appareil permet de distinguer entre les valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$ de la propriété physique \mathcal{S}_z , composante du spin suivant l'axe Oz . On peut, de façon équivalente, dire que l'on fait passer aux atomes les tests $|+\rangle$ et $|-\rangle$. La probabilité de déviation vers le haut (resp. bas) est $|\langle +|\varphi\rangle|^2$ (resp. $|\langle -|\varphi\rangle|^2$).

Cependant les mesures, ou les tests, décrits au § 3.2.2 présentent un inconvénient : la mesure n'est achevée que lorsque les atomes sont absorbés sur l'écran et ils ne sont plus disponibles pour des expériences ultérieures. Dans une *mesure idéale (ou test idéal)*, on suppose que le système physique n'est pas détruit par la mesure⁷, et de plus que, si avant la mesure de \mathcal{A} le vecteur d'état était $|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, le système après une mesure donnant le résultat a_n doit être dans l'état $|\varphi_n\rangle$. On pourrait imaginer une mesure idéale⁸ (tout à fait théorique !) du spin grâce à un filtre de Stern-Gerlach modifié s'inspirant du dispositif décrit au § 1.4.4. Prenant comme base de départ le filtre de la figure 3.9, on illumine l'atome entrant dans le filtre par un faisceau laser convenablement accordé qui induit une transition dans un niveau excité de l'atome. Lorsqu'elles ont leur séparation maximale à l'intérieur du filtre, les deux trajectoires passent dans deux cavités résonantes distinctes où l'atome

5. Cette terminologie remonte à l'article fondateur de Heisenberg, dont est extraite la citation suivante : « Cet article a pour objet d'établir que la théorie quantique est fondée exclusivement sur des relations entre quantités qui sont en principe observables ». Se restreindre à une telle approche est une vision étroite de la physique, que Heisenberg lui-même n'a pas respectée dans sa pratique !

6. On peut donner une formulation « mesure » au test de polarisation d'un photon, par exemple dans la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$, en introduisant la propriété physique \mathcal{A}_x représentée par l'opérateur

$$A_x = |x\rangle\langle x| - |y\rangle\langle y|$$

qui prend la valeur $+1$ si le photon est polarisé suivant Ox et -1 s'il est polarisé suivant Oy .

7. Si l'on peut répéter plusieurs fois une même mesure idéale, on a alors une « mesure quantique sans démolition » ou mesure QND (*Quantum Non Demolition*). Voir par exemple Caves *et al.* [1980] ou Braginsky *et al.* [1980].

8. Une autre expérience théorique a été proposée par Scully *et al.* [1989].

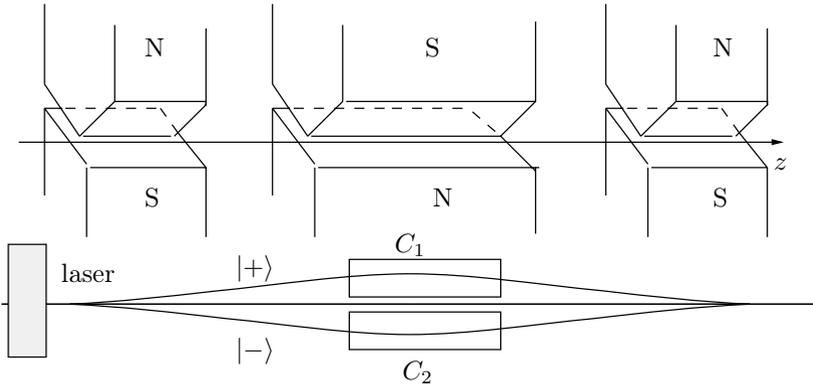


FIG. 4.1 – Mesure idéale du spin.

revient dans son état fondamental en émettant un photon avec une probabilité voisine de 100 % (figure 4.1). Ce photon est détecté dans l'une des deux cavités, et il est ainsi possible d'étiqueter la trajectoire à l'intérieur du filtre, *sans perturber en quoi que ce soit l'état de spin*. Cette mesure entraîne une profonde modification dans la description de l'état de spin. Si par exemple l'état du spin à l'entrée du filtre est l'état propre $|+, \hat{x}\rangle$ de S_x , *en l'absence de mesure*, les deux trajectoires conservent la propriété de cohérence. Elles peuvent être recombinées à la sortie du filtre pour reconstruire l'état $|+, \hat{x}\rangle$: le filtre contient une superposition *cohérente* d'états propres de S_z , $|+\rangle$ et $|-\rangle$, avec une amplitude $1/\sqrt{2}$

$$|+, \hat{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

Au contraire, lorsqu'une mesure est effectuée, le spin est projeté sur l'un des états $|+\rangle$ ou $|-\rangle$ avec une probabilité de 50 %, et il est impossible de revenir en arrière et de reconstruire l'état $|+, \hat{x}\rangle$. Si l'on n'observe pas le résultat de la mesure, on peut interpréter celle-ci comme transformant la superposition cohérente $|+, \hat{x}\rangle$ en un *ensemble statistique classique* de 50 % de spins up et 50 % de spins down.

Si la mesure de S_z a donné le résultat $+\hbar/2$ et si on répète cette mesure, on constate que le résultat est toujours $+\hbar/2$: immédiatement après une mesure de S_z qui a donné le résultat $+\hbar/2$, le spin est dans l'état $|+\rangle$. Cette observation pose la question de deux mesures idéales consécutives. L'analyse de cette situation requiert un formalisme qui sera établi au chapitre 6, et elle sera effectuée au § 6.4.5. Le résultat de cette analyse est le suivant : tout se passe comme si à l'issue d'une première mesure, lorsqu'un système initialement dans l'état $|\varphi\rangle$ a passé avec succès le test $|\chi\rangle$, le système était projeté après

le test dans l'état $|\chi\rangle$

$$|\varphi\rangle \rightarrow \frac{\mathcal{P}_\chi|\varphi\rangle}{\|\mathcal{P}_\chi|\varphi\rangle\|}$$

où le dénominateur sert à normaliser l'état. Ce résultat est présenté dans la plupart des manuels comme un postulat supplémentaire de la mécanique quantique, le « postulat de réduction du paquet d'ondes » (RPO), énoncé sous la forme

Postulat RPO. Si le système était initialement dans l'état $|\varphi\rangle$, et si le résultat de la mesure de \mathcal{A} est a_n , alors immédiatement après la mesure le système se trouve dans l'état projeté sur le sous-espace de la valeur propre a_n

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \frac{\mathcal{P}_n|\varphi\rangle}{(\langle\varphi|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle)^{1/2}} \quad (4.7)$$

Le vecteur $|\psi\rangle$ dans (4.7) est bien normalisé à l'unité car

$$\|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|\mathcal{P}_n^\dagger\mathcal{P}_n|\varphi\rangle = \langle\varphi|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle$$

compte tenu des propriétés des projecteurs. L'énoncé de ce pseudo-postulat appelle quelques remarques. Il ne faut surtout pas imaginer que la transformation (4.7) correspond à un processus physique réel. Elle n'a de sens que si l'on s'intéresse à une évolution effective, qui fait abstraction de l'appareil de mesure pour se focaliser uniquement sur le système. En fait, c'est une simple commodité d'écriture dans l'espace de Hilbert des états du système, qui isole artificiellement le système de l'appareil de mesure et de son environnement. De plus (*cf.* § 6.4.5), elle n'est valable que pour une mesure idéale⁹.

Nous avons donné ci-dessus un exemple de mesure idéale pour le spin d'un atome d'argent (figure 4.1). À la sortie du filtre, on sait dans quel état de spin se trouve l'atome qui est maintenant disponible pour des tests ultérieurs. Une répétition de la mesure de \mathcal{S}_z redonnera $+\hbar/2$ pour les atomes qui ont émis un photon dans C_1 et $-\hbar/2$ pour ceux qui ont émis un photon dans C_2 . Il faut remarquer que la mesure idéale se présente rarement en pratique. En général la détection détruit le système observé : un exemple déjà mentionné de mesure destructrice¹⁰ est la détection d'un photon par un photomultiplicateur D_x ou D_y dans la figure 3.2. Un autre exemple de mesure non idéale est la détermination de l'impulsion d'une particule par collision élastique avec une

9. Il aurait peut-être été préférable de passer purement et simplement sous silence ce « postulat RPO ». Nous l'avons énoncé afin que le lecteur puisse faire le lien avec les exposés traditionnels. En fait, ce postulat est indissociable du statut ontologique du vecteur d'état. Par exemple, dans l'interprétation statistique de Ballentine [1998], chapitre 9, le formalisme de la mécanique quantique ne s'applique qu'à des ensembles de systèmes préparés de façon identique, et non à des systèmes individuels, contrairement à ce que nous avons admis (voir la note 2). Il est clair que ce postulat n'a simplement aucun sens dans l'interprétation statistique. Pour une analyse critique de la « réduction du paquet d'ondes », voir Ballentine [1990] ou Cohen-Tannoudji [1990].

10. On sait maintenant effectuer des mesures non destructrices sur un photon : voir Nogues *al.* [1999].

seconde particule d'impulsion connue, en utilisant la conservation de l'énergie-impulsion. Après la collision, la première particule n'est pas détruite, mais elle ne se trouve plus dans l'état d'impulsion que l'on a mesurée. Le concept de mesure idéale est utile pour la discussion de la mesure en physique quantique, mais en pratique la mesure idéale est l'exception, et non la règle!

Lorsque l'on cherche à déterminer complètement le vecteur d'état $|\varphi\rangle$ d'un système physique, il peut arriver que la mesure idéale d'une propriété physique \mathcal{A} donne le résultat a , la valeur propre a de A étant non dégénérée. Immédiatement après la mesure, le vecteur d'état est alors le vecteur propre $|a\rangle$ de A . Si la valeur propre est dégénérée, il faut trouver une seconde propriété physique \mathcal{B} compatible avec \mathcal{A} : $[A, B] = 0$. Dans ce cas il est possible que la donnée des valeurs propres a et b spécifie entièrement le vecteur d'état. Si ce n'est pas encore le cas, il faudra trouver une troisième propriété physique \mathcal{C} compatible avec \mathcal{A} et \mathcal{B} etc. Lorsque la donnée des valeurs propres $\{a, b, c, \dots\}$ des opérateurs compatibles $\{A, B, C, \dots\}$ spécifie entièrement le vecteur d'état on dira, en suivant la terminologie introduite au § 2.3.3, que ces opérateurs (ou les propriétés physiques qu'ils représentent) forment un *système complet d'opérateurs (ou de propriétés physiques) compatibles*. La mesure simultanée d'un système complet de propriétés physiques compatibles $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots\}$ constitue un *test maximal* du vecteur d'état. Si l'espace des états est de dimension N , un *test maximal doit avoir N résultats différents possibles*. Lorsque l'on a réalisé un test maximal sur un système quantique, on connaît exactement son vecteur d'état, et on a donc *préparé* le système quantique dans un état déterminé : on a effectué l'étape de préparation du système. Cependant, la préparation n'implique pas nécessairement une mesure : par exemple le filtre de gauche de la figure 3.10 prépare le spin 1/2 dans l'état $|+\rangle$ en éliminant tous les spins qui se trouvent dans $|-\rangle$, sans qu'une mesure du spin ne soit effectuée.

Pour fixer les idées, supposons que la donnée de deux valeurs propres a_r et b_s de deux opérateurs compatibles A et B spécifie entièrement un vecteur $|r, s\rangle$ de \mathcal{H}

$$A|r, s\rangle = a_r|r, s\rangle \quad B|r, s\rangle = b_s|r, s\rangle$$

La mesure simultanée des propriétés physiques \mathcal{A} et \mathcal{B} est alors un test maximal et les N résultats possibles sont étiquetés par le couple (r, s) . Un exemple d'appareil effectuant un test maximal est l'appareil de Stern-Gerlach de la figure 3.8 : cet appareil sépare les états de spin $|+\rangle$ et $|-\rangle$, qui donnent deux taches différentes sur l'écran, l'espace des états étant de dimension 2 : $N = 2$. La mesure de \mathcal{A} et \mathcal{B} permet de préparer le système dans l'état $|r, s\rangle$, en sélectionnant les systèmes qui ont donné le résultat (a_r, b_s) . Si les systèmes quantiques sélectionnés dans l'état $|r, s\rangle$ sont à nouveau soumis à une mesure simultanée de \mathcal{A} et \mathcal{B} , le résultat de cette nouvelle mesure sera (a_r, b_s) avec une probabilité de 100 %. Lorsqu'un système physique est décrit par un vecteur d'état, il doit exister, au moins en principe, un test maximal dont un des résultats possibles a une probabilité de 100 % : pour un spin 1/2 dans l'état

$|+\rangle$), un tel test maximal est celui effectué avec un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à Oz .

Il est aussi instructif d'examiner le cas d'une propriété physique \mathcal{A} compatible avec \mathcal{B} et \mathcal{C} : $[A, B] = [A, C] = 0$, alors que \mathcal{B} et \mathcal{C} sont incompatibles : $[B, C] \neq 0$. Dans ce cas le résultat de la mesure de \mathcal{A} dépend de ce qu'on la mesure simultanément à \mathcal{B} ou à \mathcal{C} . Cette propriété est appelée *contextualité*, et un exemple en sera donné au § 6.3.3.

Le lecteur se sera rendu compte que la mesure en physique quantique est fondamentalement différente de la mesure en physique classique. En physique classique, la mesure révèle une propriété *préexistante* du système physique testé. Si une voiture roule à 180 km/h sur l'autoroute, la mesure de sa vitesse par un radar détermine une propriété préexistante à la mesure, ce qui donne au gendarme la légitimité pour verbaliser. Au contraire la mesure de la composante \mathcal{S}_x d'un spin 1/2 dans l'état $|+\rangle$ ne révèle pas une valeur de \mathcal{S}_x préexistante. Si l'on reprend l'analogie de la voiture, on pourrait imaginer que celle-ci soit dans un état de superposition linéaire de deux vitesses¹¹, par exemple

$$|v\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |120 \text{ km/h}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |180 \text{ km/h}\rangle$$

Le gendarme mesurera une vitesse de 120 km/h avec une probabilité de 1/3 et une vitesse de 180 km/h avec une probabilité de 2/3, mais il serait erroné de penser que la voiture roulait à l'une des deux vitesses avant la mesure. La dispersion des résultats de la mesure d'une propriété physique quantique est parfois attribuée la « perturbation incontrôlable due à la mesure », mais la valeur de cette propriété ne préexiste pas à la mesure, et ce qui n'existe pas ne peut pas être perturbé.

4.1.3 Inégalités de Heisenberg II

Nous avons introduit au chapitre précédent la notion de propriétés physiques incompatibles. Nous allons revenir de façon plus quantitative sur ce concept et ses conséquences pour la mesure. Deux propriétés physiques \mathcal{A} et \mathcal{B} sont *incompatibles* si le commutateur des opérateurs A et B qui les représentent est non nul : $[A, B] \neq 0$. Supposons qu'une première mesure de A ait donné un résultat a et projeté le vecteur d'état initial sur un vecteur propre $|a\rangle$ de A : $A|a\rangle = a|a\rangle$. Si l'on effectue une mesure de \mathcal{B} immédiatement après celle de \mathcal{A} , en général le vecteur $|a\rangle$ ne sera pas vecteur propre de B et le résultat de la mesure ne sera connu qu'avec une certaine probabilité. Par exemple si b est une valeur propre simple de B correspondant au vecteur propre $|b\rangle$: $B|b\rangle = b|b\rangle$, la probabilité de mesurer b sera $p(a \rightarrow b) = |\langle b|a\rangle|^2$. En général il ne sera pas possible de trouver des états où les valeurs de \mathcal{A}

11. Bien sûr on ne sait pas réaliser un tel état avec une voiture, mais on sait très bien fabriquer une particule élémentaire ou un atome dans un état de superposition linéaire de deux vitesses.

et \mathcal{B} soient toutes deux exactement connues. Nous allons établir un résultat important sur les dispersions (ou écarts types) des mesures effectuées à partir d'un état initial $|\varphi\rangle$ arbitraire. Comme en théorie des probabilités ordinaires, nous définissons les *dispersions* $\Delta_\varphi A$ et $\Delta_\varphi B$ dans l'état $|\varphi\rangle$ par

$$\begin{aligned}(\Delta_\varphi A)^2 &= \langle A^2 \rangle_\varphi - (\langle A \rangle_\varphi)^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\varphi I)^2 \rangle_\varphi \\ (\Delta_\varphi B)^2 &= \langle B^2 \rangle_\varphi - (\langle B \rangle_\varphi)^2 = \langle (B - \langle B \rangle_\varphi I)^2 \rangle_\varphi\end{aligned}\quad (4.8)$$

Le commutateur de A et de B est de la forme iC , où C est un opérateur hermitien ; en effet

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

Nous pouvons donc écrire

$$[A, B] = iC \quad C = C^\dagger \quad (4.9)$$

Définissons les opérateurs hermitiens de valeur moyenne nulle (*a priori* uniquement dans l'état $|\varphi\rangle$)

$$A_0 = A - \langle A \rangle_\varphi I \quad B_0 = B - \langle B \rangle_\varphi I$$

et dont le commutateur est aussi iC : $[A_0, B_0] = iC$, car $\langle A \rangle_\varphi$ et $\langle B \rangle_\varphi$ sont des nombres. La norme au carré du vecteur

$$(A_0 + i\lambda B_0)|\varphi\rangle$$

où λ est choisi réel, doit être positive

$$\begin{aligned}\|(A_0 + i\lambda B_0)|\varphi\rangle\|^2 &= \|A_0|\varphi\rangle\|^2 + i\lambda\langle\varphi|A_0B_0|\varphi\rangle - i\lambda\langle\varphi|B_0A_0|\varphi\rangle + \lambda^2\|B_0|\varphi\rangle\|^2 \\ &= \langle A_0^2 \rangle_\varphi - \lambda\langle C \rangle_\varphi + \lambda^2\langle B_0^2 \rangle_\varphi \geq 0\end{aligned}$$

Le polynôme de degré deux en λ doit être positif quel que soit λ , ce qui implique

$$\langle C \rangle_\varphi^2 - 4\langle A_0^2 \rangle_\varphi\langle B_0^2 \rangle_\varphi \leq 0$$

Ceci démontre *l'inégalité de Heisenberg*

$$\boxed{(\Delta_\varphi A)(\Delta_\varphi B) \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle_\varphi|} \quad (4.10)$$

C'est la relation souhaitée donnant les dispersions sur les mesures de \mathcal{A} et \mathcal{B} : le produit des dispersions sur les mesures est supérieur ou égal à la moitié du module de la valeur moyenne du commutateur de A et B . Il est facile de montrer (exercice 4.4.1) qu'une condition nécessaire et suffisante pour que $\Delta_\varphi A = 0$ est que $|\varphi\rangle$ soit vecteur propre de A . Dans un espace vectoriel de *dimension finie*, on a alors $\langle C \rangle_\varphi = 0$. Insistons sur l'interprétation correcte

de (4.10) : en effectuant comme en (4.3) un grand nombre de mesures de \mathcal{A} , un grand nombre de mesures de \mathcal{B} et un grand nombre de mesures de \mathcal{C} sur des systèmes tous préparés dans le même état $|\varphi\rangle$, on pourra en déduire avec une bonne précision les dispersions $\Delta_\varphi A$ et $\Delta_\varphi B$ ainsi que la valeur moyenne $\langle C \rangle_\varphi$, qui obéiront alors à (4.10). Nous soulignons que \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} sont bien sûr mesurés sans des expériences *différentes* : ils ne peuvent pas être mesurés simultanément si A , B et C ne commutent pas. De plus, $\Delta_\varphi A$ et $\Delta_\varphi B$ ne sont en rien liés aux erreurs de mesure. Si par exemple δA est la résolution expérimentale pour la mesure de \mathcal{A} , nous devons avoir $\delta A \ll \Delta_\varphi A$ pour une détermination précise de la dispersion. L'erreur sur $\langle A \rangle$ est contrôlée par la résolution expérimentale, et pas du tout par $\Delta_\varphi A$: rien n'empêche $\langle A \rangle_\varphi$ d'être déterminé avec une précision bien meilleure que $\Delta_\varphi A$.

4.2 Évolution temporelle

4.2.1 Équation d'évolution

Jusqu'à présent nous avons considéré le système physique à un instant donné, ou pendant l'intervalle de temps supposé infiniment court d'une mesure. Nous allons maintenant prendre en considération l'évolution temporelle du vecteur d'état, auquel nous donnerons une dépendance explicite $|\varphi(t)\rangle$ par rapport au temps t .

Postulat IV : équation d'évolution

L'évolution temporelle du vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ d'un système quantique *fermé* est régie par l'équation d'évolution

$$\boxed{i\hbar \frac{d|\varphi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\varphi(t)\rangle} \quad (4.11)$$

L'opérateur hermitien $H(t)$ est appelé *hamiltonien*.

Il nous faut énoncer de façon précise les conditions de validité de (4.11). Cette équation est valable pour un *système quantique fermé*, ce qui doit se comprendre comme suit : le *système quantique considéré ne doit pas être une partie d'un système quantique plus grand*, une situation qui sera examinée en détail au chapitre 17. Cependant, (4.11) est valable si le système quantique interagit avec un système *classique*¹², ce qui veut dire qu'il n'est pas nécessairement isolé. L'équation (4.11) est par exemple valable pour un spin 1/2 soumis à un champ magnétique variable (section 5.2), ou pour un atome soumis au champ électromagnétique d'une onde laser (sections 15.3.1 à 15.3.3), mais pas pour un atome interagissant avec un champ électromagnétique quantifié (section 15.5). Dans ce dernier cas, l'évolution temporelle du

12. La raison pour laquelle ceci est possible est subtile. L'explication est donnée dans l'exercice 11.6.15 : un champ classique ne s'intrique pas avec le système quantique (voir le chapitre 6 pour la définition de l'intrication).

vecteur d'état de l'atome, ou plus exactement celle de son opérateur statistique, n'est pas régie par un hamiltonien. Une évolution hamiltonienne n'est valable que pour l'ensemble *atome + champ*.

L'opérateur H a les dimensions d'une énergie, et nous identifierons effectivement H comme étant l'opérateur hermitien représentant la propriété physique énergie. L'équation (4.11) est du premier ordre par rapport au temps, et *l'évolution est déterministe* : étant donné une condition initiale $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps $t = t_0$ pour le vecteur d'état, l'évolution (4.11) détermine $|\varphi(t)\rangle$ à tout temps ultérieur $t > t_0$, pourvu bien sûr que le hamiltonien soit connu. En fait la restriction à $t > t_0$ n'est pas nécessaire : l'évolution (4.11) est réversible et on peut parfaitement « remonter le temps ». Le schéma d'une expérience typique est donné dans la figure 4.2 : le système est préparé au temps $t = t_0$ par la mesure d'un ensemble de propriétés physiques compatibles, qui détermine le vecteur d'état $|\varphi(t_0)\rangle$ (mais ainsi que nous l'avons déjà noté, la phase de préparation ne correspond pas nécessairement à un test maximal). Le vecteur d'état évolue ensuite jusqu'au temps t en suivant (4.11), et une seconde mesure d'une ou d'un ensemble de propriétés physiques (soit identiques à celles de la première mesure, soit différentes) est effectuée au temps t . Cette seconde mesure permet de déterminer totalement ou en partie $|\varphi(t)\rangle$, et par exemple de remonter aux propriétés de H . Pour que (4.11) soit valable entre les deux mesures, il est bien sûr nécessaire le système quantique reste fermé dans l'intervalle de temps correspondant.

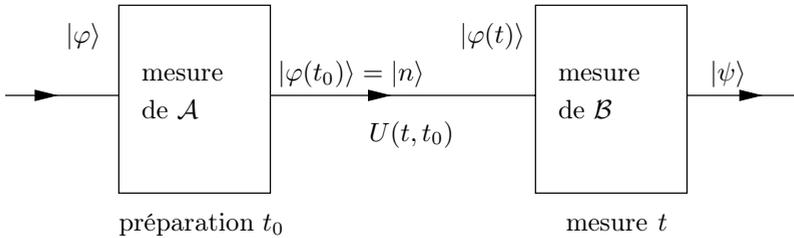


FIG. 4.2 – Préparation et mesure. La mesure de \mathcal{A} au temps t_0 donne le résultat a_n . L'évolution (4.14) entre t_0 et t se traduit par $|\varphi(t)\rangle = U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle$. Une mesure de \mathcal{B} est ensuite effectuée au temps t .

La (nécessaire) conservation de la norme du vecteur d'état est assurée par l'hermiticité de H . En effet

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \|\varphi(t)\|^2 &= \frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | \varphi(t) \rangle \\
 &= \langle \varphi(t) | \left(\frac{1}{i\hbar} H \right)^\dagger | \varphi(t) \rangle + \langle \varphi(t) | \left(\frac{1}{i\hbar} H \right) | \varphi(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | (H - H^\dagger) | \varphi(t) \rangle = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.12}$$

car $H = H^\dagger$. Si l'on décompose $|\varphi(t)\rangle$ sur une base $|n, r\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r | \varphi(t)\rangle = \sum_{n,r} c_{nr}(t) |n, r\rangle$$

les composantes $c_{nr}(t)$ obéissent à

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{n,r} |c_{nr}(t)|^2 \right) = \frac{d}{dt} \left(\sum_n p(a_n, t) \right) = 0$$

La somme des probabilités $p(a_n, t)$ doit toujours être égale à un. La conservation de la norme de $|\varphi\rangle$ implique, dans un espace de Hilbert de dimension finie, que l'évolution $|\varphi(t=0)\rangle \rightarrow |\varphi(t)\rangle$ est unitaire : on parle alors d'*évolution hamiltonienne*, ou d'*évolution unitaire*. Ce résultat reste vrai en dimension infinie.

La forme matricielle de l'équation d'évolution (4.11) s'obtient dans une base arbitraire $\{|\alpha\rangle\}$ de \mathcal{H} en la multipliant à gauche (4.11) par $\langle\alpha|$ et en utilisant la relation de fermeture

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle\alpha|\varphi(t)\rangle = \langle\alpha|H(t)|\varphi(t)\rangle = \sum_{\beta} \langle\alpha|H(t)|\beta\rangle \langle\beta|\varphi(t)\rangle$$

soit

$$i\hbar \dot{c}_{\alpha}(t) = \sum_{\beta} H_{\alpha\beta}(t) c_{\beta}(t) \quad (4.13)$$

Nous avons souligné le caractère réversible et unitaire de l'évolution (4.11). Ce caractère réversible et unitaire doit être contrasté avec celui de l'évolution (4.7) dans une mesure, qui est *non unitaire et irréversible*, parce que l'évolution limitée à l'espace des états du système pendant la mesure est une évolution tronquée qui se focalise sur l'évolution du système, lequel ne reste pas fermé pendant la mesure. L'évolution globale comprend en outre celle de l'appareil de mesure et de l'environnement (section 6.4). Lorsque l'on examine l'évolution d'un système ouvert, on rencontre automatiquement une évolution non unitaire, qui sera traitée en détail au chapitre 17. Une évolution non unitaire peut parfois être représentée par un hamiltonien non hermitien, par exemple dans la description de particules instables : cf. l'exercice 4.4.8.

4.2.2 Opérateur d'évolution

Nous avons donné en (4.11) l'équation d'évolution sous forme différentielle. Il existe une formulation intégrale de cette équation qui fait intervenir l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$. Dans cette formulation, le postulat **IV** devient :

Postulat IV' : Opérateur d'évolution

Le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ au temps t se déduit du vecteur d'état $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps t_0 par application d'un opérateur unitaire $U(t, t_0)$, appelé *opérateur d'évolution*

$$\boxed{|\varphi(t)\rangle = U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle} \quad (4.14)$$

L'unitarité de U : $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ assure la conservation (4.12) de la norme

$$\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle = \langle\varphi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle = \langle\varphi(t_0)|\varphi(t_0)\rangle = 1$$

Inversement on aurait pu partir de la conservation de la norme pour montrer que $U^\dagger U = I$. Dans un espace vectoriel de dimension finie, cela suffit à assurer $U U^\dagger = I$ (cf. § 2.2.1), mais pas nécessairement dans un espace de dimension infinie. L'opérateur d'évolution obéit aussi à la *propriété de groupe*

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad t_0 \leq t_1 \leq t \quad (4.15)$$

En effet il est équivalent d'aller directement de t_0 à t , ou d'aller d'abord de t_0 à t_1 et ensuite de t_1 à t

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle \\ &= U(t, t_1)|\varphi(t_1)\rangle = U(t, t_1)U(t_1, t_0)|\varphi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Comme précédemment la restriction $t_0 < t_1 < t$ n'est pas nécessaire : t_1 peut être quelconque. Évidemment $U(t_0, t_0) = I$, et la propriété de groupe jointe à l'unitarité de U implique

$$U(t, t_0) = U^{-1}(t_0, t) = U^\dagger(t_0, t) \quad (4.16)$$

Les postulats d'évolution temporelle **IV** et **IV'** ne sont bien sûr pas indépendants. En effet il est facile à partir de (4.11) d'écrire une équation différentielle pour $U(t, t_0)$. En différentiant (4.14) par rapport au temps

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = i\hbar \left[\frac{d}{dt} U(t, t_0) \right] |\varphi(t_0)\rangle$$

et en comparant avec (4.11) on obtient

$$i\hbar \left[\frac{d}{dt} U(t, t_0) \right] |\varphi(t_0)\rangle = H(t)U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle$$

Comme cette équation doit être valable quel que soit $|\varphi(t_0)\rangle$, on en déduit une équation différentielle pour $U(t, t_0)$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)} \quad (4.17)$$

ce qui se traduit aussi par

$$H(t_0) = i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) \Big|_{t=t_0} \quad (4.18)$$

en prenant la limite $t \rightarrow t_0$. Il est donc aisé de passer de la formulation intégrale (4.14) à la formulation différentielle (4.11). Le passage inverse est plus compliqué : en effet, si $H(t)$ était un nombre, l'équation (4.17) s'intégrerait immédiatement. Mais $H(t)$ est un opérateur et en général

$$U(t, t_0) \neq \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right) \quad (4.19)$$

parce qu'il n'y a aucune raison pour que $[H(t'), H(t'')] = 0$. Cependant il existe une formule générale¹³ pour calculer $U(t, t_0)$ à partir de $H(t)$, et les postulats **IV** et **IV'** sont strictement équivalents¹⁴.

4.2.3 États stationnaires

Un cas particulier très important est celui du système isolé. L'opérateur d'évolution ne peut alors pas dépendre du choix fait pour l'origine des temps : peu importe pour un système isolé de toute influence extérieure que nous choissions pour le décrire le temps de Paris ou celui de New York qui, comme chacun sait, sont décalés de $\tau =$ six heures

$$t_{\text{New York}} = t_{\text{Paris}} - \tau$$

Quel que soit τ , nous devons avoir

$$U(t - \tau, t_0 - \tau) = U(t, t_0) \quad (4.20)$$

Ceci implique que U ne peut dépendre que de la *différence* $(t - t_0)$. L'équation (4.18) montre alors que le hamiltonien est *indépendant du temps*, car le choix de t_0 est arbitraire. Naturellement il peut parfaitement arriver que le hamiltonien soit indépendant du temps, même pour un système non isolé, par exemple si le système est plongé dans un champ magnétique indépendant du temps comme le spin 1/2 du § 3.2.5. En revanche, si un champ magnétique est appliqué entre 12h et 12h10, heure de Paris, le choix de l'origine des temps ne sera pas indifférent ! Lorsque le hamiltonien est indépendant du temps, l'équation différentielle (4.17) s'intègre sans problème et

$$\boxed{U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H \right)} \quad (4.21)$$

qui ne dépend que de $(t - t_0)$.

13. Voir par exemple Messiah [1959], chapitre XVII.

14. En toute rigueur, on peut trouver des exceptions où U est défini, mais non $H : cf.$ Peres [1993], page 85.

L'opérateur $U(t - t_0)$ (4.21) est obtenu par exponentiation de l'opérateur hermitien H ; $U(t - t_0)$ effectue une translation de temps de $(t - t_0)$ sur le vecteur d'état, et si $(t - t_0)$ devient infinitésimal

$$U(t - t_0) \simeq I - \frac{i(t - t_0)}{\hbar} H \quad (4.22)$$

Cette équation s'interprète ainsi : H est le *générateur infinitésimal des translations de temps*, et, pour un système isolé, la définition la plus générale du hamiltonien est d'être précisément ce générateur infinitésimal. La notion de générateur infinitésimal sera étendue à d'autres transformations au chapitre 8.

Considérons un système physique isolé qui peut être décrit à une bonne approximation par un vecteur d'état d'un espace de Hilbert de dimension 1 : particule élémentaire stable, atome dans son état fondamental . . . Le vecteur d'état est alors un nombre complexe $\varphi(t)$ et H un nombre réel : $H = E$. La loi d'évolution (4.13) devient, compte tenu de (4.20)

$$\varphi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)\right) \varphi(t_0) = \exp(-i\omega(t - t_0)) \varphi(t_0) \quad (4.23)$$

en définissant $E = \hbar\omega$. D'après la relation de Planck-Einstein $E = \hbar\omega$, il est naturel d'identifier E à l'énergie.

Passons maintenant à un cas moins trivial. Soit $|n, r\rangle$ un vecteur propre de H correspondant à la valeur propre E_n : $H|n, r\rangle = E_n|n, r\rangle$. Son évolution temporelle est particulièrement simple : si $|\varphi(t_0)\rangle = |n, r\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H\right) |n, r\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0)\right) |n, r\rangle \quad (4.24)$$

La probabilité de trouver $|\varphi(t)\rangle$ dans un état $|\chi\rangle$ quelconque est indépendante du temps

$$|\langle\chi|\varphi(t)\rangle|^2 = \left|\langle\chi|\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0)\right) |\varphi(t_0)\rangle\right|^2 = |\langle\chi|\varphi(t_0)\rangle|^2$$

Pour cette raison, un état propre de H est appelé *état stationnaire*.

Il est parfois utile d'écrire la loi d'évolution temporelle sous forme de composantes. Écrivons la décomposition d'un vecteur d'état arbitraire $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps $t = t_0$ sur la base $\{|n, r\rangle\}$ des vecteurs propres de H

$$|\varphi(t_0)\rangle = \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) |n, r\rangle \quad c_{nr}(t_0) = \langle n, r | \varphi(t_0) \rangle$$

Nous avons alors

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) \exp\left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H\right) |n, r\rangle \\ &= \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0)\right) |n, r\rangle \end{aligned}$$

ce qui donne la variation des coefficients c_{nr} en fonction de t

$$c_{nr}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0)\right) c_{nr}(t_0) \quad (4.25)$$

4.2.4 Inégalité de Heisenberg temporelle

Au § 3.2.5 nous avons donné une explication élémentaire de la relation entre un temps caractéristique d'évolution Δt et une dispersion sur l'énergie ΔE . Établissons maintenant de façon générale une inégalité sur le produit $\Delta E \Delta t$, ou *inégalité de Heisenberg temporelle*. Nous allons d'abord écrire l'équation d'évolution de la valeur moyenne $\langle A \rangle_\varphi(t) = \langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle$ de l'opérateur A représentant la propriété physique \mathcal{A} , supposée indépendante du temps

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} [-\langle \varphi(t) | HA | \varphi(t) \rangle + \langle \varphi(t) | AH | \varphi(t) \rangle] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | AH - HA | \varphi(t) \rangle \end{aligned}$$

ce qui donne le *théorème d'Ehrenfest*

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\varphi(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | [A, H] | \varphi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle_\varphi} \quad (4.26)$$

Utilisons maintenant la relation (4.10), en remplaçant B par H

$$\Delta_\varphi H \Delta_\varphi A \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle_\varphi| = \frac{1}{2} \hbar \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle_\varphi(t) \right|$$

et définissons le temps $\tau_\varphi(A)$ par

$$\frac{1}{\tau_\varphi(A)} = \left| \frac{d\langle A \rangle_\varphi(t)}{dt} \right| \frac{1}{\Delta_\varphi A}$$

$\tau_\varphi(A)$ est le temps caractéristique nécessaire pour que la valeur moyenne de A varie de $\Delta_\varphi A$, c'est-à-dire d'une quantité de l'ordre de la dispersion. L'inégalité précédente devient

$$\Delta_\varphi H \tau_\varphi(A) \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (4.27)$$

ce qui est la forme rigoureuse de l'inégalité de Heisenberg temporelle. Cette inégalité est souvent écrite sous la forme

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \frac{1}{2} \hbar \quad (4.28)$$

ΔE représente la dispersion en énergie et Δt un temps caractéristique d'évolution¹⁵. La valeur de l'énergie ne peut être exactement fixée que si la dispersion ΔE est nulle, ce qui implique que le temps caractéristique doit être infini. Ceci n'est possible que si l'état du système est un état stationnaire. C'est le cas par exemple pour une particule élémentaire stable ou un atome dans son état fondamental, en l'absence de perturbations extérieures. En revanche un atome porté dans un état excité n'est pas dans un état stationnaire. En raison de son couplage avec les fluctuations du vide du champ électromagnétique (cf. § 15.3.4), il émet un photon au bout d'un temps moyen τ , appelé *vie moyenne de l'état excité* (cf. § 1.5.3). L'énergie du photon final présente une dispersion en énergie ΔE , qui est appelée *largeur de raie* et est souvent notée $\hbar\Gamma$. Nous verrons ci-dessous que ΔE (ou Γ) et τ sont reliés par une relation qui rappelle l'inégalité de Heisenberg temporelle (4.28), mais qui en fait est d'origine *différente*

$$\boxed{\tau\Delta E \simeq \hbar \quad \text{ou} \quad \tau\Gamma \simeq 1} \quad (4.29)$$

Donnons un ordre de grandeur typique de vie moyenne en physique atomique, en prenant comme exemple le premier niveau excité de l'atome de rubidium ; l'atome dans cet état excité revient à son état fondamental en émettant un photon de longueur d'onde $\lambda = 0.78 \mu\text{m}$, ce qui correspond à une énergie $\varepsilon = 1.6 \text{ eV}$. La largeur de raie est $\hbar\Gamma = 2.4 \times 10^{-8} \text{ eV}$, et la vie moyenne $\tau \simeq 1/\Gamma = 2.7 \times 10^{-8} \text{ s}$. La dispersion sur l'énergie de l'état excité est donc très faible par rapport à la différence d'énergie avec le niveau fondamental : $\hbar\Gamma/\varepsilon \simeq 10^{-8}$, ce qui entraîne que l'énergie du niveau excité est définie avec une précision excellente. La relation (4.29) se généralise à toute désintégration de particules, par exemple la désintégration à deux corps $C \rightarrow A + B$.

Il ne faudrait surtout pas conclure de (4.28) que l'on ne peut pas mesurer l'énergie avec une précision meilleure que ΔE . Considérons par exemple l'énergie E du boson Z^0 , vecteur de l'interaction faible (cf. § 1.1.4) dans son référentiel au repos : $E = m_Z c^2$, où m_Z est la masse du boson Z^0 . Le boson Z^0 est instable, et possède donc une largeur de raie. Celle-ci a été mesurée avec une grande précision : $\hbar\Gamma_Z = 2.4952 \pm 0.0023 \text{ GeV}$. La précision actuelle sur la masse du Z^0 est bien meilleure que Γ_Z ! En effet la détermination la plus précise est actuellement $m_Z c^2 = 91.1875 \pm 0.0021 \text{ GeV}$ (figure 4.3). En d'autres termes, il est possible de pointer le centre de la raie avec une précision bien meilleure que la dispersion.

Revenons maintenant à la discussion de (4.29). Soit $|\varphi\rangle$ le vecteur d'état à $t = 0$ d'un état quantique instable, par exemple l'état excité d'un atome ou l'état d'une particule instable. Pour fixer les idées, prenons le cas du niveau excité d'un atome. Cet atome est supposé isolé d'influences extérieures, mais il ne peut pas être isolé du champ électromagnétique quantifié. Le hamiltonien H qui décrit son retour au niveau fondamental par émission spontanée d'un

15. L'inégalité $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$ a un statut différent de (4.10) dans la mesure où t n'est pas un opérateur (exercice 4.4.5). Δt est souvent interprété incorrectement comme le temps nécessaire à la mesure de l'énergie.

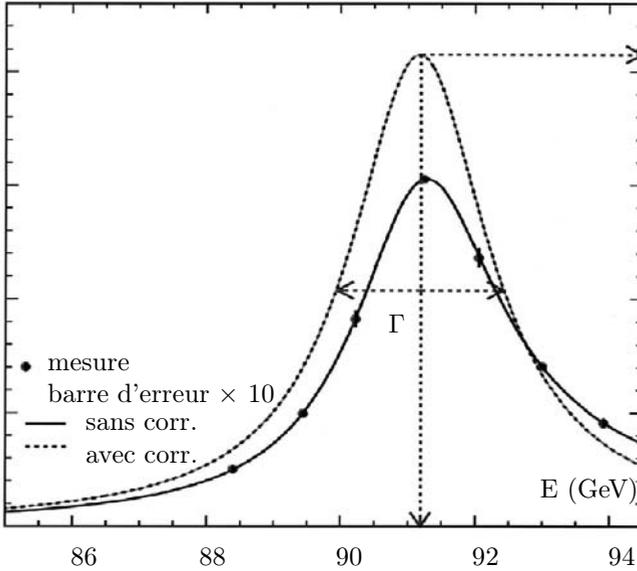


FIG. 4.3 – Spectre de masse du boson Z^0 . La courbe en trait plein est le résultat expérimental brut. Ce résultat doit être corrigé pour tenir compte des corrections radiatives (émission de photons) exactement calculables. La courbe en pointillés donne le spectre de masse du Z^0 . D'après la collaboration LEP, préirage CERN EP-2000-13 (2000).

photon est indépendant du temps. Au temps $t = 0$ le vecteur d'état du système global est $|\varphi\rangle = |\psi(t = 0)\rangle$ (il n'y a pas de photon), et il devient $|\psi(t)\rangle$ au temps t : $|\psi(t)\rangle$ décrit l'évolution de l'ensemble atome + champ, et cette évolution obéit à (4.11) dans l'espace des états atome + champ

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |\varphi\rangle \quad (4.30)$$

Soit $|n\rangle$ une base d'états propres de H , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$; on note que $|\varphi\rangle$ n'est pas un tel état propre, car il n'est pas stationnaire. La probabilité $\mathbf{p}(t)$ de trouver l'atome au temps t dans son état excité, ou *probabilité de survie*, est

$$\mathbf{p}(t) = |c(t)|^2 = |\langle\varphi|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\varphi|e^{-iHt/\hbar}|\varphi\rangle|^2 \quad (4.31)$$

Il est possible de montrer (exercice 4.4.5) l'inégalité suivante

$$\mathbf{p}(t) \geq \cos^2\left(\frac{t\Delta H}{\hbar}\right) \quad 0 \leq t \leq \frac{\pi\hbar}{2\Delta H} \quad (4.32)$$

où $\Delta H = (\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2)^{1/2}$ est la dispersion de H calculée dans l'état $|\varphi\rangle$. Pour des raisons que nous verrons dans un instant, cette inégalité n'est pas très utile

en pratique. En insérant dans (4.31) la relation de fermeture $\sum |n\rangle\langle n| = I$ on obtient pour l'amplitude de probabilité $c(t)$

$$c(t) = \sum_n |\langle\varphi|n\rangle|^2 e^{-iE_n t/\hbar}$$

Soit $w(E)$ la transformée de Fourier de $c(t)$, ou fonction spectrale

$$\begin{aligned} w(E) &= \int \frac{dt}{2\pi} e^{iEt/\hbar} c(t) = \sum_n \int \frac{dt}{2\pi} e^{i(E-E_n)t/\hbar} |\langle\varphi|n\rangle|^2 \\ &= \hbar \sum_n |\langle\varphi|n\rangle|^2 \delta(E - E_n) \end{aligned} \quad (4.33)$$

On remarque que la fonction spectrale $w(E)$ est positive : $w(E) \geq 0$. Il est immédiat de calculer les valeurs moyennes de H et de H^2

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \sum_n E_n |\langle\varphi|n\rangle|^2 = \int dE E w(E) \\ \langle H^2 \rangle &= \sum_n E_n^2 |\langle\varphi|n\rangle|^2 = \int dE E^2 w(E) \end{aligned} \quad (4.34)$$

L'approximation de Wigner et Weisskopf (annexe B) montre qu'une forme approchée de $w(E)$ est

$$w(E) = \frac{\Gamma\hbar}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4} \quad (4.35)$$

de sorte que, par transformée de Fourier inverse,

$$c(t) = e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} \quad (4.36)$$

la probabilité de survie

$$p(t) = |c(t)|^2 e^{-\Gamma t} \quad (4.37)$$

est (approximativement) une exponentielle. Insistons sur le fait que la forme (4.35) est seulement approchée, et que les loi (4.36) et (4.37) ne peuvent pas être exactes. L'inégalité (4.32) montre qu'elle ne peut pas être valable pour des temps trop courts, et on s'attend aussi à des déviations pour des temps très longs. L'argument développé ci-dessus montre aussi que la largeur de raie ΔE n'est en rien liée à la dispersion ΔH . En fait la forme lorentzienne (4.35) donne une dispersion infinie, ce qui est difficilement acceptable car cela voudrait dire que $|\varphi\rangle$ n'appartient pas au domaine de H , et l'équation d'évolution (4.11) ne pourrait pas exister¹⁶. En fait, on peut montrer que la loi exponentielle est approximativement valable¹⁷ pourvu que $\Delta E \ll \Delta H$.

16. Voir la note 14.

17. Les conditions de validité de la loi exponentielle sont examinées par Peres [1980].

La relation (4.28) permet aussi de discuter la notion de « particules virtuelles ». Il est possible d'interpréter les processus de la théorie quantique des champs en termes d'échanges de particules virtuelles : par exemple l'interaction coulombienne dans l'atome d'hydrogène correspond à l'échange de photons virtuels entre un proton et un électron. Ces processus ne correspondent pas à une réaction observable entre particules, car les particules virtuelles ne peuvent pas obéir à la fois à la conservation de l'énergie-impulsion et à la condition reliant énergie-impulsion et masse : $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$. Prenons l'exemple des interactions entre nucléons, ou interactions fortes (*cf.* § 1.1.4), dont Yukawa imagina vers 1935 qu'elles étaient dues à l'échange d'une particule encore inconnue à l'époque, et que nous appelons aujourd'hui méson π . Cet échange est représenté sur la figure 4.4 par un « diagramme de Feynman ». Le proton de gauche (p) émet un méson π^+ et se transforme en neutron (n), tandis que le neutron de droite absorbe ce méson π^+ et se transforme en proton. La conservation de l'énergie-impulsion interdit la réaction

$$p \rightarrow n + \pi^+$$

Si l'impulsion est conservée, alors l'énergie ne peut pas l'être. En revanche, si l'on admet que la réaction ne dure qu'un temps très court Δt , alors il est possible de tirer parti d'une fluctuation d'énergie $\Delta E \simeq \hbar/\Delta t$. La fluctuation d'énergie nécessaire pour que la réaction soit possible est $\Delta E \sim m_\pi c^2$, où m_π est la masse du méson π^+ . Dans l'intervalle de temps Δt , le méson peut parcourir au maximum une distance¹⁸ $\sim c\Delta t \sim \hbar/(m_\pi c)$, la longueur d'onde Compton du méson π . Cette distance représente la portée maximale r_0 des forces nucléaires (*cf.* § 1.1.4), qui est de l'ordre de 1 fm. Yukawa fut donc capable de prédire l'existence d'une particule ayant une masse de l'ordre de $\hbar/(cr_0) \sim 200$ MeV, et le méson π fut effectivement découvert quelques années plus tard avec une masse de 140 MeV. Le méson π échangé dans la figure 4.4 n'est pas observable : il est virtuel. On sait aujourd'hui que les forces nucléaires ne sont pas fondamentales, et qu'elles sont dérivées de forces fondamentales entre quarks. L'argument de Yukawa reste néanmoins valable, car on peut écrire une théorie effective des forces nucléaires, avec échange de mésons, et leur portée maximale est déterminée par le méson le plus léger, qui est le méson π . Le photon étant de masse nulle, la portée des forces électromagnétiques est infinie : comme nous l'avons noté au § 1.1.4, le potentiel coulombien est à longue portée.

4.2.5 Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg

Le point de vue adopté dans ce qui précède, où le vecteur d'état évolue avec le temps alors que les opérateurs, sauf dans le cas d'une interaction avec un champ extérieur variable, sont indépendants du temps, est appelé *point de vue de Schrödinger*. Un point de vue équivalent en ce qui concerne les résultats

18. On néglige pour simplifier la dilatation du temps.

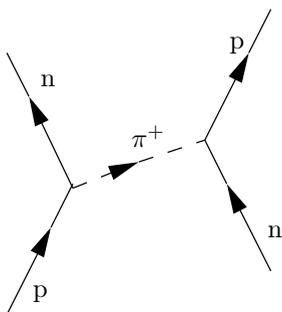


FIG. 4.4 – Diagramme de Feynman pour l'échange d'un méson π .

physiques est celui de Heisenberg, où les vecteurs d'état sont indépendants du temps et les opérateurs dépendent du temps. Afin de simplifier la discussion, nous prenons le cas d'un hamiltonien H et d'un opérateur A indépendants du temps. Ce n'est pas le cas général, car il peut arriver que même dans le point de vue de Schrödinger un opérateur A ait une dépendance explicite par rapport au temps, ou que H dépende du temps. Nous admettrons que tel n'est pas le cas, en renvoyant l'étude générale à l'exercice 4.4.7. La valeur moyenne de A au temps t est

$$\langle A \rangle_{\varphi}(t) = \langle \varphi(t_0) | \exp\left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H\right) A \exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H\right) | \varphi(t_0) \rangle$$

Si nous définissons l'opérateur A dans le point de vue de Heisenberg $A_H(t)$ par

$$\boxed{A_H(t) = \exp\left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H\right) A \exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H\right) \quad A(t_0) = A} \quad (4.38)$$

alors la valeur moyenne de A peut se calculer comme

$$\langle A \rangle_{\varphi}(t) = \langle \varphi(t_0) | A_H(t) | \varphi(t_0) \rangle \quad (4.39)$$

La dépendance par rapport au temps est intégrée dans l'opérateur, tandis que le vecteur d'état est indépendant de t .

Un point de vue intermédiaire entre celui de Schrödinger et celui de Heisenberg est le *point de vue de l'interaction* (ou de Dirac). Ce point de vue est utile lorsqu'il est naturel de décomposer le hamiltonien H en un « hamiltonien libre » H_0 indépendant du temps, que l'on sait diagonaliser, et un hamiltonien d'interaction $W(t)$. L'objectif est de se débarrasser de l'évolution connue de H_0 . On définit le vecteur d'état $|\tilde{\varphi}(t)\rangle$ dans le point de vue de l'interaction par

$$|\tilde{\varphi}(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} |\varphi(t)\rangle \quad |\tilde{\varphi}(t=0)\rangle = |\varphi(t=0)\rangle \quad (4.40)$$

Nous avons choisi $t_0 = 0$ afin d'alléger les notations ; le point de vue de l'interaction coïncide avec celui de Heisenberg si $W = 0$. L'opérateur d'évolution $U(t) = U(t, 0)$ vérifie

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = [H_0 + W(t)]U(t) \quad (4.41)$$

et on écrit

$$U(t) = U_0(t) \tilde{U}(t) \quad U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (4.42)$$

$\tilde{U}(t)$ est l'opérateur d'évolution dans le point de vue de l'interaction. L'équation (4.41) devient

$$i\hbar \left[\frac{dU_0}{dt} \tilde{U} + U_0 \frac{d\tilde{U}}{dt} \right] = [H_0 + W(t)]U_0(t)\tilde{U}(t) \quad (4.43)$$

Les deux premiers termes de chaque membre de (4.43) se compensent, et il reste

$$i\hbar \frac{d\tilde{U}}{dt} = \left[e^{iH_0 t/\hbar} W(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \right] \tilde{U}(t) = \tilde{W}(t)\tilde{U}(t) \quad (4.44)$$

$$\tilde{W}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} W(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

Les équations (4.44) donnent l'évolution dans le point de vue de l'interaction.

4.3 Approximations et modélisation

Nous avons énoncé ci-dessus les principes généraux qui fixent le cadre universel de la théorie quantique. Cela ne veut pas dire que nous sommes prêts à aborder immédiatement un problème physique ! En effet, pour aborder un problème concret, par exemple celui du calcul des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène, nous avons besoin de fixer l'espace des états et le hamiltonien appropriés selon le degré de précision avec lequel nous souhaitons résoudre le problème. Le choix d'un espace des états et d'un hamiltonien implique toujours que l'on se place dans le cadre d'une certaine approximation, et il ne faut surtout pas confondre ce qui est approximation (ou modélisation) et ce qui est principe fondamental. Par exemple, ainsi que nous allons le montrer dans un instant, l'espace des états est toujours au départ de dimension infinie, mais il peut arriver qu'il soit possible de se placer de façon approchée dans un espace des états de dimension finie, qui peut même éventuellement être petite ; la dimension N de cet espace est appelée le *nombre de niveaux* de l'approximation. Nous en avons vu un exemple dans l'étude du spin $1/2$: en première approximation, les degrés de liberté de spin sont découplés des degrés de liberté d'espace, et c'est ce qui nous a permis de nous placer dans un espace à deux dimensions en ignorant les degrés de liberté spatiaux. Un autre exemple est celui de l'atome à deux niveaux, modèle standard de la physique atomique : lorsque l'on s'intéresse à l'interaction d'un atome avec

un champ électromagnétique de fréquence ω , en pratique le champ d'un laser, et si deux niveaux d'énergie sont espacés de $\hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega$, on peut se restreindre à ces deux niveaux d'énergie formant une base pour un espace des états à deux dimensions, et écrire un hamiltonien approché d'interaction avec le champ laser agissant dans cet espace : cf. § 5.4 et § 15.4.1. Cette approche fournit une excellente approximation pour l'interaction laser-atome, approche qui peut être facilement raffinée, par exemple s'il faut tenir compte des effets du spin des niveaux.

Malheureusement la situation n'est pas toujours aussi simple. Nous allons le voir dans le cas des degrés de liberté spatiaux, que l'on peut traiter en s'appuyant sur le *principe de correspondance*. Selon ce principe, les propriétés physiques position et impulsion sont des opérateurs hermitiens \vec{R} et \vec{P} , de composantes X_i et P_j , $i, j = (x, y, z)$, qui vérifient les relations de commutation dites *relations de commutation canoniques*

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I \quad (4.45)$$

Prenant la trace des deux membres, on observe qu'il est impossible que ces relations soient satisfaites dans un espace de dimension finie : en effet la trace du membre de gauche est nulle (la trace d'un commutateur est nulle), tandis que celle du membre de droite est $i\hbar N$, où N est la dimension de \mathcal{H} . Une fois cette difficulté identifiée, la suite de la procédure (qui n'est pas toujours exempte d'ambiguïtés) consiste à remplacer dans l'expression classique de l'énergie E les positions et les impulsions classiques \vec{r} et \vec{p} par les opérateurs \vec{R} et \vec{P} pour obtenir le hamiltonien quantique d'une particule de masse m dont l'énergie potentielle est $V(\vec{r})$. Le principe de correspondance conduit au passage suivant $E \rightarrow H$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightarrow H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (4.46)$$

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, (4.46) fournit une très bonne approximation si l'on prend pour $V(\vec{r})$ le potentiel coulombien (1.3) et pour espace des états celui de l'électron. L'effet de la masse finie du proton est pris en compte grâce à la masse réduite. Il faut bien comprendre que (4.45) et (4.46) représentent un choix pour l'espace des états et le hamiltonien, et que des approximations ont été faites. On a négligé en particulier les effets relativistes, et les choses se compliquent dès que l'on en tient compte. Il est à la rigueur possible dans un premier temps de généraliser l'expression du hamiltonien (équation de Dirac), mais une véritable théorie quantique et relativiste implique que l'on introduise un champ électron-positron et un champ électromagnétique quantifiés : c'est ce que l'on appelle *l'électrodynamique quantique*. Dans ces conditions le principe de correspondance sous la forme (4.45) n'est plus valable¹⁹ : en fait il n'y a même plus d'opérateur position ! Et l'électrodynamique quantique n'est elle même qu'une approximation d'une théorie

19. Il est remplacé par des relations de commutation canoniques entre les champs et leurs moments conjugués, ce qui conduit à des objets mathématiques complexes, les distributions

plus vaste... Il faut donc soigneusement distinguer les principes fondamentaux des approximations nécessaires pour aborder tout problème physique concret. Comme le souligne Isham [1995], la procédure standard qui consiste à « quantifier une théorie classique » en utilisant le principe de correspondance n'a qu'une valeur heuristique, et en fin de compte les approximations reposant sur ce principe ou toute autre démarche heuristique doivent être validées par la confrontation aux résultats expérimentaux.

Pour conclure, donnons la forme générale du principe de correspondance : en mécanique analytique, on définit pour un système à N degrés de liberté un hamiltonien $H_{\text{cl}}(q_i, p_i)$, supposé indépendant du temps pour simplifier, $i = 1, 2, \dots, N$. Les équations de Hamilton sont

$$\frac{\partial H_{\text{cl}}}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad \frac{\partial H_{\text{cl}}}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (4.47)$$

Les variables q_i et p_i sont dites *canoniquement conjuguées*. Le principe de correspondance consiste à associer aux variables classiques q_i et p_i des opérateurs Q_i et P_i

$$q_i \rightarrow Q_i \quad p_i \rightarrow P_i$$

obéissant aux *relations de commutation canoniques* (RCC)

$$[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I \quad (4.48)$$

Cependant, cette procédure n'est pas exempte d'ambiguïtés, car l'ordre des variables classiques (q_i, p_i) est indifférent, mais pas celui des opérateurs (Q_i, P_i) .

Nous avons jusqu'à présent utilisé des notations différentes pour une propriété physique \mathcal{A} et l'opérateur hermitien associé A . Nous abandonnons désormais cette distinction, et confondons les notations pour la propriété physique et l'opérateur correspondant, qui seront représentés tous deux – sauf mention explicite du contraire – par des lettres majuscules : hamiltonien H , position \vec{R} , impulsion \vec{P} , moment angulaire \vec{J} ... Les valeurs propres seront désignées par les lettres minuscules correspondantes : \vec{r} , \vec{p} , \vec{j} ... , à l'exception du cas de l'énergie, où les valeurs propres de H seront notées E .

4.4 Exercices

4.4.1 Dispersion et vecteurs propres

Montrer qu'une condition nécessaire et suffisante pour que $|\varphi\rangle$ soit vecteur propre d'un opérateur hermitique A est que la dispersion (4.8) $\Delta_\varphi A = 0$.

à valeurs opérateur. Toutefois il reste encore un tel chemin à parcourir (invariance de jauge, renormalisation) avant de calculer une quantité physique que ce principe de correspondance apparaît un peu accessoire, et il est d'ailleurs remplacé en pratique par l'approche des intégrales de chemin de Feynman (chapitre 12).

4.4.2 Méthode variationnelle

1. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur (non normalisé) de l'espace de Hilbert des états et un hamiltonien H . La valeur moyenne $\langle H \rangle_\varphi$ est

$$\langle H \rangle_\varphi = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$$

Montrer que si le minimum de cette valeur moyenne est obtenu pour $|\varphi\rangle = |\varphi_m\rangle$ et le maximum pour $|\varphi\rangle = |\varphi_M\rangle$, alors

$$H|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle \quad \text{et} \quad H|\varphi_M\rangle = E_M|\varphi_M\rangle$$

où E_m et E_M sont la plus petite et la plus grande valeur propre.

2. On suppose que le vecteur $|\varphi\rangle$ dépend d'un paramètre $\alpha : |\varphi\rangle = |\varphi(\alpha)\rangle$. Montrer que si

$$\left. \frac{\partial \langle H \rangle_{\varphi(\alpha)}}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0$$

alors $E_m \leq \langle H \rangle_{\varphi(\alpha_0)}$ si α_0 correspond à un minimum de $\langle H \rangle_{\varphi(\alpha)}$ et $\langle H \rangle_{\varphi(\alpha_0)} \leq E_M$ si α_0 correspond à un maximum. Ce résultat est à la base d'une méthode d'approximation appelée méthode variationnelle (§ 15.1.4).

3. Si H agit dans un espace à deux dimensions, sa forme la plus générale est

$$H = \begin{pmatrix} a+c & b \\ b & a-c \end{pmatrix}$$

où b peut toujours être choisi réel. En paramétrant $|\varphi(\alpha)\rangle$ sous la forme

$$|\varphi(\alpha)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ \sin \alpha/2 \end{pmatrix}$$

trouver les valeurs de α_0 en cherchant les extrema de $\langle \varphi(\alpha) | H | \varphi(\alpha) \rangle$. Retrouver ainsi (2.35).

4.4.3 Théorème de Feynman-Hellmann

Soit un hamiltonien H dépendant d'un paramètre $\lambda : H = H(\lambda)$, $E(\lambda)$ une valeur propre simple et $|\varphi(\lambda)\rangle$ le vecteur propre normalisé ($\| |\varphi(\lambda)\rangle \|^2 = 1$) correspondant

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$$

Montrer le théorème de Feynman-Hellmann

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \varphi(\lambda) | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \varphi(\lambda) \rangle \quad (4.49)$$

4.4.4 Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

On considère un système à deux niveaux de hamiltonien H représenté par la matrice

$$H = \hbar \begin{pmatrix} A & B \\ B & -A \end{pmatrix}$$

dans la base

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

D'après (2.35), les valeurs propres et vecteurs propres de H sont

$$\begin{aligned} E_+ &= \hbar \sqrt{A^2 + B^2} & |\chi_+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \\ E_- &= -\hbar \sqrt{A^2 + B^2} & |\chi_-\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

avec

$$A = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \theta \quad B = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \theta \quad \tan \theta = \frac{B}{A}$$

1. Le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ au temps t peut se décomposer sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle$$

Écrire le système d'équations différentielles couplées auquel obéissent les composantes $c_+(t)$ et $c_-(t)$.

2. On décompose $|\varphi(t=0)\rangle$ sur la base $\{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\}$

$$|\varphi(t=0)\rangle = |\varphi(0)\rangle = \lambda|\chi_+\rangle + \mu|\chi_-\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

Montrer que $c_+(t) = \langle +|\varphi(t)\rangle$ s'écrit

$$c_+(t) = \lambda e^{-i\Omega t/2} \cos \frac{\theta}{2} - \mu e^{i\Omega t/2} \sin \frac{\theta}{2}$$

avec $\Omega = 2\sqrt{A^2 + B^2}$: $\hbar\Omega$ est la différence d'énergie entre les deux niveaux. En déduire que $c_+(t)$ (de même que $c_-(t)$) vérifie l'équation différentielle

$$\ddot{c}_+(t) + \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 c_+(t) = 0$$

3. On suppose que $c_+(0) = 0$. En déduire λ et μ à une phase près ainsi que $c_+(t)$. Montrer que la probabilité de trouver le système au temps t dans l'état $|+\rangle$ est

$$p_+(t) = \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{B^2}{A^2 + B^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

4. Montrer que si $c_+(t=0) = 1$ alors

$$c_+(t) = \cos \frac{\Omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\Omega t}{2}$$

En déduire $p_+(t)$ et $p_-(t)$, et vérifier la compatibilité du résultat avec celui de la question précédente.

4.4.5 Inégalités de Heisenberg temporelles

1. Supposons qu'il existe un opérateur hermitien T obéissant à $[T, H] = i\hbar I$. En examinant l'état

$$|\Psi\rangle = H e^{i\alpha T} |E\rangle$$

où $|E\rangle$ est un état propre de H , $H|E\rangle = E|E\rangle$, montrer que le spectre de H ne serait pas borné inférieurement.

2. Soit $|\varphi\rangle$ le vecteur d'état au temps $t = 0$ d'une particule instable, et soit $\mathbf{p}(t)$ sa probabilité de survie, c'est-à-dire la probabilité que cette particule ne soit pas désintégrée au temps t . La particule est supposée isolée de toute influence extérieure (mais pas des champs quantifiés), de sorte que le hamiltonien H qui régit la désintégration est indépendant du temps. Soit $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état au temps t de l'ensemble particule + champs quantifiés

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |\varphi\rangle$$

L'amplitude de probabilité pour trouver le système quantique au temps t dans $|\varphi\rangle$ est

$$c(t) = \langle\varphi|\psi(t)\rangle = \langle\varphi|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|\varphi\rangle$$

et la probabilité de survie est

$$\mathbf{p}(t) = |c(t)|^2 = |\langle\psi(t)|\varphi\rangle|^2 = \langle\psi(t)|\mathcal{P}|\psi(t)\rangle,$$

où $\mathcal{P} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ est le projecteur sur l'état initial. On se restreint d'abord à des temps courts. Montrer que pour $t \rightarrow 0$

$$\mathbf{p}(t) \simeq 1 - \frac{(\Delta H)^2}{\hbar^2} t^2,$$

de sorte que pour des temps très courts, la loi de désintégration n'est certainement pas exponentielle. Les valeurs moyennes de H et H^2 sont calculées avec $|\varphi\rangle$. On remarque que ΔH doit être fini, sinon $|\varphi\rangle$ n'appartiendrait pas au domaine de H^2 , ce qui serait difficile à imaginer physiquement (voir le chapitre 7 pour la définition du domaine d'un opérateur).

3. Un résultat plus général est obtenu comme suit. Montrer d'abord que

$$\Delta\mathcal{P}^2 = \langle\mathcal{P}\rangle - \langle\mathcal{P}\rangle^2$$

et utiliser la forme générale de l'inégalité de Heisenberg temporelle (4.27) pour montrer l'inégalité

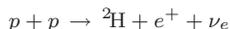
$$\left|\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt}\right| \leq \frac{2\Delta H}{\hbar} \sqrt{\mathbf{p}(1-\mathbf{p})}.$$

En intégrant cette équation différentielle, déduire

$$\mathbf{p}(t) \geq \cos^2\left(\frac{t\Delta H}{\hbar}\right) \quad 0 \leq t \leq \frac{\pi\hbar}{2\Delta H}$$

4.4.6 L'énigme des neutrinos solaires

Les réactions nucléaires à l'intérieur du Soleil produisent en abondance des neutrinos électroniques ν_e ; 95 % de ces neutrinos sont produits dans la réaction



La Terre reçoit du Soleil 6.5×10^{14} neutrinos par seconde et par m^2 . Depuis une trentaine d'années, plusieurs expériences ont tenté de détecter ces neutrinos, mais toutes ces expériences concordent pour conclure que le flux de neutrinos mesuré est seulement la moitié environ du flux calculé à partir du modèle standard du Soleil. Or ce modèle est considéré comme particulièrement fiable²⁰, en particulier en raison des résultats récents de l'héliosismologie : les incertitudes sur le modèle solaire ne peuvent en aucun cas expliquer ce « déficit

20. L'intérieur du Soleil est connu de façon bien plus précise que celui de la Terre!

en neutrinos solaires ». La combinaison de trois expériences (*cf.* la note 4 du chapitre 1), a permis de montrer sans aucun doute possible que ce déficit en neutrinos est dû à la transformation des neutrinos ν_e en d'autres sortes de neutrinos au cours de leur voyage entre la Terre et le Soleil : ces expériences montrent que le flux *total* de neutrinos prévu par le modèle du Soleil est correct, mais que c'est le flux de neutrinos électroniques qui est trop faible. Nous allons faire une théorie simplifiée, mais qui donne l'essentiel de la physique sous-jacente, en supposant

- qu'il existe seulement deux types de neutrinos, le neutrino électronique ν_e et le neutrino muonique ν_μ (en fait il existe une troisième sorte de neutrino, le neutrino $\tau : \nu_\tau$)
- que tout le phénomène se passe dans le vide dans la propagation entre la Terre et le Soleil (en fait la propagation dans le Soleil joue aussi un rôle important)²¹.

On a longtemps admis que les neutrinos étaient des particules de masse nulle. Si au contraire ils sont massifs, on peut se placer dans leur référentiel au repos et écrire le hamiltonien dans la base $\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle\}$

$$|\nu_e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\nu_\mu\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad H = c^2 \begin{pmatrix} m_e & m \\ m & m_\mu \end{pmatrix}$$

L'élément non diagonal m permet des transitions entre neutrinos électroniques et neutrinos muoniques.

1. Montrer que les états ayant une masse déterminée sont $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$

$$\begin{aligned} |\nu_1\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\nu_e\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\nu_\mu\rangle \\ |\nu_2\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |\nu_e\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\nu_\mu\rangle \end{aligned}$$

avec

$$\tan \theta = \frac{2m}{m_e - m_\mu}$$

et que les masses m_1 et m_2 sont

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{m_e + m_\mu}{2} + \sqrt{m^2 + \left(\frac{m_e - m_\mu}{2}\right)^2} \\ m_2 &= \frac{m_e + m_\mu}{2} - \sqrt{m^2 + \left(\frac{m_e - m_\mu}{2}\right)^2} \end{aligned}$$

2. Les neutrinos se propagent avec une vitesse proche de celle de la lumière : leur énergie est très grande par rapport à $\langle m \rangle c^2$, où $\langle m \rangle$ est une masse typique figurant dans H . Montrer que si un neutrino électronique est produit au temps $t = 0$ dans le Soleil, le vecteur d'état étant

$$|\varphi(t=0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\nu_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\nu_2\rangle$$

le vecteur d'état au temps t a pour composante sur $|\nu_e\rangle$

$$\langle \nu_e | \varphi(t) \rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-i\Delta E t/\hbar} \right)$$

21. Voir Abers [2004], chapitre 6, pour une discussion élémentaire de cette propagation.

où $\Delta E = E_2 - E_1$. En déduire que la probabilité de trouver un neutrino ν_e au temps t est

$$p_e(t) = 1 - \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\Delta E t}{2\hbar} \right)$$

Ce phénomène de transformation est appelé *oscillation neutrino*.

3. Si $p \gg \langle m \rangle c$ est l'impulsion des neutrinos, montrer que

$$\Delta E = \frac{(m_2^2 - m_1^2)c^3}{2p} = \frac{\Delta m^2 c^3}{2p}$$

avec $\Delta m^2 = m_2^2 - m_1^2$.

4. En supposant qu'il existe une demi-oscillation sur le parcours Soleil-Terre (c'est-à-dire $\Delta E t / \hbar = \pi$) pour des neutrinos de 8 MeV, quel est l'ordre de grandeur de la différence des masses carrées Δm^2 ? La distance Terre-Soleil est de 150 millions de kilomètres.

4.4.7 Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg

Soit un opérateur hermitien A dépendant du temps dans le point de vue de Schrödinger : $A = A(t)$. Le hamiltonien H est aussi supposé dépendant du temps. Montrer que

$$A_H(t) = U^{-1}(t, t_0) A(t) U(t, t_0)$$

vérifie

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t} \right)_H$$

où $H_H(t)$ et $(\partial A / \partial t)_H$ sont obtenus à partir de $H(t)$ et $(\partial A(t) / \partial t)$ par la loi de transformation utilisée pour A .

4.4.8 Le système des mésons K neutres : évolution non unitaire

Supposons que l'on crée au temps $t = 0$ une particule instable A de masse m . Le vecteur d'état au temps $t = 0$ est $|\varphi\rangle$. Au temps t la composante $c(t)$ de $|\psi(t)\rangle$ sur $|\varphi\rangle$ est $c(t) = \langle \varphi | \psi(t) \rangle$ (voir (4.31)). Si la particule A était stable, $c(t)$ serait simplement donné par

$$c(t) = \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) = \exp\left(-i \frac{mc^2 t}{\hbar}\right)$$

dans son référentiel au repos, où son énergie est $E = mc^2$, et l'on aurait $|c(t)|^2 = 1$ pour tout t : la probabilité que la particule existe au temps t serait toujours égale à un. Cependant on suppose la particule instable et sa loi de désintégration suit une exponentielle (4.36)

$$c(t) = \exp\left(-i \frac{mc^2 t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{t}{2\tau}\right)$$

où τ est la vie moyenne. Si l'on s'intéresse *uniquement* au vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ de la particule, on peut rendre compte de la forme de $c(t)$ en utilisant une *évolution non unitaire* (ceci sera vu en détail au chapitre 17 : l'évolution d'un système qui n'est pas fermé n'est pas unitaire) et écrire une équation différentielle pour $c(t)$

$$i\hbar \dot{c}(t) = \left(mc^2 - i \frac{\hbar \Gamma}{2} \right) c(t)$$

On se propose de généraliser cette description au cas d'un système à deux niveaux, le système des mésons K neutres, écrite dans le référentiel au repos de ces mésons : t est le temps propre, en généralisant l'équation précédente. Il existe deux types de mésons K neutres²², le méson K^0 formé d'un quark d et d'un antiquark étrange \bar{s} , et le méson \bar{K}^0 formé d'un antiquark \bar{d} et d'un quark étrange s . On rappelle que les charges des quarks u , d et s sont respectivement $2/3$, $-1/3$ et $-1/3$ en unité de la charge du proton. La production de ces mésons se fait par interaction forte, et cette interaction vérifie une loi de conservation analogue à celle de la charge électrique : le nombre de quarks étranges moins le nombre d'antiquarks étranges est conservé (de même que dans une réaction impliquant des électrons et des positrons, le nombre d'électrons moins le nombre de positrons est conservé par conservation de la charge électrique). Donnons quelques exemples : le méson π^+ est une combinaison $(u\bar{d})$, le méson π^- une combinaison $(\bar{u}d)$ et la particule Λ^0 une combinaison (uds) . Les réactions

$$\pi^- (\bar{u}d) + \text{proton } (uud) \rightarrow K^0(d\bar{s}) + \Lambda^0(uds)$$

ou

$$\bar{K}^0(\bar{d}s) + \text{proton } (uud) \rightarrow \pi^+(u\bar{d}) + \Lambda^0(uds)$$

sont permises, tandis que

$$\pi^- (\bar{u}d) + \text{proton } (uud) \rightarrow \bar{K}^0(\bar{d}s) + \Lambda^0(uds)$$

ou

$$K^0(d\bar{s}) + \text{proton } (uud) \rightarrow \pi^+(u\bar{d}) + \Lambda^0(uds)$$

sont interdites.

1. Le système (K^0, \bar{K}^0) est un système à deux niveaux dont le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ peut s'écrire

$$|\varphi(t)\rangle = c(t)|K^0\rangle + \bar{c}(t)|\bar{K}^0\rangle$$

dans la base $\{|K^0\rangle, |\bar{K}^0\rangle\}$. Les composantes du vecteur $|\varphi(t)\rangle$ obéissent à une équation d'évolution

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}(t) \\ \dot{\bar{c}}(t) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} c(t) \\ \bar{c}(t) \end{pmatrix}$$

où M est une matrice 2×2 . Soit \mathcal{C} l'opérateur de « conjugaison de charge » qui échange particules et antiparticules²³

$$\mathcal{C}|K^0\rangle = |\bar{K}^0\rangle \quad \mathcal{C}|\bar{K}^0\rangle = |K^0\rangle$$

Montrer que si M commute avec \mathcal{C} , sa forme la plus générale est

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}$$

où A et B sont *a priori* deux nombres complexes, car la matrice M n'est pas hermitienne.

22. Il existe aussi deux mésons K chargés, le méson K^+ ($u\bar{s}$) et le méson K^- ($\bar{u}s$).

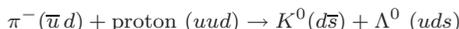
23. On peut généraliser le raisonnement en utilisant au lieu de \mathcal{C} le produit $\mathcal{C}\mathcal{P}$, où \mathcal{P} est l'opération parité. En fait l'expérience montre que $[M, \mathcal{C}\mathcal{P}] \neq 0$, mais les corrections sont très faibles.

2. Quels sont les vecteurs propres $|K_1\rangle$ et $|K_2\rangle$ de M ? Montrer que ce sont ces deux états qui ont une énergie et une vie moyenne bien déterminées. Si au temps $t = 0$, $|\varphi(t)\rangle$ a pour composantes $c(0)$ et $\bar{c}(0)$, calculer $c(t)$ et $\bar{c}(t)$. On posera

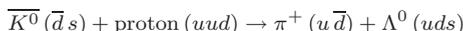
$$A = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma_1 + \Gamma_2) \right]$$

$$B = \frac{1}{2} \left[(E_1 - E_2) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma_1 - \Gamma_2) \right]$$

3. On produit au temps $t = 0$ un méson K^0 dans la réaction



Quelle est la probabilité²⁴ pour trouver un méson \bar{K}^0 au temps t ? En supposant $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$, montrer que la probabilité d'observer la réaction



est proportionnelle pour $t \sim \tau_1 = 1/\Gamma_1$ à

$$p(t) = 1 - 2 \exp\left(-\frac{\Gamma_1 t}{2}\right) \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} + \exp(-\Gamma_1 t)$$

Tracer la courbe représentative de $p(t)$. Que pensez-vous des ordres de grandeur respectifs de $(E_1 - E_2)$ et de E_1 ou E_2 ? Comment pourrait-on mesurer $(E_1 - E_2)$? Les valeurs numériques sont : $\tau_1 \simeq 10^{-10}$ s, $\tau_2 \simeq 10^{-7}$ s, $E_1 \simeq E_2 \simeq 500$ MeV.

4.5 Bibliographie

Notre présentation des postulats de la mécanique quantique s'écarte sensiblement des exposés classiques que l'on trouvera par exemple dans Messiah [1959], chapitre VIII, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre III, ou Basdevant et Dalibard [2000], chapitre 5. Le lecteur pourra aussi consulter Ballentine [1998], chapitre 9, Peres [1993], chapitre 2, Isham [1995], chapitre 5 et Omnès [1994]. Une discussion qualitative des inégalités de Heisenberg se trouve dans Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 3. Les inégalités de Heisenberg temporelles sont traitées de façon imprécise, voire incorrecte, dans certains manuels; deux exceptions sont Peres [1993], chapitre 12, et Ballentine [1998], chapitre 12.

24. En pratique les mésons K se propagent en ligne droite à partir de leur point de production avec une vitesse proche de la vitesse de la lumière, et on se place à une distance $l \simeq ct(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ du point de production.

Chapitre 5

Systèmes à nombre de niveaux fini

CE CHAPITRE EXAMINE QUELQUES APPLICATIONS simples de la mécanique quantique, dans des situations où l'on obtient une bonne modélisation d'un système quantique en se restreignant à un espace des états de dimension finie. Si chaque niveau d'énergie, même dégénéré, est compté une fois, la dimension de l'espace de Hilbert des états \mathcal{H} est égale au nombre de niveaux : c'est pourquoi on parle de *système à nombre de niveaux fini*. Les deux premiers exemples seront empruntés à la chimie quantique et nous permettront d'étudier le cas stationnaire, celui d'un hamiltonien indépendant du temps. Cependant, le point essentiel de ce chapitre est l'introduction de la dépendance par rapport au temps induite par un couplage du système à deux niveaux avec un champ extérieur classique périodique. Cette dépendance par rapport au temps sera illustrée par trois exemples d'une grande importance pratique : la résonance magnétique nucléaire ou RMN (section 5.2), la molécule d'ammoniac (section 5.3) et l'atome à deux niveaux (section 5.4).

5.1 Chimie quantique élémentaire

5.1.1 Molécule d'éthylène

La molécule d'éthylène C_2H_4 servira d'introduction au sujet. L'« ossature » de cette molécule est formée par les liaisons dites *liaisons σ* : des paires d'électrons σ de spin opposé sont mises en commun entre les deux atomes de carbone ainsi qu'entre les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène, formant un ion $(\text{C}_2\text{H}_4)^{++}$ (figure 5.1). Il reste à placer deux électrons, appelés *électrons π* , qui sont mobiles : schématiquement ces deux électrons peuvent sauter d'un atome de carbone à l'autre. On dit qu'ils sont *délocalisés*. Le fait de traiter séparément électrons π et électrons σ est bien sûr une approximation, mais cette approximation joue un grand rôle dans la théorie de la liaison chimique. Commençons par placer le premier électron π . Celui-ci peut être localisé au voisinage de l'atome de carbone 1 ; l'état quantique correspondant

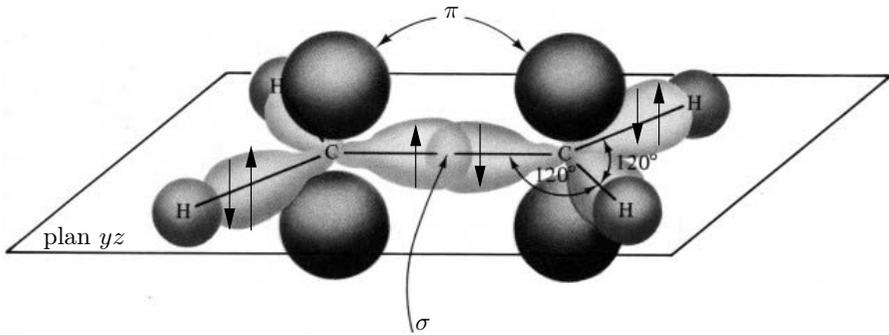
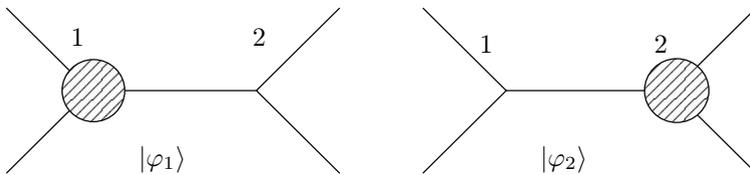


FIG. 5.1 – La molécule d'éthylène.

FIG. 5.2 – Les deux états possibles d'un électron π , localisés au voisinage de l'atome 1 ou de l'atome 2.

sera désigné par $|\varphi_1\rangle$. Il peut aussi être localisé au voisinage de l'atome de carbone 2, et l'état quantique correspondant sera désigné par $|\varphi_2\rangle$ (figure 5.2). L'énergie de cet électron localisé sur l'atome 1 ou l'atome 2 est E_0 , la même par symétrie entre les deux atomes. Nous allons prendre comme approximation de l'espace des états un espace à deux dimensions \mathcal{H} dont les vecteurs de base sont $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$. Dans cette base, le hamiltonien s'écrit provisoirement

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad H_0|\varphi_{1,2}\rangle = E_0|\varphi_{1,2}\rangle \quad (5.1)$$

Cependant ce hamiltonien est incomplet, car nous n'avons pas tenu compte de la possibilité pour l'électron de sauter d'un atome de carbone à l'autre. Dans le cadre de nos approximations, qui sont celles de la théorie des *orbitales moléculaires de Hückel*, la forme la plus générale de H est

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

et l'élément non diagonal $-A$ de H autorise précisément des transitions entre $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. Un choix adéquat de la phase des vecteurs de base nous a permis de prendre A réel : cf. § 2.3.2. Nous avons affecté A d'un signe $(-)$ qui n'est pas indifférent, car il est possible de montrer que $A > 0$.

Si $A \neq 0$, les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ ne sont plus des états stationnaires. Comme nous l'avons vu au § 2.3.2, les vecteurs propres de H sont maintenant

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$|\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

avec

$$H|\chi_+\rangle = (E_0 - A)|\chi_+\rangle \quad H|\chi_-\rangle = (E_0 + A)|\chi_-\rangle \quad (5.5)$$

Comme $A > 0$, l'état symétrique $|\chi_+\rangle$ est l'état d'énergie la plus basse. Le spectre du hamiltonien est donné sur la figure 5.3 : l'état fondamental est l'état $|\chi_+\rangle$, d'énergie $(E_0 - A)$. On peut donner une interprétation spatiale de ces résultats en examinant la localisation de l'électron sur la droite joignant les deux atomes de carbone prise comme axe des x , l'origine étant située au milieu de cette droite. Comme nous le verrons en détail au chapitre 9, si $|x\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur position, la quantité $\langle x|\varphi_1\rangle$ est l'amplitude de probabilité pour trouver au point x l'électron dans l'état $|\varphi_1\rangle$. Au chapitre 9, cette amplitude de probabilité sera appelée la *fonction d'onde* de l'électron. Le module au carré de cette amplitude de probabilité donne la probabilité¹ de trouver l'électron au point x , aussi appelée *probabilité de présence de l'électron au point x* . Cette interprétation permet de représenter qualitativement sur la figure 5.4 les amplitudes de probabilité $\chi_{\pm}(x) = \langle x|\chi_{\pm}\rangle$ correspondant aux états $|\chi_{\pm}\rangle$. La probabilité de présence correspondante s'annule à l'origine dans le cas antisymétrique $|\chi_-\rangle$, mais non dans le cas symétrique $|\chi_+\rangle$. Le caractère symétrique ou antisymétrique de la fonction d'onde de l'état fondamental est lié au signe de A . En pratique, un état fondamental est toujours symétrique, ce qui correspond à $A > 0$.

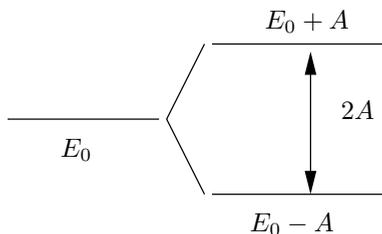


FIG. 5.3 – Niveaux d'énergie d'un électron π .

Il nous reste à placer le second électron : ceci se fera très simplement si nous pouvons ignorer les interactions entre cet électron et le précédent,

1. Plus précisément c'est une probabilité par unité de longueur : $|\langle x|\varphi\rangle|^2 dx$ est la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$: voir § 9.1.2.

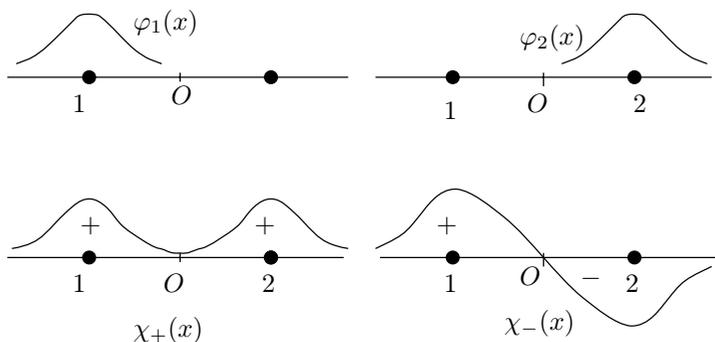


FIG. 5.4 – Amplitudes de probabilité pour trouver un électron π en un point x .

c'est-à-dire utiliser l'approximation des électrons indépendants. Pour obtenir l'état fondamental, il suffit de placer le second électron dans l'état $|\chi_+\rangle$ d'énergie $(E_0 - A)$. Le principe de Pauli (chapitre 14) restreint alors les états de spin : si le premier électron a son spin up ($|+\rangle$), le second électron doit avoir son spin down ($|-\rangle$), ainsi que nous le verrons au chapitre 14. L'état fondamental de la liaison π est finalement $2(E_0 - A)$; $-2A$ est appelé *énergie de délocalisation* des électrons π . Il faut souligner le rôle crucial de l'*approximation des particules indépendantes* utilisée dans le raisonnement ci-dessus : les électrons π n'interagissent pas avec les électrons σ et n'interagissent pas entre eux. Cette modélisation est difficile à justifier à partir des principes fondamentaux, ou de ce que l'on appelle aujourd'hui des calculs *ab initio*, mais elle se révèle d'un intérêt pratique considérable.

5.1.2 Molécule de benzène

Dans la molécule de benzène, l'ossature σ de l'ion $(C_6H_6)^{6+}$ forme un hexagone. Si l'on rajoute les 6 électrons π de façon à former trois doubles liaisons, on obtient la formule de Kékulé (figure 5.5a), et on prédit une énergie $6(E_0 - A)$ pour l'état fondamental. On sait par un raisonnement de chimie que la formule de Kékulé ne peut pas être tout à fait correcte², et nous allons effectivement voir que tenir compte de la délocalisation des électrons π tout au long de la chaîne hexagonale conduit à une énergie plus basse que $6(E_0 - A)$: la formule de Kékulé ne donne pas correctement l'énergie de l'état fondamental. Examinons pour commencer l'addition d'un seul électron, et numérotions³ de 0 à 5 les atomes de carbone le long de la chaîne hexagonale en prenant

2. Par exemple il existe une seule forme d'orthodibromobenzène, alors que la formule de Kékulé en prévoit deux différentes. On peut aussi remarquer que la longueur de la liaison entre deux atomes de carbone dans le benzène (1.40 Å) est intermédiaire entre une simple (1.54 Å) et une double (1.35 Å) liaison.

3. Comme nous le verrons dans un instant, il est plus commode de numéroter de 0 à 5 que de 1 à 6!

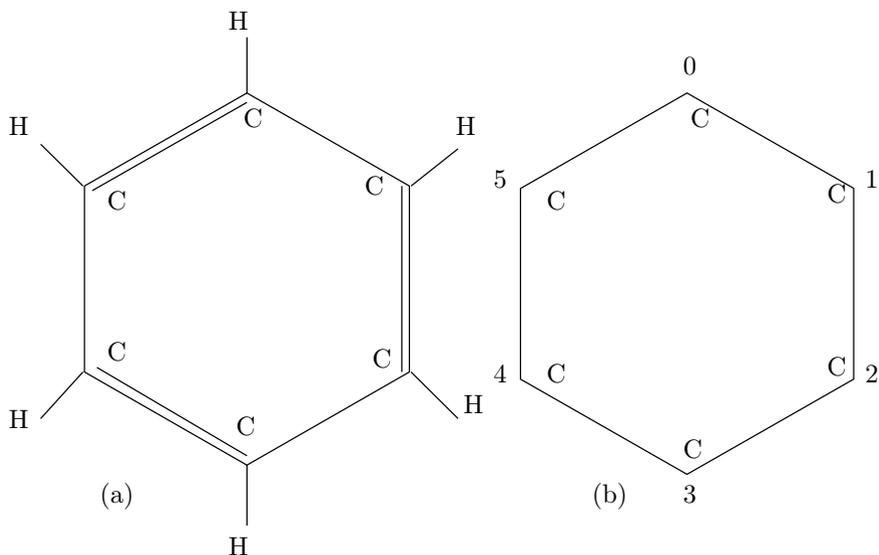


FIG. 5.5 – (a) Configuration hexagonale d'une molécule de benzène. (b) Ossature des électrons σ .

une origine arbitraire (figure 5.5b). Nous notons $|\varphi_3\rangle$ par exemple l'état où l'électron est localisé au voisinage de l'atome n° 3. Comme il n'est pas plus difficile de traiter un nombre quelconque N d'atomes de carbone formant une chaîne fermée, c'est-à-dire un polygone régulier à N côtés, nous notons $|\varphi_n\rangle$ l'état où l'électron est localisé au voisinage de l'atome n° n , $n = 0, 1, \dots, N-1$, en prenant $N = 6$ pour le benzène. Les atomes n et $n + N$ sont identiques : $n \equiv n + N$. L'espace des états est à N dimensions, et le hamiltonien est défini par son action sur $|\varphi_n\rangle$

$$H|\varphi_n\rangle = E_0|\varphi_n\rangle - A(|\varphi_{n-1}\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle) \quad (5.6)$$

Pour trouver les valeurs propres et vecteurs propres de H , nous allons exploiter la symétrie du problème sous toute permutation circulaire des N atomes de la chaîne. Soit U_P l'opérateur unitaire qui effectue une permutation circulaire des atomes dans le sens $n \rightarrow (n - 1)$

$$U_P|\varphi_n\rangle = |\varphi_{n-1}\rangle \quad U_P^\dagger|\varphi_n\rangle = U_P^{-1}|\varphi_n\rangle = |\varphi_{n+1}\rangle \quad (5.7)$$

D'après (5.6) et (5.7) nous pouvons écrire le hamiltonien sous la forme

$$H = E_0I - A(U_P + U_P^\dagger) \quad (5.8)$$

ce qui implique que H et U_P commutent

$$[H, U_P] = 0 \quad (5.9)$$

et ont une base de vecteurs propres communs. Cherchons les vecteurs propres et valeurs propres de U_P , qui est *a priori* un opérateur plus simple que H . Comme U_P est unitaire, ses valeurs propres sont de la forme $\exp(i\delta)$ (cf. § 2.3.4). Comme $(U_P)^N = I$, on doit avoir $\exp(iN\delta) = 1$, et par conséquent les valeurs propres sont indicées par un indice entier s

$$\delta = \delta_s = \frac{2\pi s}{N} \quad s = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5.10)$$

Nous avons donc déterminé N valeurs propres distinctes de U_P . Comme U_P agit dans un espace de dimension N , les vecteurs propres correspondants sont orthogonaux et forment une base de \mathcal{H} . Écrivons un vecteur propre normalisé $|\chi_s\rangle$ sous la forme

$$|\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\varphi_n\rangle \quad \sum_{n=0}^{N-1} |c_n|^2 = 1 \quad (5.11)$$

Nous avons d'une part

$$U_P |\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\varphi_{n-1}\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_{n+1} |\varphi_n\rangle$$

et d'autre part

$$U_P |\chi_s\rangle = e^{i\delta_s} |\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\delta_s} c_n |\varphi_n\rangle$$

L'identification des coefficients de $|\varphi_n\rangle$ dans ces deux équations conduit à

$$c_{n+1} = e^{i\delta_s} c_n \quad \text{soit} \quad c_n = e^{in\delta_s} c_0$$

Ceci donne pour le vecteur propre correspondant à la valeur propre $\exp(i\delta_s)$

$$|\chi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{in\delta_s} |\varphi_n\rangle \quad (5.12)$$

Le choix $c_0 = 1/\sqrt{N}$ assure la normalisation de $|\chi_s\rangle$. Compte tenu de l'expression (5.8) de H , la valeur propre E_s est donnée par

$$E_s = E_0 - A \left(e^{i\delta_s} + e^{-i\delta_s} \right) = E_0 - 2A \cos \delta_s$$

soit (figure 5.6)

$$E_s = E_0 - 2A \cos \frac{2\pi s}{N} \quad (5.13)$$

Nous aurions pu arriver directement à (5.13) sans passer par l'intermédiaire de l'opérateur de permutation circulaire U_P . Néanmoins ce passage par U_P

illustre une stratégie générale et non une « astuce de calcul ». Nous aurons souvent à mettre en œuvre cette stratégie, car elle simplifie, et parfois de façon considérable, la diagonalisation du hamiltonien : au lieu de diagonaliser directement H , on diagonalise d'abord les opérateurs de symétrie unitaires qui commutent avec H , lorsque de tels opérateurs existent en raison d'une symétrie du problème physique.

On remarque que les valeurs s et $\tilde{s} = N - s$ donnent les mêmes valeurs de l'énergie : en dehors de $s = 0$ et $s = N - 1$ (pour N pair), les niveaux d'énergie sont deux fois dégénérés. Il est possible d'écrire les vecteurs propres de H avec des composantes réelles en prenant des combinaisons linéaires de $|\chi_s\rangle$ et $|\chi_{\tilde{s}}\rangle$

$$|\chi_s^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi_s\rangle + |\chi_{\tilde{s}}\rangle) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \cos \frac{2\pi ns}{N} |\varphi_n\rangle \quad (5.14)$$

$$|\chi_s^-\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}} (|\chi_s\rangle - |\chi_{\tilde{s}}\rangle) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \sin \frac{2\pi ns}{N} |\varphi_n\rangle \quad (5.15)$$

Nous pouvons maintenant rassembler les résultats pour les valeurs propres de H et les vecteurs propres correspondants dans le cas du benzène : $N = 6$, $\cos(2\pi/6) = 1/2$, $\sin(2\pi/6) = \sqrt{3}/2$ (figure 5.6)

$$\begin{aligned} s = 0 & & E = E_0 - 2A \\ |\chi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ s = 1, \tilde{s} = 5 & & E = E_0 - A \\ |\chi_1^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & |\chi_1^-\rangle &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ s = 2, \tilde{s} = 4 & & E = E_0 + A \\ |\chi_2^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) & |\chi_2^-\rangle &= \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ s = \tilde{s} = 3 & & E = E_0 + 2A \\ |\chi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (1, -1, 1, -1, 1, -1) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Cherchons maintenant l'état fondamental, c'est-à-dire l'état de plus basse énergie, en plaçant les 6 électrons π délocalisés. À l'approximation des électrons indépendants, cet état sera obtenu en mettant d'abord deux électrons de spin opposé dans le niveau $E_0 - 2A$, le principe de Pauli (chapitre 14) nous interdisant d'y mettre d'autres électrons. Le niveau $(E_0 - A)$ étant doublement dégénéré, nous pouvons y mettre quatre électrons (deux paires d'électrons de spin opposé) ce qui donne une énergie totale

$$E = 2(E_0 - 2A) + 4(E_0 - A) = 6E_0 - 8A \quad (5.17)$$

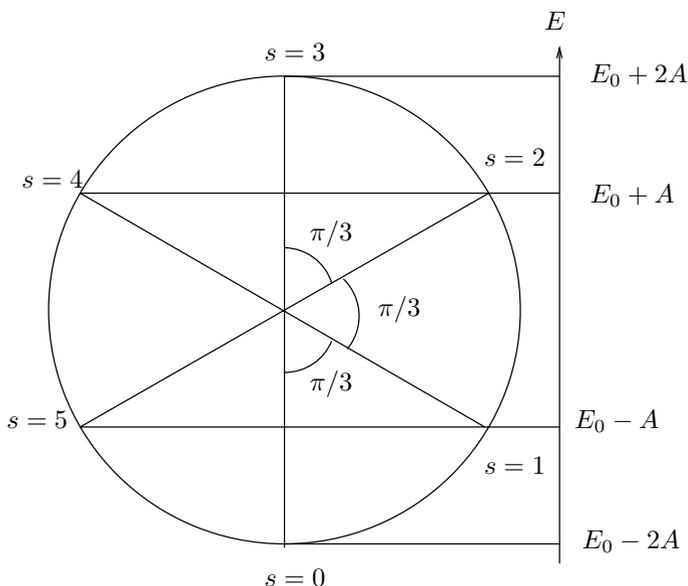


FIG. 5.6 – Niveaux d'énergie d'un électron π de la molécule de benzène.

Cette énergie est inférieure de $2A$ à celle ($6E_0 - 6A$) de la formule de Kékulé : les électrons π du benzène ne sont pas localisés sur des doubles liaisons, mais ils sont délocalisés le long de l'ensemble de la chaîne hexagonale, et cette forme de délocalisation diminue l'énergie de $2A$.

La comparaison entre la chaleur⁴ d'hydrogénation du benzène en cyclohexane



et celle du cyclohexène, qui contient une seule double liaison



permet d'estimer $2A$: $2A = 3 \times 28.6 - 49.8 = 36 \text{ kcal/mole} \simeq 1.6 \text{ eV}$. Cependant cette estimation est au mieux un ordre de grandeur, car elle est sujette à des incertitudes difficiles à apprécier. Elles sont dues à l'approximation des électrons indépendants, qui est loin d'être bien contrôlée.

5.2 Résonance magnétique nucléaire (RMN)

Dans la section 5.1, nous avons étudié les niveaux d'énergie de hamiltoniens indépendants du temps. Dans les trois sections qui vont suivre, nous allons introduire une interaction dépendant du temps pour un système à deux niveaux,

4. Pour les puristes : il s'agit en fait d'une variation d'enthalpie, mais la différence est négligeable.

en plongeant le système dans un champ extérieur classique périodique de fréquence ω . Dans ces conditions il n'y a évidemment plus d'états stationnaires, et le problème intéressant devient l'étude des transitions d'un niveau à l'autre sous l'influence du champ extérieur. Nous montrerons le résultat fondamental suivant : si $\omega \simeq \omega_0$, où $\hbar\omega_0$ est la différence d'énergie entre les deux niveaux, on observe un remarquable *phénomène de résonance*. Nous allons en donner trois exemples d'une grande importance pratique : la résonance magnétique nucléaire dans cette section, la molécule d'ammoniac dans la section 5.3 et l'atome à deux niveaux dans la section 5.4.

5.2.1 Spin 1/2 dans un champ magnétique périodique

La résonance magnétique nucléaire (RMN) repose sur le fait que les noyaux atomiques de spin non nul possèdent des moments magnétiques. Nous nous limiterons aux noyaux de spin 1/2 (^1H , ^{13}C , ^{19}F , etc.) dont le moment magnétique, qui est un opérateur en mécanique quantique, est donné par

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} = \frac{1}{2} \gamma \hbar \vec{\sigma} \quad (5.18)$$

où \vec{S} est l'opérateur de spin défini dans la section 3.2, γ et le facteur gyromagnétique

$$\gamma = \bar{\gamma} \frac{q_p}{2m_p} \quad (5.19)$$

avec $\bar{\gamma} = 5.59$ pour le proton, 1.40 pour le ^{13}C , 5.26 pour le ^{19}F , etc. Le spin nucléaire est placé dans un champ magnétique \vec{B}_0 dirigé suivant Oz . Suivant (3.61), le hamiltonien H_0 du spin nucléaire s'écrit

$$H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\frac{1}{2} \gamma \hbar B_0 \sigma_z = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z \quad (5.20)$$

avec $\omega_0 = \gamma B_0$, soit encore sous forme matricielle dans une base où σ_z est diagonal

$$H_0 = -\frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

On note que, comme la charge du proton q_p est positive, on n'introduit pas de signe moins dans la définition de ω_0 , contrairement à ce qui avait été fait dans la section 3.2.5 pour le cas de l'électron. ω_0 est la fréquence de Larmor, la fréquence de précession du moment magnétique classique autour de \vec{B}_0 (figure 3.7) ; dans le cas du proton la précession de Larmor s'effectue dans le sens inverse du sens trigonométrique. L'état $|+\rangle$ a une énergie $-\hbar\omega_0/2$, l'état $|-\rangle$ une énergie $\hbar\omega_0/2$; on est donc en présence d'un système à deux niveaux : les deux niveaux Zeeman (§ 3.2.5) d'un spin 1/2 dans un champ magnétique, la différence d'énergie étant $\hbar\omega_0$.

On ajoute au champ constant \vec{B}_0 un champ périodique $\vec{B}_1(t)$ situé dans le plan xOy tournant dans le sens inverse du sens trigonométrique⁵, c'est-à-dire dans le même sens que la précession de Larmor, avec une vitesse angulaire ω

$$\vec{B}_1(t) = B_1(\hat{x} \cos \omega t - \hat{y} \sin \omega t) \quad (5.22)$$

En pratique un tel champ peut être obtenu au moyen de deux bobines placées le long des axes Ox et Oy , alimentées en courant alternatif de fréquence ω . La contribution au hamiltonien induite par le champ $\vec{B}_1(t)$ est

$$H_1(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_1(t) = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 (\sigma_x \cos \omega t - \sigma_y \sin \omega t) \quad (5.23)$$

où $\omega_1 = \gamma B_1$ est la *fréquence de Rabi*, souvent appelée *fréquence de nutation* ω_{nut} en RMN. Il sera commode pour écrire H_1 d'utiliser les matrices $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ qui obéissent aux relations de commutation

$$[\sigma_z, \sigma_{\pm}] = \pm 2\sigma_{\pm} \quad (5.24)$$

H_1 prend alors la forme

$$H_1(t) = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 [\sigma_+ e^{i\omega t} + \sigma_- e^{-i\omega t}] \quad (5.25)$$

Rappelons que le hamiltonien *complet* dépendant du temps est

$$H(t) = H_0 + H_1(t) \quad (5.26)$$

Notre objectif est de résoudre l'équation d'évolution (4.11) avec le hamiltonien dépendant du temps (5.26), c'est-à-dire déterminer le vecteur d'état du spin $1/2$ $|\varphi(t)\rangle$ en fonction du vecteur d'état à $t = 0$, $|\varphi(0)\rangle$. Il est possible de résoudre le système d'équations différentielles que l'on déduit de (4.11) pour les composantes (5.27) $c_{\pm}(t)$ de $|\varphi(t)\rangle$, mais il est plus élégant et plus rapide de se ramener à un hamiltonien indépendant du temps, qui a de plus l'avantage de se prêter à une interprétation géométrique. L'idée physique pour se ramener à un hamiltonien indépendant du temps est d'utiliser un référentiel $O\hat{x}\hat{y}\hat{z}$ tournant autour de Oz avec la vitesse angulaire ω . Dans ce référentiel, le champ \vec{B}_1 est indépendant du temps : \vec{B}_1 est orienté en permanence suivant l'axe $O\hat{x}$. Soit $|\varphi(t)\rangle$ le vecteur d'état dans la base $\{|\pm\rangle\}$ correspondant au référentiel fixe

$$|\varphi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle \quad (5.27)$$

Pour passer aux axes tournants, nous utilisons (3.59) qui nous dit que l'opérateur de rotation d'un angle θ autour de Oz est $\exp(-i\theta\sigma_z/2)$. Les vecteurs de base dans le référentiel tournant sont donc, avec $\theta = -\omega t$

$$|\hat{+}(t)\rangle = e^{i\omega t\sigma_z/2}|+\rangle = e^{i\omega t/2}|+\rangle \quad |\hat{-}(t)\rangle = e^{i\omega t\sigma_z/2}|-\rangle = e^{-i\omega t/2}|-\rangle$$

5. On pourrait aussi prendre un champ $\vec{B}_1(t)$ parallèle à Ox : cf. l'exercice 5.5.6.

Dans le référentiel tournant, les composantes de $|\varphi(t)\rangle$ sont

$$\hat{c}_{\pm}(t) = \langle \hat{\pm}(t) | \varphi(t) \rangle = \langle \pm | e^{-i\omega t \sigma_z / 2} | \varphi(t) \rangle = \langle \pm | \hat{\varphi}(t) \rangle$$

où nous avons défini le vecteur d'état $|\hat{\varphi}(t)\rangle$ dans le référentiel tournant par

$$|\hat{\varphi}(t)\rangle = e^{-i\omega t \sigma_z / 2} |\varphi(t)\rangle \quad |\hat{\varphi}(t=0)\rangle = |\varphi(t=0)\rangle \quad (5.28)$$

L'équation d'évolution pour $|\hat{\varphi}(t)\rangle$ devient

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\hat{\varphi}(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{-i\omega t \sigma_z / 2} |\varphi(t)\rangle \right) = \left(\frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z + \hat{H}(t) \right) |\hat{\varphi}(t)\rangle \quad (5.29)$$

avec

$$\hat{H}(t) = e^{-i\omega t \sigma_z / 2} H(t) e^{i\omega t \sigma_z / 2} = H_0 + \hat{H}_1(t) \quad (5.30)$$

Pour calculer $\hat{H}_1(t)$, nous allons partir de la forme (5.25) de $H_1(t)$. Les opérateurs $\hat{\sigma}_{\pm}(t)$

$$\hat{\sigma}_{\pm}(t) = e^{-i\omega t \sigma_z / 2} \sigma_{\pm} e^{i\omega t \sigma_z / 2} \quad (5.31)$$

obéissent à l'équation différentielle

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}_{\pm}(t) = -\frac{i}{2} \omega e^{-i\omega t \sigma_z / 2} [\sigma_z, \sigma_{\pm}] e^{i\omega t \sigma_z / 2} = \mp i \omega \hat{\sigma}_{\pm}(t)$$

où nous nous sommes servis de (5.24), d'où le résultat important que nous aurons souvent l'occasion d'utiliser

$$\boxed{\hat{\sigma}_{\pm}(t) = e^{\mp i \omega t} \sigma_{\pm}} \quad (5.32)$$

On en déduit immédiatement l'expression de \hat{H}_1 , qui comme promis est indépendant du temps

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 [\sigma_+ + \sigma_-] = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x \quad (5.33)$$

La proportionnalité de \hat{H}_1 à σ_x ne devrait pas surprendre, puisque \vec{B}_1 est aligné suivant $O\hat{x}$ dans le référentiel tournant, et on aurait pu anticiper (5.33). Combinant (5.29), (5.30) et (5.33), on déduit l'expression du hamiltonien \hat{H} dans le référentiel tournant

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \delta \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x} \quad (5.34)$$

Le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$ est défini comme la différence entre la fréquence de rotation de \vec{B}_1 et la fréquence de Larmor.

5.2.2 Oscillations de Rabi

Comme \hat{H} est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution en axes tournants est $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$. Le cas le plus simple est celui de la résonance,⁶ $\delta = 0$. Dans le cas résonant, l'opérateur d'évolution se réduit à

$$\hat{U}(t) = e^{i\omega_1 t \sigma_x / 2} = I \cos \frac{\omega_1 t}{2} + i \sigma_x \sin \frac{\omega_1 t}{2} \quad (5.35)$$

Par comparaison avec (3.59), nous voyons que $\hat{U}(t)$ est l'opérateur de rotation d'un angle $\theta = -\omega_1 t$ autour de l'axe $O\hat{x}$. Supposons que nous partions au temps $t = 0$ de l'état $|\hat{\varphi}(0)\rangle = |+\rangle$; au temps t , compte tenu de $\sigma_x |+\rangle = |-\rangle$, le vecteur d'état est

$$|\hat{\varphi}(t)\rangle = \cos \frac{\omega_1 t}{2} |+\rangle + i \sin \frac{\omega_1 t}{2} |-\rangle \quad (5.36)$$

La probabilité $p_-(t)$ d'observer le spin dans l'état $|-\rangle$ est une fonction oscillante de t

$$p_-(t) = |\langle - | \hat{\varphi}(t) \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\omega_1 t}{2} \quad (5.37)$$

Le spin passe donc périodiquement d'un niveau à l'autre, et ces oscillations sont appelées *oscillations de Rabi*. À nouveau l'interprétation géométrique de (5.35) est claire : à la résonance, la précession de Larmor est de fréquence $\omega_0 = \omega$, et cette précession est exactement compensée par la rotation du référentiel. Il reste donc uniquement la précession de Larmor due à \vec{B}_1 qui s'effectue autour de $O\hat{x}$, puisque \vec{B}_1 est aligné suivant $O\hat{x}$ (figure 5.7 (a)).

Il existe deux cas particuliers importants de (5.37). Le spin initialement dans l'état $|+\rangle$ sera trouvé dans l'état $|-\rangle$ pour des temps t donnés par

$$\frac{\omega_1 t}{2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.38)$$

Si le champ de radiofréquences est appliqué pendant un temps t vérifiant (5.38), en général avec $n = 0$, on dit que l'on a appliqué une *impulsion* π . Dans l'interprétation géométrique, le spin orienté initialement suivant la direction de z positifs se retrouve dans la direction des z négatifs (figure 5.7 (a)). Lorsque

$$\frac{\omega_1 t}{2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.39)$$

on dit que l'on a appliqué une *impulsion* $\pi/2$. Le spin se retrouve alors dans une combinaison linéaire à poids égaux des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, et dans l'interprétation géométrique, le spin orienté initialement suivant Oz se retrouve suivant $O\hat{y}$ (figure 5.7 (a)).

6. Nous verrons ultérieurement dans cette sous-section la raison de cette terminologie.

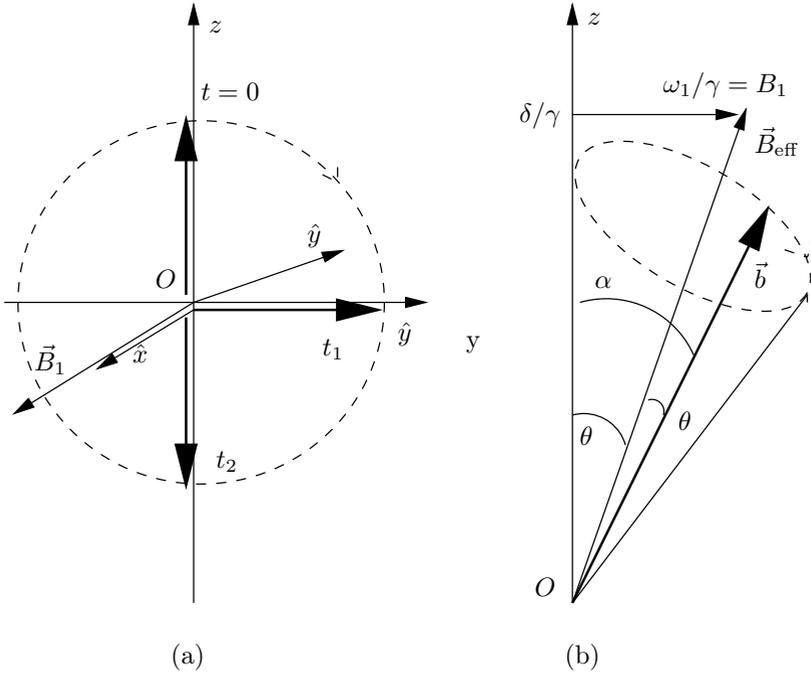


FIG. 5.7 – Schéma de l'évolution temporelle du spin dans le référentiel tournant ; le vecteur de Bloch $\vec{b} = \langle \vec{\sigma} \rangle$ est représenté par une flèche épaisse dont l'extrémité se trouve sur une sphère de rayon unité. (a) À la résonance : impulsions $\pi/2$ ($t = t_1$) et π ($t = t_2$). (b) Hors résonance : l'angle θ entre \vec{b} et \vec{B}_{eff} est constant.

Hors résonance, lorsque $\delta \neq 0$, on définit un vecteur unitaire \hat{n} par

$$\hat{n} : n_x = -\frac{\omega_1}{\Omega} \quad n_y = 0 \quad n_z = \frac{\delta}{\Omega} \quad (5.40)$$

où la fréquence Ω vaut

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2} = \sqrt{\omega_1^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (5.41)$$

Avec ces définitions, on peut écrire l'opérateur d'évolution \hat{U} sous la forme d'un opérateur de rotation, et utiliser (3.49) pour le calculer

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \exp\left(-i\frac{\Omega t}{2} [\sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z]\right) = \exp\left(-i\frac{\Omega t}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right) \\ &= I \cos \frac{\Omega t}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \sin \frac{\Omega t}{2} = I \cos \frac{\Omega t}{2} + i\left(\sigma_x \frac{\omega_1}{\Omega} - \sigma_z \frac{\delta}{\Omega}\right) \sin \frac{\Omega t}{2} \end{aligned} \quad (5.42)$$

Si l'on part au temps $t = 0$ de l'état $|+\rangle$, la probabilité d'observer le spin dans l'état $|-\rangle$ au temps t sera

$$p_-(t) = |\langle - | \hat{U}(t) | + \rangle|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad (5.43)$$

On voit que la probabilité maximale de transfert de l'état $|+\rangle$ vers l'état $|-\rangle$ pour $\Omega t/2 = \pi/2$ est donnée par une *courbe de résonance* de largeur δ

$$p_-^{\max} = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + \delta^2} = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (5.44)$$

Comme le montre la figure 5.8, les oscillations de Rabi sont maximales à la résonance, et elles diminuent rapidement d'amplitude quand δ croît. L'interprétation intuitive est claire : l'influence du champ de radiofréquences \vec{B}_1 est maximale lorsque celui-ci tourne à la même vitesse que le spin animé par précession de Larmor autour de \vec{B}_0 .

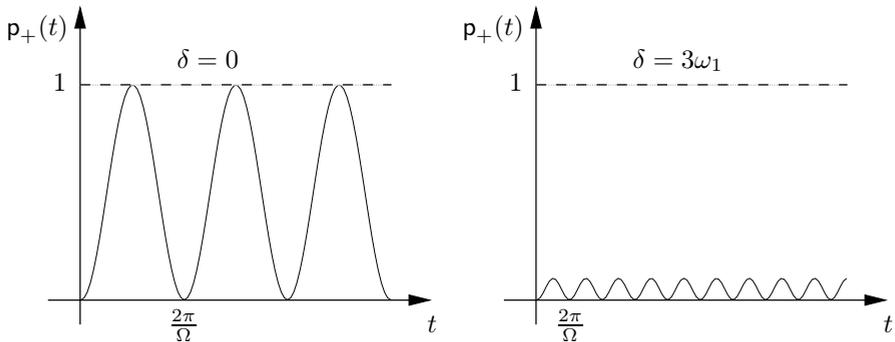


FIG. 5.8 – Oscillations de Rabi : (a) $\delta = 0$ (b) $\delta = 3\omega_1$. Dans le cas (b) la valeur maximale de $p_-(t)$ est $1/10$.

Revenons à l'interprétation géométrique de ces résultats hors résonance. Si $\vec{B}_1 = 0$, la précession de Larmor s'effectue dans le référentiel tournant à la vitesse angulaire $\delta = \omega - \omega_0$, et le champ magnétique effectif \vec{B}_{eff} se compose d'un champ vertical de module δ/γ et d'un champ horizontal \vec{B}_1 de module ω_1/γ (figure 5.7 (b)). La précession de Larmor s'effectue autour du champ \vec{B}_{eff} avec la fréquence angulaire Ω (5.41). Un petit exercice de géométrie (exercice 5.5.6) permet alors de retrouver (5.43).

5.2.3 Principes de la RMN et de l'IRM

La RMN est utilisée principalement pour déterminer la structure de molécules d'intérêt chimique ou biologique et pour l'étude de la matière condensée solide ou liquide. Une description détaillée du fonctionnement de la RMN nous

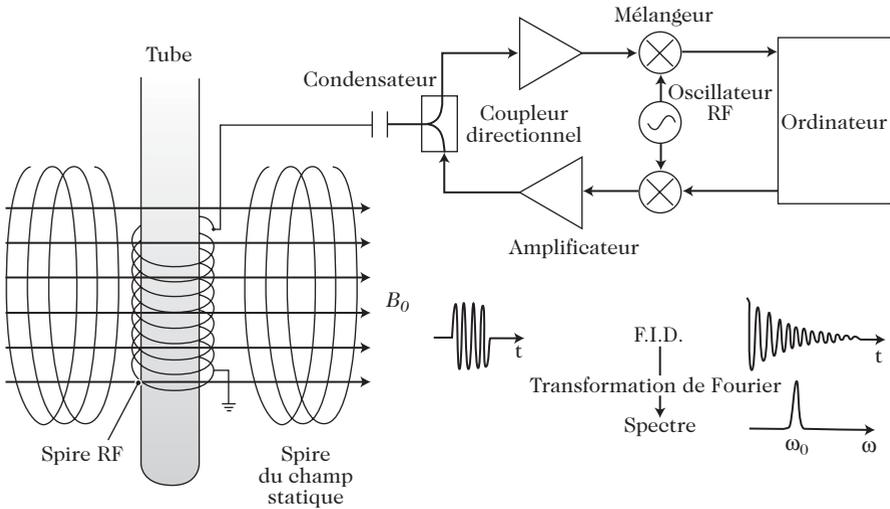


FIG. 5.9 – Schéma de principe d'une RMN. Le champ statique \vec{B}_0 est horizontal et le champ de radio-fréquences est généré par le solénoïde vertical. Ce solénoïde sert aussi à détecter le signal (FID = *Free Induction Decay*). L'impulsion RF et le signal sont dessinés en bas à gauche de la figure. On notera la décroissance exponentielle du signal et le pic de sa transformée de Fourier à $\omega = \omega_0$. Adapté de Nielsen et Chuang [2000].

entraînerait trop loin et nous ne ferons qu'effleurer le sujet. L'échantillon à étudier est plongé dans un champ uniforme \vec{B}_0 de quelques teslas, le champ maximum accessible aujourd'hui étant d'une vingtaine de teslas (figure 5.9). Si l'on veut caractériser une RMN, on donne plutôt la fréquence⁷ de résonance $\nu_0 = \omega_0/(2\pi) = \gamma B_0/(2\pi)$ pour un proton : un champ de 1 tesla correspond à une fréquence $\simeq 42.5$ MHz, et on parlera donc d'une RMN de 600 MHz si le champ B_0 vaut 14 teslas. En raison de la loi de Boltzmann (1.12), le niveau $|+\rangle$ est plus peuplé que le niveau $|-\rangle$, du moins si $\gamma > 0$, ce qui est le cas usuel

$$\frac{p_+(t=0)}{p_-(t=0)} = \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) \quad (5.45)$$

À la température ambiante et pour une RMN de 600 MHz, la différence de population

$$p_+ - p_- \simeq \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T}$$

entre les niveaux $|+\rangle$ et $|-\rangle$ est $\sim 5 \times 10^{-5}$.

L'application d'un champ de radiofréquences $\vec{B}_1(t)$ voisin de la résonance pendant un temps t tel que $\omega_1 t = \pi$, ou impulsion π , (*cf.* (5.38)) fait passer

7. Voir la note 23 du chapitre 1.

les spins de l'état $|+\rangle$ vers l'état $|-\rangle$, provoquant donc une *inversion de population* par rapport à celle de l'équilibre, et l'échantillon est hors équilibre. Le retour à l'équilibre est contrôlé par un temps de relaxation⁸ noté T_1 , le *temps de relaxation longitudinale*. On utilise en général une impulsion $\pi/2$, $\omega_1 t = \pi/2$. Ceci correspond géométriquement à une rotation du spin d'un angle $\pi/2$ autour d'un axe du plan xOy : si le spin est initialement parallèle à \vec{B}_0 , il se retrouve dans un plan perpendiculaire à \vec{B}_0 , un plan transversal (tandis qu'une impulsion π amène le spin dans la direction longitudinale $-\vec{B}_0$, voir la figure 5.7(a)). Le retour à l'équilibre est alors contrôlé par un temps de relaxation noté T_2 , le *temps de relaxation transversale*. En général $T_2 \ll T_1$, et le retour à l'équilibre est plus rapide pour une impulsion $\pi/2$ que pour une impulsion π : c'est pourquoi l'impulsion $\pi/2$ est préférée. Dans tous les cas le retour à l'équilibre se fait en engendrant un champ magnétique tournant à la fréquence ω_0 dû au mouvement de rotation de l'ensemble des spins qui forment un dipôle macroscopique, et l'analyse de Fourier du signal donne un spectre de fréquences qui permet de remonter à la structure de la molécule étudiée. Pour ce faire, on se fonde principalement sur les propriétés suivantes :

- La fréquence de résonance dépend des noyaux par l'intermédiaire de γ .
- Pour un même noyau, la fréquence de résonance est légèrement modifiée par l'environnement chimique de l'atome correspondant, ce que l'on peut traduire en définissant un champ magnétique effectif B'_0 agissant sur le noyau

$$B'_0 = (1 - \sigma)B_0 \quad \sigma \sim 10^{-6}$$

σ est appelé le *déplacement chimique*, et il existe des corrélations fortes entre σ et la nature du groupement chimique auquel appartient le noyau considéré.

- Les interactions entre spins nucléaires voisins provoquent un clivage des fréquences de résonance en plusieurs sous-fréquences, également caractéristiques des groupements chimiques.

Ceci est résumé dans la figure 5.10 qui donne un spectre RMN typique.

Dans le cas de l'imagerie par résonance magnétique⁹ (IRM) on s'intéresse exclusivement aux protons, contenus dans l'eau et les graisses. L'échantillon est placé dans un champ \vec{B}_0 non uniforme, ce qui fait que la fréquence de résonance dépend du point d'espace. Comme l'amplitude du signal est directement proportionnelle à la densité des spins, et donc à celle des protons, on peut en déduire, après des calculs informatiques complexes, une image tridimensionnelle de la densité d'eau dans les tissus biologiques. Actuellement la

8. Lorsque l'on applique un champ \vec{B}_0 , l'équilibre thermodynamique (5.45) ne s'établit pas instantanément, mais seulement après un temps $\sim T_1$.

9. L'adjectif nucléaire a été supprimé pour ne pas effrayer le public !

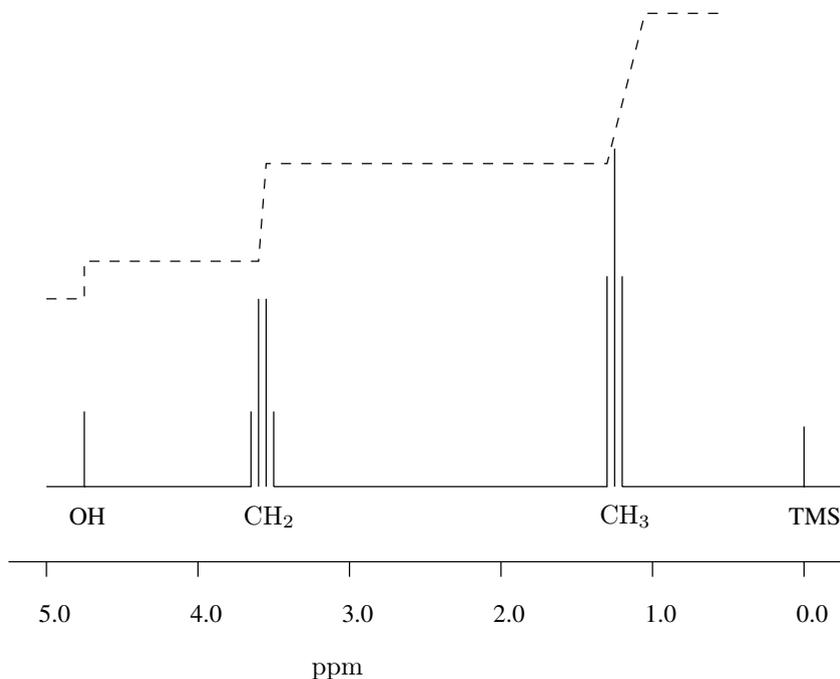


FIG. 5.10 – Spectre RMN des protons de l'éthanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ obtenu avec une RMN de 200 MHz. On observe trois pics associés au trois groupements OH, CH_3 et CH_2 . La courbe en tirets représente l'aire intégrée des signaux. Le signal TMS est un signal de référence

résolution spatiale est de l'ordre du millimètre, et on peut faire une image en 0.1 s. Ceci a permis le développement de l'IMR fonctionnelle (IMRf), grâce à laquelle peut par exemple « voir le cerveau en action » en mesurant les variations locales de débit sanguin. Les temps de relaxation longitudinale T_1 et transversale T_2 jouent un grand rôle dans l'obtention et l'interprétation des signaux de l'IMR.

Nous allons rencontrer à nouveau les oscillations de Rabi entre deux niveaux dans les deux sections suivantes. Cependant, il existe une importante différence de principe entre la RMN et les systèmes étudiés dans ces deux sections. Nous y reviendrons à la fin du § 5.4.1.

5.3 La molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac nous fournit un second exemple concret d'un système à deux niveaux que l'on peut coupler à un champ extérieur périodique.

5.3.1 La molécule d'ammoniac comme système à deux niveaux

La molécule d'ammoniac a une forme pyramidale, où l'atome d'azote occupe le sommet de la pyramide et où les trois atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral qui constitue la base de la pyramide (figure 5.11). Les mouvements possibles de cette molécule sont très variés : elle peut effectuer des mouvements de translation et de rotation dans l'espace, les atomes peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre, les électrons peuvent se trouver dans des états excités. Une fois fixés les degrés de liberté de translation, rotation et vibration pour la molécule dans son état fondamental électronique, il reste encore deux configurations possibles pour la molécule en rotation¹⁰ autour de son axe de symétrie, qui sont symétriques l'une de l'autre par réflexion par rapport à un plan (figure 5.11). Pour passer d'une configuration à l'autre, l'atome d'azote doit traverser le plan des atomes d'hydrogène. Ceci est possible grâce à un effet tunnel, que nous expliquerons au § 12.4.5. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser *uniquement* à ces deux configurations, ce qui est justifié en raison des énergies mises en jeu (*cf.* la note 11). Comme dans le cas de la molécule d'éthylène, nous utiliserons pour décrire ces deux configurations

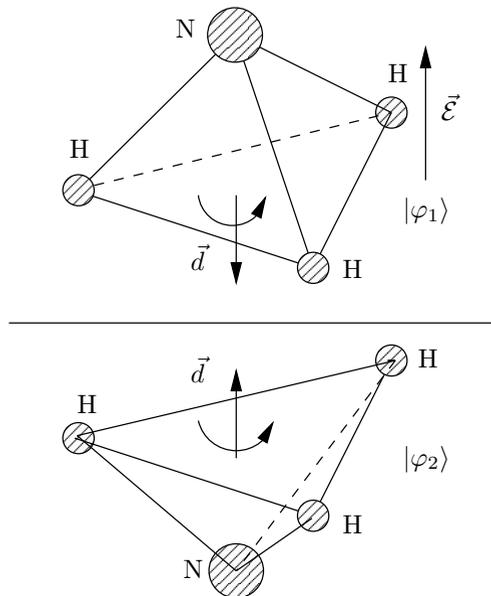


FIG. 5.11 – Les deux configurations de la molécule d'ammoniac.

10. L'importance de cette rotation pour générer deux configurations différentes est soulignée par Feynman ; dans les exposés qui ont repris ultérieurement sa présentation originale, ce mouvement de rotation a souvent été oublié. Mais si cette rotation est absente, on passe continûment d'une configuration à l'autre par une rotation dans l'espace !

un espace des états à deux dimensions : la molécule dans l'état 1 (resp. 2) de la figure 5.11 sera décrite par le vecteur de base $|\varphi_1\rangle$ (resp. $|\varphi_2\rangle$). Si l'atome d'azote ne pouvait jamais franchir le plan des atomes d'hydrogène, l'énergie des états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ serait identique, égale à E_0 . Mais il existe une amplitude non nulle pour franchir ce plan, et le hamiltonien prend la forme (5.2)

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.46)$$

avec bien sûr des valeurs de E_0 et A différentes de celles de la section précédente. La valeur de E_0 n'est pas importante pour notre discussion. En revanche il vaut la peine d'observer que la valeur de A dans (5.46) diffère de celle de (5.2) par plusieurs ordres de grandeur. En effet nous avons maintenant $2A \simeq 10^{-4}$ eV, alors que précédemment $2A$ était de l'ordre de 1 eV : ceci reflète le fait qu'il est facile à un électron π de sauter d'un atome à l'autre, alors qu'il est très difficile à l'atome d'azote de franchir le plan des atomes d'hydrogène. Cette énergie de 10^{-4} eV correspond à une fréquence de 24 GHz, ou à une longueur d'onde de 1.25 cm, dans le domaine des ondes centimétriques. Elle est très faible par rapport aux énergies d'excitation des électrons (quelques eV), faible par rapport aux énergies de vibration (~ 0.1 eV) et même de rotation¹¹ ($\sim 10^{-3}$ eV). Cette comparaison justifie l'approximation par un système à deux niveaux, car la différence entre deux niveaux de rotation successifs est de l'ordre de $10A$ (figure 5.12). Cependant la molécule n'est pas dans son niveau de rotation fondamental, car $k_B T \sim 0.025$ eV est grand par rapport à $\sim 10^{-3}$ eV : les niveaux de rotation sont thermiquement excités.

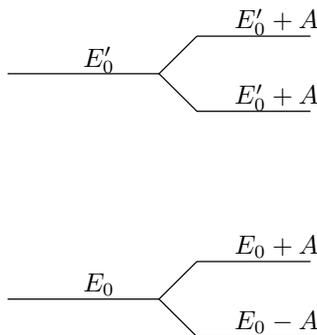


FIG. 5.12 – Clivage de deux niveaux E_0 et E'_0 .

11. La molécule d'ammoniac possède deux fréquences propres de rotation, dont une dégénérée, correspondant à des énergies de 0.8×10^{-3} eV et de 1.2×10^{-3} eV (dégénérée), et quatre modes de vibration dont deux dégénérés, l'énergie la plus faible étant de 0.12 eV. De plus il faudrait tenir compte des complications dues à la structure hyperfine.

Suivant la discussion du § 5.1.1, les niveaux d'énergie de H sont $E_0 \mp A$, correspondant aux états stationnaires (5.2) et (5.3)

$$\begin{aligned} E_0 - A : |\chi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ E_0 + A : |\chi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.47)$$

L'état symétrique $|\chi_+\rangle$ est l'état fondamental, d'énergie $(E_0 - A)$ et l'état antisymétrique $|\chi_-\rangle$ est l'état excité, d'énergie $(E_0 + A)$.

5.3.2 La molécule dans un champ électrique : le maser à ammoniac

La molécule d'ammoniac possède un moment dipolaire électrique \vec{d} qui, par symétrie, est perpendiculaire au plan des atomes d'hydrogène. Comme les atomes d'hydrogène ont tendance à perdre leurs électrons et l'atome d'azote à les attirer, ce moment dipolaire est orienté de l'atome d'azote vers le plan des atomes d'hydrogène (figure 5.11). Plaçons la molécule dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ dirigé suivant Oz . L'énergie d'un dipôle classique \vec{d} dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ (nous utilisons une lettre calligraphiée pour le champ électrique, afin d'éviter toute confusion avec l'énergie) est

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad (5.48)$$

En mécanique quantique, le moment dipolaire est un opérateur \vec{D} , qui s'exprime en fonction des charges et des opérateurs position des différentes particules chargées. Nous admettrons que la restriction de \vec{D} à notre sous-espace à deux dimensions est donnée par la matrice suivante dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$

$$-\vec{D} \rightarrow \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix} \quad -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}} \rightarrow \begin{pmatrix} d\mathcal{E} & 0 \\ 0 & -d\mathcal{E} \end{pmatrix}$$

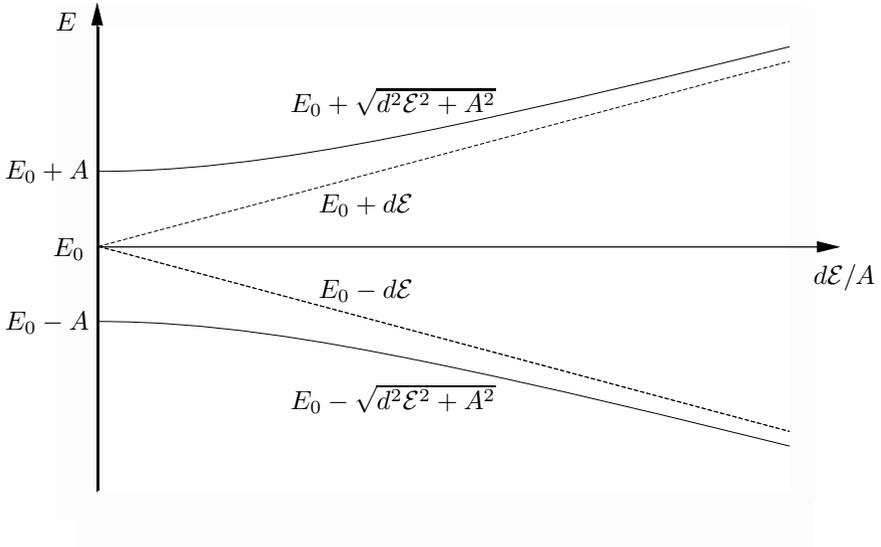
Ceci correspond bien au schéma de la figure 5.11 : en effet, l'énergie de l'état $|\varphi_1\rangle$ de la figure 5.11 est $+d\mathcal{E}$ car le moment dipolaire est antiparallèle au champ, et celle de l'état $|\varphi_2\rangle$ est $-d\mathcal{E}$ car le moment dipolaire est parallèle au champ. En dernier ressort, la forme matricielle de ce moment dipolaire est justifiée par l'accord avec l'expérience. Le hamiltonien prend donc la forme

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + d\mathcal{E} & -A \\ -A & E_0 - d\mathcal{E} \end{pmatrix} \quad (5.49)$$

Nous examinons d'abord le cas d'un champ électrique *statique*. Le hamiltonien est alors indépendant du temps. Le calcul des valeurs propres est immédiat¹²

$$\det \begin{pmatrix} E_0 + d\mathcal{E} - E & -A \\ -A & E_0 - d\mathcal{E} - E \end{pmatrix} = (E - E_0)^2 - (d\mathcal{E})^2 - A^2 = 0$$

12. On peut aussi utiliser les résultats du § 2.3.2.

FIG. 5.13 – Valeurs de l'énergie en fonction du champ électrique \mathcal{E} .

soit

$$E_{\pm} = E_0 \mp \sqrt{A^2 + (d\mathcal{E})^2} \quad (5.50)$$

Ces valeurs propres sont représentées sur la figure 5.13 en fonction de \mathcal{E} . Si $d\mathcal{E} \gg A$, les énergies sont $\simeq E_0 \pm d\mathcal{E}$ et les vecteurs propres correspondants approximativement $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. En pratique on se trouve dans le cas opposé : $d\mathcal{E} \ll A$. On peut alors développer la racine carrée dans (5.50)

$$E_{\pm} \simeq E_0 \mp A \mp \frac{1}{2} \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{A} \quad (5.51)$$

À des termes d'ordre $d\mathcal{E}/(2A)$ près (*cf.* exercice 5.5.4), les vecteurs propres sont $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$. Si le champ électrique n'est pas uniforme, la molécule sera soumise à une force

$$\vec{F}_{\pm} = -\vec{\nabla} E_{\pm} = \pm \frac{d^2}{2A} \vec{\nabla} \mathcal{E}^2 \quad (5.52)$$

Comme dans l'expérience de Stern-Gerlach, on pourra séparer expérimentalement les états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ du hamiltonien (5.18) en utilisant un champ électrique inhomogène¹³ : voir la figure 5.15.

Le schéma de niveaux que nous venons de trouver est très général : il met en évidence le phénomène de *répulsion des niveaux* (figure 5.14). Si $d\mathcal{E} \gg A$, les états propres du hamiltonien sont $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. Pour $\mathcal{E} = 0$, ces deux niveaux devraient se croiser et échanger leur stabilité. Il n'en est rien, à cause

13. En pratique le champ est choisi tel que l'état $|\chi_-\rangle$ soit focalisé et l'état $|\chi_+\rangle$ défocalisé : *cf.* Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 6.

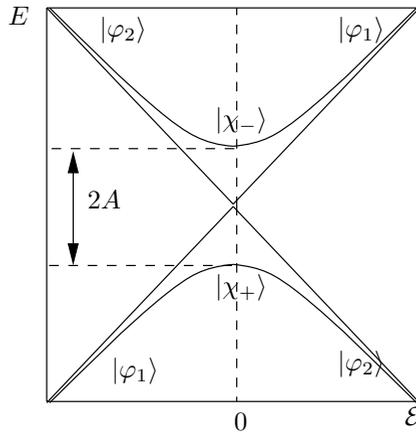


FIG. 5.14 – Le phénomène de répulsion des niveaux.

de la valeur non nulle de A , qui entraîne que les deux niveaux ne se croisent pas.

Supposons maintenant que le champ électrique est un champ *oscillant*

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad \mathcal{E}_0 \text{ réel} > 0 \quad (5.53)$$

Le hamiltonien dépend explicitement du temps. Il sera commode de prendre comme vecteurs de base les états stationnaires (5.47) $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$ du hamiltonien (5.46), plutôt que $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. Le hamiltonien (5.49) devient dans cette nouvelle base

$$H(t) = \begin{pmatrix} E_0 - A & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & E_0 + A \end{pmatrix} = E_0 I - A \sigma_z + d\mathcal{E}_0 \sigma_x \cos \omega t = E_0 I + H_0 + W(t) \quad (5.54)$$

Ce hamiltonien est manifestement très semblable à celui du § 5.2.1, et nous pourrions utiliser les mêmes techniques pour résoudre l'équation d'évolution (4.11). Toutefois, afin d'illustrer l'utilisation du point de vue de l'interaction, nous allons plutôt choisir ce point de vue en prenant pour hamiltonien H_0 (*cf.* § 4.2.5, le terme $E_0 I$ ne joue aucun rôle)

$$H_0 = -A \sigma_z = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z \quad (5.55)$$

Nous avons posé $\omega_0 = 2A/\hbar$, qui représente physiquement la fréquence angulaire $\simeq 1.5 \times 10^{12} \text{ rad.s}^{-1}$ d'une onde électromagnétique émise lorsque la molécule passe du niveau excité d'énergie $(E_0 + A)$ au niveau fondamental d'énergie $(E_0 - A)$: $2A$ est l'énergie du photon émis dans cette transition. La fréquence ω_0 est à nouveau appelée fréquence de résonance. Suivant (4.40),

nous appelons $|\tilde{\varphi}(t)\rangle$ le vecteur d'état dans le point de vue de l'interaction

$$|\tilde{\varphi}(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} |\varphi(t)\rangle = e^{-i\hbar\omega_0\sigma_z t/2} |\varphi(t)\rangle \quad |\tilde{\varphi}(t=0)\rangle = |\varphi(t=0)\rangle \quad (5.56)$$

Comparant avec (5.28), nous voyons que nous avons choisi un référentiel tournant dans le sens rétrograde avec la vitesse angulaire ω_0 , et non ω . Les deux référentiels tournants coïncident à la résonance. Pour transformer le terme d'interaction W , nous récrivons d'abord

$$W(t) = d\mathcal{E}_0(\sigma_+ + \sigma_-) \cos \omega t = \frac{1}{2} d\mathcal{E}_0 [\sigma_+ e^{i\omega t} + \sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{i\omega t} + \sigma_- e^{-i\omega t}]$$

et nous utilisons l'analogie de (5.32)

$$\tilde{\sigma}_{\pm}(t) = e^{\mp i\omega_0 t} \sigma_{\pm} \quad (5.57)$$

pour obtenir

$$\tilde{W}(t) = \frac{1}{2} d\mathcal{E}_0 [\sigma_+ e^{i\delta t} + \sigma_- e^{-i\delta t} + \sigma_+ e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \sigma_- e^{i(\omega+\omega_0)t}] \quad (5.58)$$

À la résonance, les deux premiers termes du crochet redonnent le résultat (5.34) de la RMN, mais deux termes supplémentaires ont fait leur apparition. En fait, ceci est dû au choix d'une polarisation linéaire pour $\vec{\mathcal{E}}$, car dans le cas d'une polarisation circulaire, nous serions retombés sur les équations du § 5.2.1. Dans le cas de la RMN, nous aurions également vu apparaître ces termes supplémentaires si nous avions choisi un champ de radiofréquences \vec{B}_1 orienté suivant un axe fixe (exercice 5.5.6)

$$\vec{B}_1(t) = 2\hat{x} B_1 \cos \omega t$$

Ces termes supplémentaires peuvent être négligés si deux conditions sont réalisées.

- La perturbation apportée par le champ électrique est faible : $d\mathcal{E}_0 \ll A$, ou de façon équivalente, $d\mathcal{E}_0/\hbar \ll \omega_0$. La fréquence de Rabi est cette fois la quantité $\omega_1 = d\mathcal{E}_0/\hbar$. La condition de champ faible est donc aussi $\omega_1 \ll \omega_0$, ce qui est – presque – toujours réalisé en pratique.
- La deuxième hypothèse est que la fréquence du champ électrique soit proche de la résonance : $\omega \simeq \omega_0$, condition qui s'exprime en fonction du désaccord $\delta = (\omega - \omega_0)$ et qui s'écrit plus précisément $|\delta| \ll \omega_0$. Dans ces conditions, les termes en $\exp[\pm i(\omega + \omega_0)t]$ de (5.58) varient très rapidement par rapport aux termes en $\exp(\pm i\delta t)$ et leur effet moyenné dans le temps est négligeable.

Si ces deux conditions sont vérifiées, on peut alors négliger les termes en $\exp[\pm i(\omega + \omega_0)t]$ dans (5.58). Cette approximation est appelée *approximation*

séculaire¹⁴, et le hamiltonien dans le point de vue de l'interaction est

$$\boxed{\tilde{W}(t) = \frac{1}{2} \hbar \omega_1 [\sigma_+ e^{i\delta t} + \sigma_- e^{-i\delta t}]} \quad (5.59)$$

$\tilde{W}(t)$ est indépendant du temps à la résonance

$$\tilde{W}_{\text{res}}(t) = \tilde{W}_{\text{res}} = \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x \quad (5.60)$$

Plaçons-nous exactement à la résonance en prenant la fréquence du champ électrique égale à la fréquence de la transition : $\omega = \omega_0$. Supposons par exemple qu'au temps $t = 0$ la molécule se trouve dans l'état $|\chi_-\rangle$ ¹⁵ d'énergie $(E_0 + A)$. Pour calculer la probabilité p_{\pm} de trouver au temps t la molécule dans l'état $|\chi_{\pm}\rangle$, il suffit de transposer (5.37)

$$\begin{aligned} p_-(t) &= |\langle \chi_- | \varphi(t) \rangle|^2 = |c_-(t)|^2 = \cos^2 \left(\frac{\omega_1 t}{2} \right) \\ p_+(t) &= |\langle \chi_+ | \varphi(t) \rangle|^2 = |c_+(t)|^2 = \sin^2 \left(\frac{\omega_1 t}{2} \right) \end{aligned} \quad (5.61)$$

La molécule passe de l'état $|\chi_-\rangle$ à l'état $|\chi_+\rangle$ avec une fréquence angulaire $\omega_1/2 = d\mathcal{E}_0/(2\hbar)$.

Après avoir mis la molécule dans l'état $|\chi_-\rangle$ grâce au filtrage décrit dans la sous-section précédente, on la fait passer dans une cavité où règne un champ oscillant à la fréquence de résonance (figure 5.15). La molécule franchit la cavité en un temps T ; si ce temps est ajusté de sorte que

$$\frac{d\mathcal{E}_0 T}{2\hbar} = \frac{\pi}{2}$$

à la sortie de la cavité toutes les molécules sont passées dans l'état $|\chi_+\rangle$. Par conservation de l'énergie, les molécules fournissent de l'énergie au champ électromagnétique : ce processus est appelé *émission stimulée (ou induite)*. Si les molécules s'étaient trouvées dans l'état $|\chi_+\rangle$, elles auraient absorbé de l'énergie en l'empruntant au champ électromagnétique pour passer dans l'état $|\chi_-\rangle$, processus appelé *absorption stimulée*.

Le processus d'émission stimulée est un processus susceptible d'amplifier un champ électromagnétique, pourvu que l'on soit capable de produire les molécules dans un état excité, c'est-à-dire d'obtenir une *inversion de population*¹⁶. Le dispositif expérimental représenté schématiquement sur la figure 5.15 réalise cette amplification : les molécules sélectionnées dans l'état

14. Ou approximation des ondes tournantes, ou encore approximation quasi-résonante.

15. Dans le cas de la RMN, on fait passer le spin de l'état d'énergie la plus basse vers celui d'énergie la plus haute, alors que pour l'application au maser, nous nous intéressons à la situation inverse.

16. Comme nous l'avons déjà vu en (5.45), si E_0 est l'énergie de l'état fondamental et E_1 celle de l'état excité, le rapport des probabilités p_1/p_0 de trouver un système atomique ou moléculaire dans un état E_1 ou E_0 est donné par la loi de Boltzmann : $p_1/p_0 = \exp[(E_0 - E_1)/k_B T] < 1$. Il faut donc aller à l'encontre de l'équilibre thermique pour obtenir une telle inversion de population.

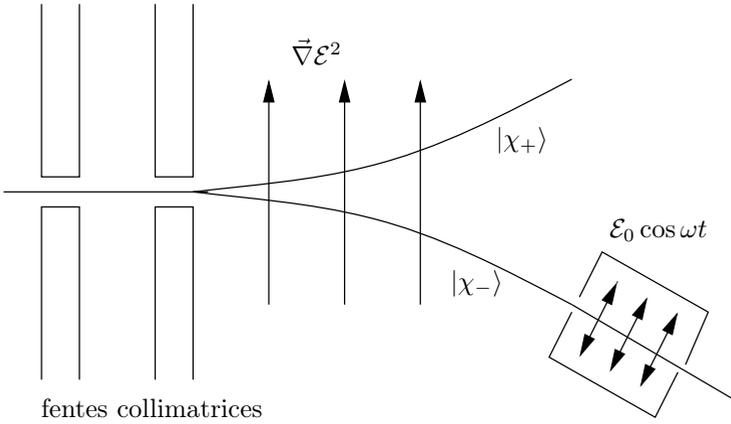


FIG. 5.15 – Maser à ammoniac.

$|\chi_{-}\rangle$ traversent une cavité où règne un champ électrique oscillant à la fréquence de résonance et de longueur convenablement ajustée. Ce dispositif est un prototype de maser¹⁷.

5.3.3 Transitions hors résonance

Nous nous plaçons maintenant hors résonance : $\omega \simeq \omega_0$ mais $\omega \neq \omega_0$, et nous partons par exemple au temps $t = 0$ d'une molécule dans l'état $|\chi_{+}\rangle$. Nous souhaitons calculer la probabilité $p(\omega; t)$ de trouver la molécule dans l'état $|\chi_{-}\rangle$ au temps t . À l'approximation séculaire, la résolution des équations d'évolution donne le résultat (5.43) que nous écrivons sous la forme développée¹⁸

$$p(\omega; t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \right) \quad (5.62)$$

Rappelons que la fréquence de Rabi $\omega_1 = d\mathcal{E}_0/\hbar$. Bien que nous ayons été capables d'écrire une solution exacte, il est utile de donner une solution approchée simple des équations d'évolution lorsque la condition

$$\frac{d\mathcal{E}_0 t}{\hbar} \ll 1 \quad t \ll \frac{\hbar}{d\mathcal{E}_0} = \tau_2 \quad (5.63)$$

17. Maser est un acronyme pour *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation* et laser pour *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*.

18. Il est facile de voir que les équations d'évolution pour les composantes $\tilde{c}_{\pm}(t)$ dans le point de vue de l'interaction sont, à l'approximation séculaire,

$$i \frac{d\tilde{c}_{\pm}(t)}{dt} = \frac{1}{2} \omega_1 \tilde{c}_{\mp}(t) e^{\pm i\delta t}$$

est satisfaite, c'est-à-dire *pour des temps suffisamment courts*. L'intérêt de cette solution approchée est qu'elle se retrouve dans de nombreux problèmes qui ne peuvent pas être résolus exactement et elle prépare le terrain pour le chapitre 9. Nous avons à $t = 0$, pour les composantes $\tilde{c}_\pm(t)$ de $|\tilde{\varphi}(t)\rangle$

$$\tilde{c}_+ = 1 \quad \tilde{c}_- = 0$$

Nous nous intéressons à un processus où l'absorption de rayonnement électromagnétique permet de passer du niveau fondamental au niveau excité. Dans la résolution des équations d'évolution, nous pouvons supposer $\tilde{c}_+ \simeq 1$: en effet, en raison de la condition (5.63), \tilde{c}_+ n'a pas le temps de varier de façon appréciable. La solution approximative de l'équation donnant \tilde{c}_- est alors évidente

$$\tilde{c}_-(t) \simeq \frac{\omega_1}{2i} \int_0^t dt' \exp[-i(\omega - \omega_0)t'] = -\frac{\omega_1}{2} \left[\frac{1 - \exp[-i(\omega - \omega_0)t]}{\omega - \omega_0} \right] \quad (5.64)$$

ce qui donne pour la probabilité de transition à une fréquence ω , $p(\omega; t)$

$$p(\omega; t) = |\tilde{c}_-(t)|^2 = \frac{1}{4} \omega_1^2 t^2 \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \quad (5.65)$$

Il semble donc que $p(\omega; t) \propto t^2$ pour $|\delta|t \ll 1$, mais ceci est dû au fait que le spectre de fréquences de l'onde électromagnétique contient une fréquence unique ω , ce qui est irréaliste. En réalité on a toujours un spectre continu de fréquences, et nous allons en tenir compte. Le rapport entre ce résultat et celui obtenu à la résonance est

$$\frac{p(\omega; t)}{p(\omega_0; t)} = f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2}$$

La fonction $f(\omega - \omega_0; t)$ est tracée sur la figure 5.16 en fonction de ω . Elle présente un pic aigu à $\omega = \omega_0$, de largeur $\sim 2\pi/t$. Compte tenu de

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$$

l'aire sous la courbe est $2\pi/t$ et $f(\omega - \omega_0; t)$ est approximativement un delta de Dirac

$$f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \simeq \frac{2\pi}{t} \delta(\omega - \omega_0) \quad (5.66)$$

Ces résultats nous permettent de calculer le taux de transition de l'état $|\chi_+\rangle$ vers l'état $|\chi_-\rangle$ dû à l'absorption de rayonnement électromagnétique par la molécule dans son état fondamental¹⁹. Le flux d'énergie incident \mathcal{I} d'une onde

19. Plus précisément, il s'agit de l'ensemble des transitions d'énergie $(E_0 - A)$ à $(E_0 + A)$ (figure 5.12), ce qui suppose de sélectionner les molécules dans l'état $(E_0 - A)$ par le mécanisme décrit au § 5.2.2.

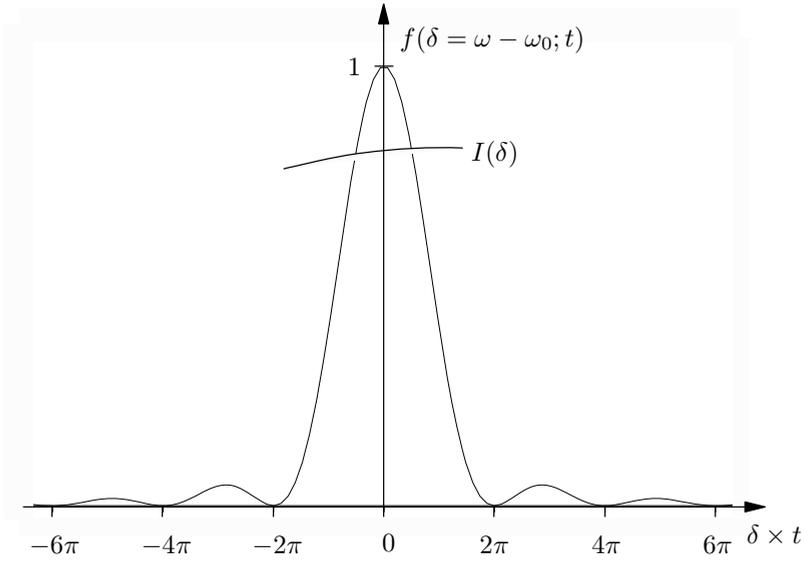


FIG. 5.16 – La fonction $f(\omega - \omega_0; t)$ définie en (5.66).

électromagnétique est donné par le vecteur de Poynting $\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$

$$\mathcal{I} = \varepsilon_0 c^2 \langle \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}} \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \mathcal{E}_0^2 \quad (5.67)$$

où $\langle \bullet \rangle$ représente une moyenne temporelle et le champ électrique est de la forme (5.53). Dans ces conditions

$$p(\omega; t) = \left(\frac{d \mathcal{E}_0}{2\hbar} \right)^2 t^2 f(\omega - \omega_0; t) = 2\pi \left(\frac{d^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 c} \right) \mathcal{I} t^2 f(\omega - \omega_0; t) \quad (5.68)$$

Ainsi que nous l'avons déjà signalé, la fréquence du champ électrique n'est pas exactement fixée, mais s'étale sur un spectre de fréquences $\Delta\omega$. Soit $\mathcal{I}(\omega)$ l'intensité par unité de fréquence et supposons que $\Delta\omega \gg \pi/t$ (figure 5.16) : la probabilité de transition intégrée sur ω est alors

$$\begin{aligned} p(t) &= 2\pi \left(\frac{d^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 c} \right) t^2 \int_0^\infty d\omega \mathcal{I}(\omega) f(\omega - \omega_0; t) \\ &\simeq 4\pi^2 \left(\frac{d^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) t \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'approximation (5.66) pour $f(\omega - \omega_0; t)$. Le fait remarquable est que $p(t)$ est proportionnel à t (et non à t^2 !), et $p(t)/t$ peut

s'interpréter comme une *probabilité de transition par unité de temps* Γ

$$\Gamma = \frac{1}{t} p(t) = 4\pi^2 \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) \quad (5.69)$$

La proportionnalité de la probabilité de transition à d^2 et à \mathcal{I} est une caractéristique de la plupart des processus d'absorption du rayonnement électromagnétique par un système atomique ou moléculaire. Les conditions de validité de l'approximation sont (i) $t \gg \tau_1 \sim 1/\Delta\omega$ et (ii) $p(t) \ll 1$ c'est-à-dire $t \ll \tau_2$ (cf. (5.63)). Il faut donc encadrer le temps t par

$$\tau_1 \sim \frac{1}{\Delta\omega} \ll t \ll \tau_2 \sim \frac{\hbar}{d\mathcal{E}_0} = \frac{1}{\omega_1} \quad (5.70)$$

Cette inégalité implique $\omega_1 \ll \Delta\omega$.

5.4 Atome à deux niveaux

5.4.1 Absorption et émission de photons

Le calcul que nous venons de présenter a jeté les bases d'une théorie générale de l'absorption et de l'émission de rayonnement électromagnétique par un système atomique ou moléculaire, aux restrictions suivantes près.

- L'approximation par un système à deux niveaux doit être justifiée : ce sera le cas si l'on s'intéresse uniquement à des transitions entre deux niveaux séparés par une énergie $\hbar\omega_0$ et à un champ électromagnétique de fréquence $\omega \simeq \omega_0$, c'est-à-dire au voisinage de la résonance. Par convention un des deux états, celui de plus basse énergie, sera noté $|g\rangle$ (il s'agit souvent de l'état fondamental), et le second sera noté $|e\rangle$ (état excité : figure 5.17). Dans le cas d'un atome, cette approximation est appelée *approximation de l'atome à deux niveaux*, qui fournit un modèle de base pour la physique atomique et les lasers.

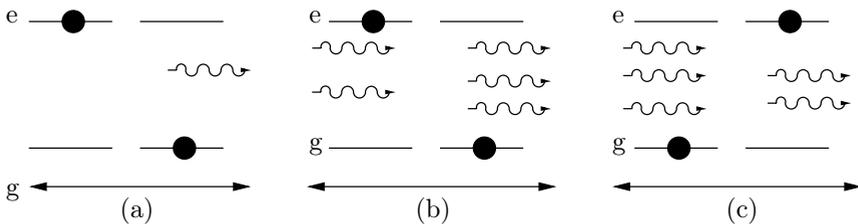


FIG. 5.17 – (a) Émission spontanée. (b) Émission stimulée. (c) Absorption.

- La transition doit être du type *dipolaire électrique*, c'est-à-dire contrôlée par l'élément de matrice de l'opérateur moment dipolaire électrique \bar{D} entre les deux niveaux, et la condition $\omega_1 \ll \omega_0$ doit être vérifiée.
- Le champ électromagnétique est considéré comme un champ classique. Le traitement que nous venons de donner est appelé « semi-classique » : l'atome est traité comme un système quantique, mais le champ reste classique. L'aspect « photon » du champ électromagnétique est donc ignoré, et on ne peut pas en principe rendre compte de l'émission spontanée de rayonnement par un atome dans un état excité : on peut espérer au mieux en donner un traitement heuristique.
- Les résultats du § 5.3.3 doivent être modifiés pour tenir compte de la durée de vie finie de l'état excité (section 15.5).

Lorsqu'un atome à deux niveaux interagit avec un champ électromagnétique, en pratique aujourd'hui le champ d'un laser, la probabilité d'absorption se calcule selon le schéma du § 5.3.3, mais les ordres de grandeur sont tout à fait différents de ceux de la molécule d'ammoniac. En reprenant un exemple déjà mentionné au § 1.5.3, la différence d'énergie $\hbar\omega_0$ entre l'état fondamental et le premier niveau excité du rubidium est de 1.6 eV, correspondant à une longueur d'onde de 0.78 μm , à la limite de l'infrarouge. Cet ordre de grandeur est typique de la physique atomique : les transitions généralement utilisées sont dans le domaine visible, ou bien dans le proche ultraviolet ou le proche infrarouge.

Nous avons déjà souligné que l'émission spontanée n'était pas en principe décrite par le traitement semi-classique, puisque l'on passe d'un état initial à zéro photon à un état final à un photon : un photon est *créé* au moment de la désexcitation de l'atome. Seule une théorie quantique du champ électromagnétique permet de décrire l'émission spontanée de façon rigoureuse. Bien que notre traitement classique du champ électromagnétique ne nous autorise pas une interprétation en termes de photons, nous nous risquons néanmoins à décrire les processus du § 5.3.3 en utilisant ce concept : par exemple nous interpréterons le gain d'énergie du champ comme une augmentation du nombre de photons dans la cavité. Le processus

$$|\chi_{-}\rangle + n \text{ photons} \rightarrow |\chi_{+}\rangle + (n + 1) \text{ photons} \quad (5.71)$$

représente donc l'émission stimulée. L'absorption stimulée est le processus inverse de (5.45)

$$|\chi_{+}\rangle + n \text{ photons} \rightarrow |\chi_{-}\rangle + (n - 1) \text{ photons} \quad (5.72)$$

Enfin l'émission spontanée d'un photon se produit quand le niveau excité $|\chi_{-}\rangle$ se désexcite en l'absence de champ électromagnétique

$$|\chi_{-}\rangle + 0 \text{ photon} \rightarrow |\chi_{+}\rangle + 1 \text{ photon} \quad (5.73)$$

Ces processus sont représentés schématiquement sur la figure 5.17. Il faut bien faire la différence entre l'émission stimulée, qui est cohérente avec l'onde incidente et est proportionnelle à l'intensité incidente, et l'émission spontanée qui est aléatoire, sans relation de phase avec le champ appliqué et n'est pas influencée par les conditions externes²⁰.

La nécessité de l'émission spontanée a été démontrée pour la première fois par Einstein. Examinons une collection d'atomes à deux niveaux E_1 et E_2 , $E_1 < E_2$, placés dans une cavité à la température T . Il règne dans cette cavité un rayonnement donné par la loi de Planck (1.22). Si N est le nombre total d'atomes et $N_1(t)$, $N_2(t)$ le nombre d'atomes dans les états E_1 et E_2

$$N_1(t) + N_2(t) = N = \text{cste}$$

en supposant que seuls les états E_1 et E_2 sont peuplés de façon appréciable²¹. Les nombres $N_1(t)$ et $N_2(t)$ vérifient les équations cinétiques

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = (-AN_1 + BN_2)\epsilon(\omega) \quad (5.74)$$

où $\hbar\omega = E_2 - E_1$; $A\epsilon(\omega)$ est le taux de transition $E_1 \rightarrow E_2$ par unité de temps dû à l'absorption stimulée dans l'état E_1 et $B\epsilon(\omega)$ le taux de transition $E_2 \rightarrow E_1$ par unité de temps dû à l'émission stimulée. Ces taux sont proportionnels à la densité d'énergie $\epsilon(\omega)$. À l'équilibre

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = 0$$

et le rapport des populations est donné par la loi de Boltzmann (1.12) d'où

$$\frac{A}{B} = \frac{N_1^{\text{eq}}}{N_2^{\text{eq}}} = \exp\left(-\frac{E_1 - E_2}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (5.75)$$

Ce résultat n'est pas physiquement acceptable, car A et B ne peuvent dépendre que des caractéristiques de l'interaction du champ électromagnétique avec l'atome, et non de la température. Il faut corriger (5.75) pour tenir compte de l'émission spontanée, *indépendante* de $\epsilon(\omega)$

$$\frac{dN_1}{dt} = (-AN_1 + BN_2)\epsilon(\omega) + B'N_2 \quad (5.76)$$

La condition $dN_1/dt = 0$ jointe à la condition d'équilibre de Boltzmann donne pour $\epsilon(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = \frac{B'}{AN_1/N_2 - B} = \frac{B'}{A \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - B} \quad (5.77)$$

20. Sauf cas exceptionnel : si l'atome est piégé entre des miroirs hautement réfléchissants et à très basse température, il est possible de modifier l'émission spontanée. C'est ce que l'on appelle l'électrodynamique en cavité : voir l'exercice 11.6.10, et pour plus de détails Grynberg *et al.*[1997], complément VI.1 ou Haroche et Raimond [2006], chapitre 3.

21. Ce sera le cas si par exemple les autres états E_n sont tels que $E_n - E_1 \gg E_2 - E_1$ et $E_n - E_1 \gg k_B T$.

La comparaison avec (1.22) montre que $A = B$ et que

$$\frac{B'}{A} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$$

On remarque que l'on aurait aussi bien pu utiliser dans le raisonnement la densité de photons $n(\omega) = \epsilon(\omega)/\hbar\omega$ ou toute quantité proportionnelle à la densité d'énergie $\epsilon(\omega)$, au prix d'une simple redéfinition de A et B . Calculons explicitement B' ; $\epsilon(\omega)$ est une densité d'énergie par unité de fréquence, et l'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ dans (5.67) est reliée à $\epsilon(\omega)$ par

$$\mathcal{I}(\omega) = c\epsilon(\omega)$$

ce qui donne par comparaison avec (5.69) la probabilité d'absorption par unité de temps

$$A = 4\pi^2 c \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 c} \right)$$

Pour obtenir la probabilité d'émission spontanée B' , il faut prendre en compte une moyenne angulaire. Supposons que le dipôle oscille dans une direction fixe, par exemple Oz . Le produit scalaire $\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}$ fait intervenir la polarisation $\vec{e}_s(\vec{k})$ du photon émis de vecteur d'onde \vec{k} ; $s = 1, 2$ est un indice de polarisation. La polarisation est orthogonale au vecteur d'onde \vec{k} du photon, $\vec{e}_s \cdot \vec{k} = 0$, et on doit intégrer sur tous les angles d'émission. Il faut donc prendre la moyenne

$$\left\langle \left(\hat{z} \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_k \left(\hat{z} \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) \right)^2$$

Comme \vec{e}_1, \vec{e}_2 et \hat{k} forment un trièdre

$$(\hat{z} \cdot \vec{e}_1)^2 + (\hat{z} \cdot \vec{e}_2)^2 = 1 - (\hat{z} \cdot \hat{k})^2 = \sin^2 \theta$$

où θ est l'angle entre Oz et \vec{k} . La moyenne angulaire vaut

$$\langle \sin^2 \theta \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_k \sin^2 \theta = \frac{1}{3}$$

Remplaçant ω par ω_0 , on en déduit la probabilité d'émission spontanée pour une transition dipolaire électrique

$$\boxed{B' = \frac{\hbar\omega_0^3}{3\pi^2 c^3} A = \frac{4\omega_0^3}{3c} \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)} \quad (5.78)$$

Dans le cas de la physique atomique, un ordre de grandeur du moment dipolaire d est $d \sim q_e a$, où a est le rayon de l'orbite électronique, et on a l'estimation

$$B' \sim \alpha \frac{a^2 \omega_0^3}{c^2} \sim \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right) \quad (5.79)$$

où $\alpha = q_e^2 / (4\pi\epsilon_0\hbar c)$ est la constante de structure fine. Cette estimation est en accord avec (1.51), qui était fondé sur le calcul classique du rayonnement. Un calcul complet de B' sera donné au § 15.3.4, où nous reviendrons sur (5.78).

Bien que la RMN et les atomes à deux niveaux exhibent des analogies remarquables, et bien que le traitement mathématique soit identique, il n'existe pas moins une importante différence de principe entre les deux cas. La mesure en RMN n'est pas une mesure projective du type défini en (4.7), mais elle utilise un signal *collectif* construit par un nombre macroscopique ($\sim 10^{20}$) de molécules. L'énergie du photon émis dans la transition entre les deux niveaux Zeeman du spin nucléaire, de l'ordre de $1\mu\text{eV}$, est bien trop faible pour être détectée dans une molécule isolée, et une autre conséquence est que l'émission spontanée est négligeable, en raison de sa dépendance en ω_0^3 . Le détecteur RMN est une bobine enroulée autour de l'échantillon (figure 5.9). L'aimantation tournante induit une force électromotrice qui est détectée dans la bobine, et cette détection est un processus qui se décrit classiquement.

5.4.2 Principes du laser

L'objectif de cette sous-section n'est évidemment pas de donner une vue générale des lasers et de leurs applications²², mais de montrer comment les processus physiques décrits dans la sous-section précédente sont mis en œuvre dans cet instrument remarquable qu'est le laser. Il s'agit d'exploiter le processus d'émission stimulée, et, ainsi que nous l'avons vu, il est nécessaire d'obtenir une inversion de population. Un laser doit comprendre en général :

- Un milieu actif qui joue le rôle d'amplificateur optique.
- Une source d'énergie qui permet d'exciter le milieu actif et de réaliser l'inversion de population par un processus dit de « pompage optique ».
- Une cavité résonante²³ linéaire ou en anneau (figure 5.18) qui sélectionne les modes amplifiés. Un des miroirs de la cavité est partiellement réfléchissant afin qu'une partie du rayonnement lumineux puisse être extraite de la cavité. Le laser est un milieu ouvert, et donc dissipatif. C'est en fait un convertisseur d'énergie de pompage en énergie électromagnétique.

Dans le cas de cavité en anneau de la figure 5.18, le champ électrique doit être identique à lui-même lorsque la lumière a fait un tour complet, et les longueurs d'onde permises seront fixées par la stationnarité de la phase : la longueur optique L de la cavité doit être un multiple entier de la longueur d'onde λ

$$L = p\lambda \quad p = 1, 2, \dots \quad (5.80)$$

22. La littérature sur les lasers est très vaste. Un bon point de départ est l'article de Pocholle [2005]. Pour un exposé plus complet, mais focalisé sur les aspects de physique atomique fondamentale, voir Grynberg *et al.* [1997], chapitre III.

23. La présence d'une cavité résonante n'est pas obligatoire. Il existe d'autres mécanismes pour sélectionner les modes amplifiés.

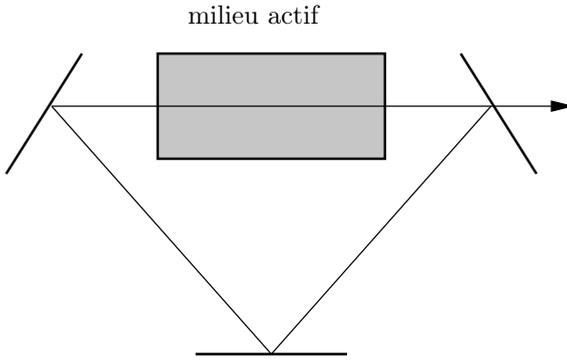


FIG. 5.18 – Schéma d'un laser en anneau.

ou, en terme de fréquences,

$$\omega_p = \frac{2\pi c}{\lambda} p \quad p = 1, 2, \dots \quad (5.81)$$

Il est généralement possible de sélectionner une longueur d'onde unique, ce qui donne un laser monomode.

Il existe plusieurs mécanismes permettant de réaliser l'inversion de population. Nous nous contenterons de décrire le mécanisme le plus simple, qui repose sur l'utilisation d'un système à quatre niveaux d'énergie : E_0 (fondamental), E_3 (excité), E_1 et E_2 (niveaux intermédiaires), voir la figure 5.19. Les atomes (ou molécules...) sont portés par pompage optique dans le niveau E_1 avec un taux w . Une relaxation rapide amène ensuite l'atome dans le niveau E_2 , choisi tel que la relaxation de E_2 vers E_1 soit lente. Enfin une relaxation rapide conduit de E_1 à E_0 . Si on appelle Γ_i les taux de relaxation, on doit donc s'arranger pour avoir

$$\Gamma_1, \Gamma_3 \gg \Gamma_2 \quad (5.82)$$

En régime non saturé, on peut négliger l'émission stimulée ou l'absorption entre les niveaux E_2 et E_3 , de sorte que les équations cinétiques pour les populations N_i des niveaux E_i s'écrivent²⁴

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= \Gamma_2 N_2 - \Gamma_1 N_1 \\ \frac{dN_2}{dt} &= \Gamma_3 N_3 - \Gamma_2 N_2 \\ \frac{dN_3}{dt} &= w(N_0 - N_3) - \Gamma_3 N_3 \end{aligned} \quad (5.83)$$

24. Les équations cinétiques complètes sont données par exemple par Pocholle [2005].

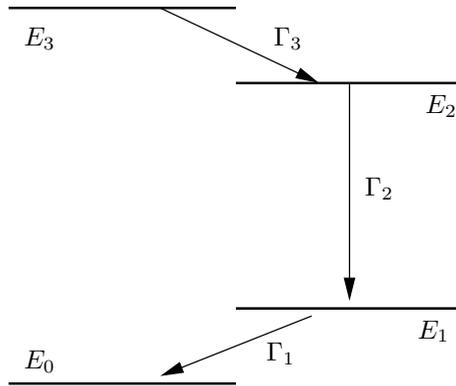


FIG. 5.19 – Schéma d'un mécanisme d'inversion de population à 4 niveaux.

On vérifie la cohérence de ces équations en prenant leur somme, et compte tenu de $N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = \text{cte}$, on obtient

$$\frac{dN_0}{dt} = -w(N_0 - N_3) + \Gamma_1 N_1 \quad (5.84)$$

qui est bien l'équation cinétique pour N_0 . En régime permanent, $dN_i/dt = 0$ et on déduit de (5.83)

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \quad (5.85)$$

ce qui montre que la condition $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$ entraîne l'inversion de population. En fait, l'émission stimulée est en compétition avec l'émission spontanée, et cette dernière est préjudiciable au fonctionnement du laser. Comme la probabilité d'émission spontanée est proportionnelle à ω_0^3 , voir (5.78), elle sera d'autant plus gênante que la longueur d'onde du laser sera courte. C'est pourquoi il est plus facile de construire un laser émettant dans le rouge que dans le bleu²⁵.

La condition de stationnarité de l'onde laser dans la cavité est à l'origine des propriétés de cohérence temporelle (ou longitudinale) et de cohérence spatiale (ou transverse) de la lumière laser. On peut en principe atteindre une longueur de cohérence temporelle limitée uniquement par l'émission spontanée, et en pratique des temps de cohérence de l'ordre de $1 \mu\text{s}$ (et donc des longueurs de cohérence de 300 m) sont faciles à atteindre. La cohérence spatiale permet à la largeur du faisceau d'approcher les limites de la diffraction.

Il existe une grande variété de lasers : lasers à néodyme (YAG), lasers de puissance à CO_2 , ... Les lasers les plus répandus dans la vie courante sont les lasers à semi-conducteurs, ou diodes lasers, qui sont utilisés par exemple pour la lecture des CD, des DVD et des codes barre. Dans ce cas, le processus

²⁵ Les pointeurs laser verts sont obtenus par conversion non linéaire d'infrarouge dans le vert par doublement de fréquence.

de base est la recombinaison d'une paire électron-trou, et les dimensions de la cavité résonante sont de l'ordre de quelques centaines de μm . Toutefois, ces dimensions sont réduites à quelques longueurs d'onde pour les lasers à émission verticale (VCSEL).

5.5 Exercices

5.5.1 Base orthonormée de vecteurs propres

Vérifier par un calcul explicite que les vecteurs $|\chi_s\rangle$ (5.12) forment une base orthonormée : $\langle\chi_{s'}|\chi_s\rangle = \delta_{s's}$.

5.5.2 Moment dipolaire électrique du formaldéhyde

1. On se propose de modéliser le comportement des deux électrons π de la double liaison de la molécule de formaldéhyde $\text{H}_2\text{-C=O}$. L'oxygène étant plus électronégatif que le carbone, montrer que le hamiltonien d'un électron prend la forme

$$\begin{pmatrix} E_C & -A \\ -A & E_O \end{pmatrix}$$

avec $E_O < E_C$, où $E_C(E_O)$ représente l'énergie d'un électron localisé sur l'atome de carbone (d'oxygène).

2. On définit

$$B = \frac{1}{2}(E_C - E_O) > 0$$

et l'angle θ par

$$B = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \theta \quad A = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \theta$$

Calculer en fonction de θ la probabilité de trouver un électron π localisé sur l'atome de carbone ou d'oxygène.

3. On admet que le moment dipolaire électrique d du formaldéhyde est dû uniquement à la distribution de charge sur l'axe C=O . Exprimer ce moment dipolaire en fonction de la distance l entre les atomes de carbone et d'oxygène, la charge du proton q_p et θ . Les valeurs expérimentales sont $l = 0.121 \text{ nm}$ et $d = q_p \times 0.040 \text{ nm}$.

5.5.3 Le butadiène

Le butadiène C_4H_6 possède une structure linéaire (figure 5.20). Son ossature $(\text{C}_4\text{H}_6)^{4+}$ formée avec des électrons σ comporte quatre atomes de carbone numérotés de $n = 1$ à $n = 4$. L'état d'un électron π localisé au voisinage de l'atome de carbone n° est désigné par $|\varphi_n\rangle$. Il est commode de généraliser à une chaîne linéaire comportant un nombre N d'atomes de carbone, et donc de numérotter les atomes $n = 1, \dots, N$. Le hamiltonien d'un électron π agit sur l'état $|\varphi_n\rangle$ de la façon suivante

$$\begin{aligned} H|\varphi_n\rangle &= E_0|\varphi_n\rangle - A(|\varphi_{n-1}\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle) \quad \text{si } n \neq 1, N \\ H|\varphi_1\rangle &= E_0|\varphi_1\rangle - A|\varphi_2\rangle \\ H|\varphi_N\rangle &= E_0|\varphi_N\rangle - A|\varphi_{N-1}\rangle \end{aligned}$$

A est une constante positive. On remarque que les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_N\rangle$ jouent un rôle particulier, car contrairement au cas du benzène, il n'y a pas de symétrie cyclique.

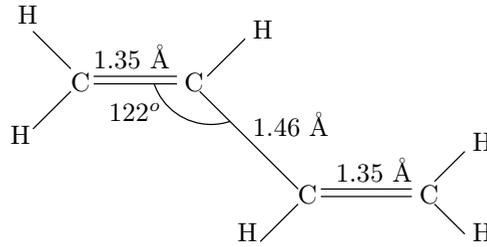


FIG. 5.20 – Formule chimique du butadiène.

1. Écrire la forme matricielle explicite de H dans la base $|\varphi_n\rangle$ pour $N = 4$.
2. L'état le plus général pour un électron π est

$$|\chi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle$$

Pour adapter la méthode utilisée dans le cas de la symétrie cyclique, on introduit deux états fictifs $|\varphi_0\rangle$ et $|\varphi_{N+1}\rangle$ et deux composantes $c_0 = c_{N+1} = 0$, ce qui permet de récrire $|\chi\rangle$

$$|\chi\rangle = \sum_{n=0}^{N+1} c_n |\varphi_n\rangle$$

Montrer que l'action de H sur l'état $|\chi\rangle$ s'écrit

$$H|\chi\rangle = E_0|\chi\rangle - A \sum_{n=1}^N (c_{n-1} + c_{n+1})|\varphi_n\rangle$$

3. En s'inspirant de la méthode utilisée dans le cas de la symétrie cyclique on cherche c_n sous la forme

$$c_n = \frac{c}{2i} \left(e^{in\delta} - e^{-in\delta} \right)$$

ce qui assure que $c_0 = 0$. Montrer que l'on doit choisir

$$\delta = \frac{\pi s}{N+1} \quad s = 1, \dots, N$$

si l'on veut également avoir $c_{N+1} = 0$.

4. Montrer que les valeurs propres de H sont étiquetées par l'entier s

$$E_s = E_0 - 2A \cos \frac{\pi s}{N+1}$$

et donner l'expression des vecteurs propres $|\chi_s\rangle$ correspondants. Montrer que la constante de normalisation c vaut $\sqrt{2/(N+1)}$ (suggestion : cf. (5.15)).

5. Dans le cas du butadiène $N = 4$, donner les valeurs numériques de E_s et des composantes des vecteurs propres. Montrer que l'énergie de l'état fondamental de l'ensemble des 4 électrons π est

$$E_0 \simeq 4(E_0 - A) - 0.48A$$

Le gain dû à la délocalisation des électrons π sur l'ensemble de la chaîne est-il important par rapport à la formule chimique de la figure 5.20 ? Dessiner qualitativement la probabilité de présence des électrons pour $s = 1$ et $s = 2$.

6. Quelle serait l'énergie de l'état fondamental d'une hypothétique molécule cyclique (c'est-à-dire ayant la forme d'un carré) C_4H_4 ?

7. On définit l'ordre d'une liaison l entre deux atomes de carbone n et $n + 1$ par

$$l = 1 + \sum_s \langle \varphi_n | \chi_s \rangle \langle \chi_s | \varphi_{n+1} \rangle$$

où la somme porte sur les états $|\chi_s\rangle$ occupés par les électrons π . Le facteur 1 correspond aux électrons σ . Montrer que l'ordre de la liaison est bien $l = 2$ pour l'éthylène. Calculer l'ordre des liaisons pour le benzène et pour les différentes liaisons du butadiène et commenter les résultats. Pourquoi la liaison centrale du butadiène est-elle plus courte qu'une liaison simple (1.46 Å au lieu de 1.54 Å) ?

5.5.4 Vecteurs propres du hamiltonien (5.22)

Montrer que, dans le cas où le champ électrique est indépendant du temps, et lorsque $d\mathcal{E}/A \ll 1$, le vecteur propre normalisé de H correspondant à la valeur propre $E_0 - A$ est donné à l'ordre $d\mathcal{E}/A$ par

$$|\chi'_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 - d\mathcal{E}/(2A) \\ 1 + d\mathcal{E}/(2A) \end{pmatrix}$$

Quel est l'autre vecteur propre ?

5.5.5 L'ion moléculaire H_2^+

L'ion moléculaire H_2^+ est formé de deux protons et d'un électron. Les deux protons sont situés sur un axe pris comme axe des x , à des abscisses respectives $-r/2$ et $r/2$. Ils seront supposés fixes (approximation de Born-Oppenheimer, voir § 16.3.1).

1. En supposant l'électron sur l'axe des x , exprimer son énergie potentielle $V(x)$ en fonction de sa position x et de $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$ où q_e est la charge de l'électron, et la tracer qualitativement.

2. Si les deux protons sont très éloignés, $r \gg l$, l'électron est soit localisé au voisinage du proton de droite (état $|\varphi_1\rangle$), soit au voisinage du proton de gauche (état $|\varphi_2\rangle$). On suppose que ces états correspondent tous deux à l'état fondamental de l'atome d'hydrogène d'énergie

$$E_0 = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_0}$$

où m_e est la masse de l'électron et a_0 le rayon de Bohr : $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$. Quelle est l'échelle de longueur pertinente l dans la relation $r \gg l$?

3. On considère l'ion H_2^+ comme un système à deux niveaux d'états de base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$, $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$. Justifier la forme du hamiltonien où l'on choisira $A > 0$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

Quels sont les états propres $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$ de H et les énergies E_+ et E_- , $E_+ < E_-$, correspondantes ? Dessiner qualitativement les fonctions d'onde $\chi_{\pm}(x) = \langle x | \chi_{\pm} \rangle$ de l'électron sur l'axe des x .

4. Le paramètre A est une fonction de la distance r entre les protons : $A(r)$. Justifier le fait que A est une fonction décroissante de r et que $\lim_{r \rightarrow \infty} A(r) = 0$. L'énergie de l'électron est donc une fonction de r , $E_{\pm}(r)$.

5. Montrer que, pour trouver l'énergie totale de l'ion $E'_{\pm}(r)$, on doit ajouter un terme $+e^2/r$. Quelle est l'origine physique de ce terme ?

6. On paramétrise $A(r)$ par

$$A(r) = c e^2 \exp\left(-\frac{r}{b}\right)$$

où b est une longueur et c l'inverse d'une longueur. Donner l'expression des deux niveaux d'énergie E'_+ et E'_- de l'ion. Soit

$$\Delta E(r) = E'_+(r) - E_0$$

la différence d'énergie entre l'état fondamental de l'ion et celui de l'atome d'hydrogène. Montrer que $\Delta E(r)$ peut passer par un minimum pour une valeur $r = r_0$ et en déduire

$$\Delta E(r_0) = \frac{e^2}{r_0} \left(1 - \frac{b}{r_0}\right)$$

Quelle condition doit-on avoir sur b et r_0 pour que l'ion H_2^+ soit un état lié ?

7. Les valeurs expérimentales sont $r_0 \simeq 2a_0$ et $\Delta E(r_0) \simeq E_0/5 = -e^2/(10a_0)$. En déduire b et c en fonction de a_0 .

5.5.6 Compléments sur la RMN

1. Obtenir la formule (5.43) en examinant la figure 5.7 (b) décrivant la rotation du spin dans le référentiel tournant.

2. On suppose que le champ de radiofréquences \vec{B}_1 est de la forme

$$\vec{B}_1(t) = 2\hat{x}B_1 \cos \omega t$$

Montrer que le hamiltonien dans le référentiel tournant est

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} \hbar \delta \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x + \hbar \omega_1 \left[\sigma_+ e^{-2i\omega t} + \sigma_- e^{2i\omega t} \right]$$

Que peut-on dire des termes entre crochets à l'approximation séculaire ? Interprétation physique : on récrit \vec{B}_1

$$\vec{B}_1(t) = B_1(\hat{x} \cos \omega t - \hat{y} \sin \omega t) + B_1(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t)$$

Quel est le terme éliminé par l'approximation séculaire ? Pourquoi ?

5.6 Bibliographie

Pour la chimie quantique élémentaire, on pourra consulter Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 15, Goodrich [1972], chapitre 2, Gatz [1971], chapitres 10 à 12. Les systèmes à deux niveaux avec interactions résonantes et quasi-résonantes sont traités par Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitres 8 et 9 ou par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre IV. On trouvera une excellente introduction à la RMN par exemple dans Akitt [1992] ou dans Levitt [2001]. L'interaction d'un atome à deux niveaux avec un champ électromagnétique est traitée à un niveau avancé par Grynberg *et al.* [1997], chapitre II. Le lecteur trouvera des détails complémentaires sur l'ion moléculaire H_2^+ dans Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément G_{XI}.

Chapitre 6

États intriqués

NOUS NOUS SOMMES limités jusqu'à présent aux états à une particule. Dans ce chapitre, nous introduisons la description d'états à deux particules ; une fois ce cas assimilé, il n'est pas difficile de généraliser à un nombre quelconque de particules. Les états à deux particules (ou plus) conduisent à des configurations très riches, dites intriquées. Ces configurations sont telles qu'aucune distribution de probabilité classique possédant des propriétés « raisonnables »¹ n'est capable de reproduire leurs corrélations, *et celles-ci possèdent donc un caractère intrinsèquement quantique*. Une propriété remarquable des états intriqués est que deux systèmes quantiques peuvent rester intriqués, même s'ils sont arbitrairement éloignés, et ils continuent à former une entité indissociable. Dans une première section, nous allons nous attacher au formalisme mathématique indispensable, celui du produit tensoriel. Ce formalisme nous permettra dans la section 6.2 de décrire les mélanges quantiques à l'aide du formalisme de l'opérateur statistique. La section 6.3 sera consacrée aux corrélations quantiques et à leurs applications aux inégalités de Bell. La section 6.4 contient une introduction à la théorie de la décohérence et à celle de la mesure. Enfin, dans la dernière section, nous passerons brièvement en revue les applications potentielles à l'information quantique. Ce dernier sujet, actuellement en pleine expansion, trouve ses applications dans le calcul quantique, la cryptographie et la téléportation.

Ce chapitre aborde un certain nombre de questions délicates qui sont au cœur des concepts quantiques fondamentaux. Cependant, seules les sections 6.1, 6.2.1 et 6.2.3 sont indispensables pour la suite, à l'exception de la section 15.5 et du chapitre 17, et le lecteur peut omettre les autres sections dans un premier temps.

1. Cet adjectif sera défini avec précision dans la section 6.3.

6.1 Produit tensoriel de deux espaces vectoriels

6.1.1 Définition et propriétés du produit tensoriel

Nous cherchons à construire l'espace des états de deux systèmes quantiques A et B que nous supposons dans un premier temps entièrement indépendants. Soit $\mathcal{H}_A^{d_A}$ et $\mathcal{H}_B^{d_B}$ (ou simplement \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B) les espaces des états des deux systèmes, de dimensions respectives d_A et d_B . Comme les deux systèmes sont indépendants, l'état global est défini par la donnée du vecteur d'état $|\varphi_A\rangle \equiv |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A$ du premier système et du vecteur d'état $|\chi_B\rangle \equiv |\chi\rangle \in \mathcal{H}_B$ du second. Le couple $\{|\varphi\rangle, |\chi\rangle\}$ peut être considéré comme un vecteur appartenant à un espace vectoriel de dimension $d_A d_B$, appelé *produit tensoriel* des espaces $\mathcal{H}_A^{d_A}$ et $\mathcal{H}_B^{d_B}$, noté $\mathcal{H}_A^{d_A} \otimes \mathcal{H}_B^{d_B}$ (ou simplement $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$), que nous allons définir précisément ci-dessous.

Choisissons une base orthonormée $|i_A\rangle \equiv |i\rangle, i = 1 \dots, d_A$ de \mathcal{H}_A et une base orthonormée $|m_B\rangle \equiv |m\rangle, m = 1, \dots, d_B$ de \mathcal{H}_B . Les indices i, j, k étiquettent les vecteurs d'une base de \mathcal{H}_A et m, n, p ceux d'une base de \mathcal{H}_B : afin d'éviter une prolifération d'indices, nous omettons souvent les indices A et B et noterons $|i\rangle$ au lieu de $|i_A\rangle$, $|m\rangle$ au lieu de $|m_B\rangle$, etc., sauf en cas d'ambiguïté possible. Décomposons sur ces bases des vecteurs arbitraires $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A$ et $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_B$

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{d_A} c_n |i\rangle \quad |\chi\rangle = \sum_{m=1}^{d_B} d_m |m\rangle \quad (6.1)$$

L'espace $\mathcal{H}_A^{d_A} \otimes \mathcal{H}_B^{d_B}$ sera défini comme un espace à $d_A d_B$ dimensions où les couples $\{|i\rangle, |m\rangle\}$, notés $|i \otimes m\rangle$, ou $|i\rangle \otimes |m\rangle$, forment une base orthonormée

$$\langle j \otimes p | i \otimes m \rangle = \delta_{ji} \delta_{pm} \quad (6.2)$$

et le produit tensoriel des vecteurs $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$, noté $|\varphi \otimes \chi\rangle$, ou $|\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$, est le vecteur de composantes $c_i d_m$ dans cette base

$$|\varphi \otimes \chi\rangle = \sum_{i,m} c_i d_m |i \otimes m\rangle \quad (6.3)$$

On vérifie immédiatement la linéarité de l'opération produit tensoriel

$$\begin{aligned} |\varphi \otimes (\chi_1 + \lambda \chi_2)\rangle &= |\varphi \otimes \chi_1\rangle + \lambda |\varphi \otimes \chi_2\rangle \\ |(\varphi_1 + \lambda \varphi_2) \otimes \chi\rangle &= |\varphi_1 \otimes \chi\rangle + \lambda |\varphi_2 \otimes \chi\rangle \end{aligned} \quad (6.4)$$

Il faut également vérifier que la définition du produit tensoriel est indépendante du choix de la base. Soit $|\tilde{k}\rangle$ et $|\tilde{n}\rangle$ deux bases orthonormées de \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B déduites des bases $|i\rangle$ et $|m\rangle$ par des transformations unitaires respectives $R (R^{-1} = R^\dagger)$ et $S (S^{-1} = S^\dagger)$

$$|\tilde{k}\rangle = \sum_i R_{ki} |i\rangle \quad |\tilde{p}\rangle = \sum_m S_{pm} |m\rangle$$

D'après (6.3), le produit tensoriel $|\tilde{k} \otimes \tilde{p}\rangle$ est donné par

$$|\tilde{k} \otimes \tilde{p}\rangle = \sum_{k,m} R_{ki} S_{pm} |i \otimes m\rangle$$

Par ailleurs on peut écrire la décomposition de $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ dans les bases respectives $|\tilde{k}\rangle$ et $|\tilde{p}\rangle$

$$|\varphi\rangle = \sum_{k=1}^{d_A} \tilde{c}_k |\tilde{k}\rangle \quad |\chi\rangle = \sum_{p=1}^{d_B} \tilde{d}_p |\tilde{p}\rangle$$

Un calcul immédiat (exercice 6.6.1) montre que

$$\sum_{k,p} \tilde{c}_k \tilde{d}_p |\tilde{k} \otimes \tilde{p}\rangle = |\varphi \otimes \chi\rangle$$

où $|\varphi \otimes \chi\rangle$ est défini par (6.3). Le résultat pour $|\varphi \otimes \chi\rangle$ est donc indépendant du choix de la base.

Lorsque les deux systèmes ne sont plus indépendants, nous *admettrons* (postulat **V**) que l'espace des états reste² $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Le vecteur d'état le plus général sera de la forme

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i,m} b_{im} |i \otimes m\rangle \quad (6.5)$$

En général on ne pourra *pas* écrire le vecteur $|\Phi_{AB}\rangle$ comme un produit tensoriel $|\varphi \otimes \chi\rangle$. En effet il faudrait que l'on puisse factoriser b_{im} sous la forme $c_i d_m$, ce qui est impossible sauf si les systèmes sont indépendants. Si $|\Phi_{AB}\rangle$ ne peut pas s'écrire comme un produit tensoriel, l'état $|\Phi_{AB}\rangle$ est appelé *état intriqué*.

Le produit tensoriel $C = A \otimes B$ de deux opérateurs linéaires A et B agissant respectivement dans les espaces \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B est défini par son action sur le vecteur produit tensoriel $|\varphi \otimes \chi\rangle$

$$(A \otimes B)|\varphi \otimes \chi\rangle = |A\varphi \otimes B\chi\rangle \quad (6.6)$$

et ses éléments de matrice dans la base $|i \otimes m\rangle$ de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ sont donc

$$\langle j \otimes p | A \otimes B | i \otimes m \rangle = A_{ji} B_{pm} \quad (6.7)$$

En général un opérateur C agissant sur $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ n'est *pas* de la forme $A \otimes B$. Ses éléments de matrice sont

$$\langle j \otimes p | C | i \otimes m \rangle = C_{jp;im}$$

2. Toutefois nous verrons au chapitre 14 que, pour deux particules identiques, une partie seulement de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ correspond à des états physiques.

et sauf cas particulier on ne peut pas écrire $C_{jp;im}$ sous la forme factorisée $A_{ji}B_{pm}$. Deux cas particuliers intéressants de (6.6) sont $A = I_A$ et $B = I_B$, où I_A et I_B sont les opérateurs identité de \mathcal{H}_A et de \mathcal{H}_B

$$(A \otimes I_B)|\varphi \otimes \chi\rangle = |A\varphi \otimes \chi\rangle \quad (I_A \otimes B)|\varphi \otimes \chi\rangle = |\varphi \otimes B\chi\rangle \quad (6.8)$$

En termes d'éléments de matrice

$$\langle j \otimes p | A \otimes I_B | i \otimes m \rangle = A_{ji} \delta_{pm} \quad \langle j \otimes p | I_A \otimes B | i \otimes m \rangle = \delta_{ji} B_{pm} \quad (6.9)$$

Enfin, si $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a ($A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$), alors $|\varphi \otimes \chi\rangle$ sera vecteur propre de $A \otimes I_B$ avec la valeur propre a

$$(A \otimes I_B)|\varphi \otimes \chi\rangle = a|\varphi \otimes \chi\rangle \quad (6.10)$$

On omet souvent d'écrire explicitement les opérateurs identité I_A et I_B , et une écriture courante pour (6.10) est

$$A|\varphi \otimes \chi\rangle = a|\varphi \otimes \chi\rangle \quad \text{ou simplement} \quad A|\varphi\chi\rangle = a|\varphi\chi\rangle \quad (6.11)$$

en supprimant le symbole du produit tensoriel. Comme la notation \otimes est assez lourde, elle sera souvent omise sauf s'il y a une ambiguïté possible.

6.1.2 Système de deux spins 1/2

Nous allons illustrer la notion de produit tensoriel en construisant l'espace des états d'un système de deux spins 1/2. Les espaces des états des deux spins sont des espaces à deux dimensions \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B . L'espace des états du système des deux spins $\mathcal{H}_{AB} \equiv \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ est à quatre dimensions ($4 = 2 \times 2$). On choisit comme base orthonormée de \mathcal{H}_A et de \mathcal{H}_B les états propres $|\varepsilon_A\rangle$ et $|\varepsilon_B\rangle$, $\varepsilon_i = \pm 1$, des opérateurs composante du spin sur l'axe Oz , S_{zA} et S_{zB} , avec

$$S_{zA}|\varepsilon_A\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_A|\varepsilon_A\rangle \quad S_{zB}|\varepsilon_B\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_B|\varepsilon_B\rangle$$

D'après (6.5), les états du système de deux spins se décomposent sur la base orthonormée $|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle$ et par exemple

$$(S_{zA} \otimes I_B)|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_A|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle ;$$

$$(S_{zA} \otimes S_{zB})|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\varepsilon_A\varepsilon_B|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle$$

Suivant (6.11), on utilisera fréquemment les notations allégées $|\varepsilon_A\varepsilon_B\rangle$ au lieu de $|\varepsilon_A \otimes \varepsilon_B\rangle$, $S_{zA}S_{zB}$ au lieu de $S_{zA} \otimes S_{zB}$; avec ces notations les équations précédentes deviennent

$$S_{zA}|\varepsilon_A\varepsilon_B\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_A|\varepsilon_A\varepsilon_B\rangle ; \quad S_{zA}S_{zB}|\varepsilon_A\varepsilon_B\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\varepsilon_A\varepsilon_B|\varepsilon_A\varepsilon_B\rangle \quad (6.12)$$

Soit $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ deux vecteurs arbitraires (normalisés) de \mathcal{H}_A et de \mathcal{H}_B

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \lambda_A|+\rangle + \mu_A|-\rangle & |\lambda_A|^2 + |\mu_A|^2 &= 1 \\ |\chi\rangle &= \lambda_B|+\rangle + \mu_B|-\rangle & |\lambda_B|^2 + |\mu_B|^2 &= 1 \end{aligned}$$

Le produit tensoriel $|\varphi \otimes \chi\rangle$ est donné suivant (6.3) par

$$|\varphi \otimes \chi\rangle = \lambda_A \lambda_B |+\otimes+\rangle + \lambda_A \mu_B |+\otimes-\rangle + \mu_A \lambda_B |-\otimes+\rangle + \mu_A \mu_B |-\otimes-\rangle \quad (6.13)$$

Un vecteur générique $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$ est de la forme

$$|\Psi\rangle = \alpha |+\otimes+\rangle + \beta |+\otimes-\rangle + \gamma |-\otimes+\rangle + \delta |-\otimes-\rangle \quad (6.14)$$

Les nombres α, \dots, δ sont arbitraires, en dehors de la condition de normalisation $|\alpha|^2 + \dots + |\delta|^2 = 1$. Une condition nécessaire (et en fait suffisante) pour que $|\Psi\rangle$ puisse se mettre sous la forme (6.13) est que $\alpha\delta = \beta\gamma$, et *a priori* cette condition n'a aucune raison d'être valide. Un vecteur $|\Psi\rangle$ générique (6.14) n'est pas un produit tensoriel, et un vecteur qui n'est pas de la forme (6.13) est donc un état intriqué des deux spins.

Un cas particulier important est l'état intriqué

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\otimes-\rangle - |-\otimes+\rangle \right)$$

ou en notation allégée (6.12)

$$\boxed{|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\ -\rangle - |-\ +\rangle \right)} \quad (6.15)$$

Cet état est manifestement intriqué car $\alpha = \delta = 0$ et $\beta = \gamma = 1/\sqrt{2}$: $\alpha\delta \neq \beta\gamma$. Une propriété remarquable de $|\Phi\rangle$ est son invariance par rotation³ : c'est un scalaire par rapport aux rotations. En effet, comme nous l'avons vu au § 3.2.4, le transformé $|\chi\rangle_{\mathcal{R}}$ par une rotation \mathcal{R} d'un état $|\chi\rangle$ s'obtient en lui appliquant un opérateur $D^{1/2}$ (3.58) qui est une matrice de $SU(2)$, c'est-à-dire une matrice unitaire et de déterminant unité (exercice 3.3.6). Les transformés de $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont

$$\begin{aligned} |+\rangle_{\mathcal{R}} &= a|+\rangle + b|-\rangle \\ |-\rangle_{\mathcal{R}} &= c|+\rangle + d|-\rangle \end{aligned} \quad (6.16)$$

avec⁴ $ad - bc = 1$. Nous en déduisons

$$|+\ -\rangle_{\mathcal{R}} = ac|+\ +\rangle + ad|+\ -\rangle + bc|-\ +\rangle + bd|-\ -\rangle \quad (6.17)$$

3. Nous verrons au § 10.6.1 que $|\Phi\rangle$ est un état de moment angulaire nul, et donc un scalaire pour les rotations.

4. Et $c = -b^*$, $d = a^*$, mais nous ne nous servirons pas de ces relations ici.

et en échangeant $+$ \leftrightarrow $-$

$$| - + \rangle_{\mathcal{R}} = ac | + + \rangle + ad | - + \rangle + bc | + - \rangle + bd | - - \rangle$$

ce qui donne pour le transformé de $|\Phi\rangle$ par rotation

$$|\Phi\rangle_{\mathcal{R}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| + - \rangle_{\mathcal{R}} - | - + \rangle_{\mathcal{R}} \right) = (ad - bc) |\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (6.18)$$

6.2 Opérateur statistique (ou opérateur densité)

6.2.1 Définition et propriétés

Considérons un système de deux particules⁵ \mathcal{AB} décrit par un vecteur d'état $|\Phi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Si $|\Phi_{AB}\rangle$ est un produit tensoriel $|\varphi_A \otimes \varphi_B\rangle$, le vecteur d'état de la particule \mathcal{A} est $|\varphi_A\rangle$. Mais que se passe-t-il si $|\Phi_{AB}\rangle$ n'est pas un produit tensoriel, ou, en d'autres termes, si $|\Phi_{AB}\rangle$ est un état intriqué? Peut-on encore parler du vecteur d'état de la particule \mathcal{A} ? Nous allons voir que la réponse à cette question est *négative* : en général on ne peut pas attribuer un vecteur d'état à la particule \mathcal{A} . Cet exemple montre qu'il nous faut généraliser notre description des systèmes quantiques. Si l'état physique de la particule \mathcal{A} peut être décrit par un vecteur de l'espace de Hilbert, on dit que l'on a affaire à un *état pur* ou à un *cas pur*; ceci sera le cas si l'on dispose d'une information complète sur la particule \mathcal{A} . Lorsque l'information sur \mathcal{A} est incomplète⁶, on a affaire à un *mélange*, et l'état quantique de la particule \mathcal{A} est alors décrit mathématiquement par un opérateur statistique⁷ : le système \mathcal{AB} est dans un état pur $|\Phi_{AB}\rangle$, mais la particule \mathcal{A} ne l'est pas. L'introduction de l'opérateur statistique va nous permettre de reformuler le postulat **I** du chapitre 4 afin de décrire des situations physiques plus générales que celles envisagées jusqu'ici, celles où l'on ne dispose que d'une information partielle sur le système considéré.

Lorsque l'on a affaire à un cas pur, la donnée du vecteur d'état $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ pour décrire un système quantique est équivalente à celle du projecteur

5. Ce qui suit est également valable si \mathcal{A} et \mathcal{B} sont deux sous-systèmes. Nous avons pris le cas de deux particules pour fixer les idées.

6. Cette formulation n'est pas satisfaisante car elle n'est pas intrinsèque : elle fait intervenir l'information que nous avons sur le système. Une formulation plus satisfaisante est fondée sur les corrélations internes et externes du système, voir Mermin [1998].

7. Une fois de plus la terminologie usuelle « opérateur densité » est particulièrement malvenue. De quelle densité s'agit-il? En fait la terminologie a été introduite dans le cas de la mécanique ondulatoire (chapitre 9), où les éléments de matrice diagonaux de ρ dans la base des états propres de l'opérateur position, $\langle \vec{r} | \rho | \vec{r} \rangle$, ou de l'opérateur impulsion, $\langle \vec{p} | \rho | \vec{p} \rangle$, sont effectivement des densités. Cependant « opérateur densité » masque le fait que cet opérateur contient des informations essentielles sur les phases. Nous avons préféré « opérateur statistique » ; par analogie avec vecteur d'état, « opérateur d'état » serait aussi possible.

$\mathcal{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ sur l'état $|\varphi\rangle$. En un certain sens, se donner \mathcal{P}_φ est même préférable, car la phase arbitraire de $|\varphi\rangle$ disparaît : \mathcal{P}_φ est invariant lorsque l'on multiplie $|\varphi\rangle$ par un facteur de phase

$$|\varphi\rangle \rightarrow e^{i\alpha} |\varphi\rangle$$

et il y a donc correspondance biunivoque entre l'état physique et \mathcal{P}_φ , et non pas correspondance à un facteur de phase près. La valeur moyenne d'une propriété physique A s'exprime simplement en fonction de \mathcal{P}_φ . Introduisons en effet une base orthonormée $|n\rangle$ de \mathcal{H}

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \sum_{n,m} \langle \varphi | n \rangle \langle n | A | m \rangle \langle m | \varphi \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle m | \varphi \rangle \langle \varphi | n \rangle \langle n | A | m \rangle \\ &= \sum_m \langle m | \mathcal{P}_\varphi A | m \rangle = \text{Tr}(\mathcal{P}_\varphi A) \end{aligned} \quad (6.19)$$

\mathcal{P}_φ est le cas le plus simple d'opérateur statistique. Nous pouvons maintenant généraliser à un *mélange* : dans un tel cas on sait seulement que le système quantique a la probabilité p_α ($0 \leq p_\alpha \leq 1$, $\sum_\alpha p_\alpha = 1$) de se trouver dans l'état $|\varphi_\alpha\rangle$. Les états $|\varphi_\alpha\rangle$ sont supposés normalisés ($\langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle = 1$), mais pas nécessairement orthogonaux, $\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle \neq \delta_{\alpha\beta}$. Par définition, l'opérateur statistique ρ décrivant ce système quantique est

$$\boxed{\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| = \sum_\alpha p_\alpha \mathcal{P}_{\varphi_\alpha}} \quad (6.20)$$

Cette définition assure que la valeur moyenne d'une propriété physique A s'obtient par une généralisation immédiate de (6.19). En effet, la valeur moyenne de A dans l'état $|\varphi_\alpha\rangle$, $\langle A \rangle_\alpha$, est

$$\langle A \rangle_\alpha = \langle \varphi_\alpha | A | \varphi_\alpha \rangle$$

et cette valeur moyenne est affectée du poids p_α dans le calcul de la valeur moyenne globale $\langle A \rangle$. La valeur moyenne dans le mélange est donc

$$\boxed{\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle A \rangle_\alpha = \sum_\alpha p_\alpha \text{Tr}(\mathcal{P}_{\varphi_\alpha} A) = \text{Tr}(\rho A)} \quad (6.21)$$

Les poids p_α sont fixés par le problème physique considéré, et (6.20) définit la *préparation* du système : chaque état $|\varphi_\alpha\rangle$ apparaît avec la probabilité p_α . Un cas classique est celui de la mécanique statistique d'équilibre où un système \mathcal{A} est en équilibre avec un thermostat à la température absolue T

(ensemble canonique) : si les niveaux d'énergie du système sont E_r , l'opérateur statistique est alors⁸

$$\rho_{\text{can}} = \frac{1}{Z} \sum_r e^{-E_r/k_B T} \quad Z = \sum_r e^{-E_r/k_B T} \quad (6.22)$$

Les propriétés fondamentales de ρ , qui découlent immédiatement de sa définition (6.20) sont :

- ρ est hermitien : $\rho = \rho^\dagger$.
- ρ est de trace unité : $\text{Tr } \rho = 1$.
- ρ est un opérateur positif⁹ : $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$ quel que soit $|\psi\rangle$, car $\langle \psi | \mathcal{P}_\varphi | \psi \rangle = |\langle \psi | \varphi \rangle|^2$.
- Une condition nécessaire et suffisante pour que ρ décrive un état pur est $\rho^2 = \rho$: en effet, comme $\rho = \rho^\dagger$, la condition $\rho^2 = \rho$ implique que ρ est un projecteur. Comme $\text{Tr } \rho = 1$, la dimension de l'espace vectoriel de projection est un¹⁰, et ρ est de la forme $|\varphi\rangle\langle\varphi|$. Une autre condition nécessaire et suffisante pour que ρ représente un cas pur est $\text{Tr } \rho^2 = 1$ (exercice 6.6.3).

Inversement, un opérateur hermitien, positif et de trace unité peut être interprété comme un opérateur statistique. En effet, comme ρ est hermitien, on peut l'écrire sous forme diagonale (mais la préparation n'est pas unique si certaines valeurs propres sont dégénérées)

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| \quad (6.23)$$

et une préparation possible du système quantique consiste à fabriquer un mélange d'états $|i\rangle$ avec une probabilité p_i . Cependant, si la donnée des p_α et des $|\varphi_\alpha\rangle$ dans (6.20) détermine ρ de façon unique, l'inverse n'est pas vrai : à *un même opérateur statistique peuvent correspondre plusieurs préparations différentes*. Par exemple, si une valeur propre p_i dans (6.23) est dégénérée, nous pouvons choisir pour la préparation des combinaisons linéaires arbitraires dans le sous-espace de cette valeur propre. En d'autres termes, un opérateur statistique ne spécifie pas une configuration microscopique unique, mais il est suffisant pour calculer les valeurs moyennes de propriétés physiques à l'aide de (6.21). Nous reviendrons au § 6.2.4 sur ce point fondamental. Notons enfin deux définitions : dans une base où ρ n'est pas diagonal, les éléments

8. La somme porte sur les niveaux, pas sur les valeurs de l'énergie : si un niveau d'énergie est doublement dégénéré, il compte deux fois.

9. Un opérateur (strictement) positif est hermitien et a des valeurs propres (strictement) positives et réciproquement : exercice 2.4.10.

10. En général, si \mathcal{P} est un projecteur, $\text{Tr } \mathcal{P}$ est égal à la dimension de l'espace vectoriel de projection : il suffit pour le voir de se placer dans une base où \mathcal{P} est diagonal.

diagonaux ρ_{ii} sont appelés *populations* et les éléments non diagonaux $\rho_{ij}, i \neq j$ sont appelés *cohérences*. Cette définition dépend bien sûr du choix de la base, mais il existe souvent un choix naturel pour une base privilégiée, par exemple la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ dans le cas de la RMN pour un champ \vec{B}_0 parallèle à Oz , ou la base des états fondamentaux et excités dans le cas de l'atome à deux niveaux.

6.2.2 Opérateur statistique réduit

Nous avons obtenu l'opérateur statistique ρ (6.20) en construisant un mélange d'états $|\varphi_\alpha\rangle$ avec des poids p_α . Nous allons maintenant donner une seconde interprétation de l'opérateur statistique en essayant de répondre à la question suivante : supposons que le vecteur d'état d'un système \mathcal{AB} soit un état intriqué $|\Phi_{AB}\rangle$, mais que nous ayons seulement la possibilité de mesurer les propriétés physiques de \mathcal{A} . Comment décrire l'état quantique du seul système \mathcal{A} ? Soit donc $|\Phi_{AB}\rangle$ l'état intriqué le plus général, écrit dans la base $|i \otimes m\rangle$ de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i,m} c_{im} |i \otimes m\rangle \quad \sum_{i,m} |c_{im}|^2 = 1 \quad (6.24)$$

Soit A une propriété physique du système \mathcal{A} , qui est représentée par $A \otimes I_B$ dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$; écrivons son action sur $|\Phi_{AB}\rangle$

$$(A \otimes I_B)|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i,m} c_{im} |Ai \otimes m\rangle$$

et calculons la valeur moyenne de A

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{AB} | A \otimes I_B | \Phi_{AB} \rangle &= \sum_{j,n} \sum_{i,m} c_{jn}^* c_{im} \langle j \otimes n | A | i \otimes m \rangle \\ &= \sum_{j,n} \sum_{i,m} c_{jn}^* c_{im} \langle j | A | i \rangle \delta_{nm} \\ &= \sum_{i,j} \sum_m c_{jm}^* c_{im} \langle j | A | i \rangle \\ &= \sum_{i,j} \rho_{ij} \langle j | A | i \rangle = \sum_{i,j} \rho_{ij} A_{ji} = \text{Tr}(\rho A), \end{aligned} \quad (6.25)$$

où nous avons introduit l'opérateur ρ agissant dans \mathcal{H}_A dont les éléments de matrice ρ_{ij} sont

$$\boxed{\rho_{ij} = \sum_m c_{im} c_{jm}^*} \quad (6.26)$$

La notation ρ n'a pas été choisie par hasard : en effet ρ possède toutes les propriétés d'un opérateur statistique ainsi qu'on peut aisément le vérifier à partir de (6.26) (exercice 6.6.3) :

- ρ est hermitien : $\rho = \rho^\dagger$;
- il est de trace unité : $\text{Tr } \rho = 1$;
- il est positif : $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0 \quad \forall |\psi\rangle$.

Par construction, la valeur moyenne d'une propriété physique de \mathcal{A} est donnée par $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$. Sauf dans le cas où $|\Phi_{AB}\rangle$ est un produit tensoriel, $|\Phi_{AB}\rangle = |\varphi_A \otimes \varphi_B\rangle$, caractérisé par $\text{Tr } \rho^2 = 1$, on ne peut pas attribuer un vecteur d'état au système \mathcal{A} , mais seulement un opérateur statistique. Une question importante se pose alors : un opérateur statistique construit à partir de (6.21) et un opérateur statistique construit à partir de (6.26) ont-ils une interprétation physique identique, ou bien doit-on faire une distinction ? Cette question sera discutée dans la section 6.2.4.

Il est facile de généraliser (6.26) au cas où le système \mathcal{AB} lui-même est décrit par un opérateur statistique ρ_{AB} , et non un vecteur d'état $|\Phi_{AB}\rangle$. Il suffit comme ci-dessus de calculer la valeur moyenne d'une propriété physique A , représentée par $A \otimes I_B$ dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ¹¹

$$\begin{aligned} \langle A \otimes I_B \rangle &= \text{Tr}_{\mathcal{AB}}(\rho_{AB}[A \otimes I_B]) \\ &= \sum_{ijmn} \rho_{im;jn}^{AB} A_{ji} \delta_{nm} = \sum_{i,j} A_{ji} \sum_m \rho_{im;jm}^{AB} = \text{Tr}(A\rho_A) \end{aligned} \quad (6.27)$$

L'expression qui généralise (6.26) et qui donne l'opérateur statistique de \mathcal{A} est donc

$$\boxed{\rho_{ij}^A = \sum_m \rho_{im;jm}^{AB} \quad \rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB}} \quad (6.28)$$

La seconde expression est indépendante de la base : Tr_B représente la trace sur l'espace \mathcal{H}_B , appelée *trace partielle* de l'opérateur statistique global, tandis que ρ_A est *l'opérateur statistique réduit*, et on peut montrer que cet opérateur donne la solution unique de (6.27) (Breuer et Petruccione [2002], chapitre 2). Une application intéressante de (6.28) est le calcul de la probabilité de trouver la valeur propre a_n de A , qui est donnée en fonction du projecteur \mathcal{P}_n sur le sous-espace de la valeur propre a_n d'une propriété physique A par une expression généralisant (4.4)

$$\boxed{p(a_n) = \text{Tr}_A(\mathcal{P}_n \rho_A) = \text{Tr}_A \text{Tr}_B[(\mathcal{P}_n \otimes I_B) \rho_{AB}]} \quad (6.29)$$

Il est important de se convaincre que *la prescription qui consiste à prendre la trace partielle est une conséquence du postulat II*, car l'expression donnant les valeurs moyennes découle de ce postulat.

11. Afin de rendre les notations plus claires, nous avons écrit les indices A et B en exposant dans la forme matricielle de (6.27).

Donnons maintenant quelques exemples de calcul explicite de l'opérateur statistique réduit lorsque l'on part d'un cas pur $|\Phi_{AB}\rangle$ dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, construit avec des vecteurs quelconques $|\varphi_i\rangle$ et $|\chi_m\rangle$

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_i \sum_m c_{im} |\varphi_i \otimes \chi_m\rangle \quad (6.30)$$

Le calcul de l'opérateur statistique réduit est immédiat si l'on observe que

$$\text{Tr} |a\rangle\langle b| = \sum_n \langle n|a\rangle\langle b|n\rangle = \sum_n \langle b|n\rangle\langle n|a\rangle = \langle b|a\rangle \quad (6.31)$$

En écrivant l'expression explicite de $|\Phi_{AB}\rangle\langle\Phi_{AB}|$, on déduit que l'opérateur d'état réduit ρ_A dans \mathcal{H}_A vaut

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Phi_{AB}\rangle\langle\Phi_{AB}| = \sum_{i,m,k,p} c_{im} c_{kp}^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_k| \langle\chi_p|\chi_m\rangle \quad (6.32)$$

Lorsque les indices i et m sont identiques, (6.30) se simplifie¹²

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |\varphi_i \otimes \chi_i\rangle$$

et ρ_A est donné par

$$\rho_A = \sum_i c_i c_j^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \langle\chi_j|\chi_i\rangle \quad (6.33)$$

Un cas particulier important est celui où les états $|\chi_i\rangle$ sont orthogonaux, $\langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij}$. Alors les cohérences de ρ_A s'annulent et on obtient un mélange du type (6.20)

$$\rho_A = \sum_i |c_i|^2 |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad \text{si} \quad \langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij} \quad (6.34)$$

Un autre résultat utile est donné par le *théorème de purification de Schmidt*. D'après ce théorème, tout état $|\Phi_{AB}\rangle$ de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ peut s'écrire sous la forme

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^{d_S} \sqrt{p_i} |i_A \otimes i_B\rangle \quad p_i > 0 \quad \sum_i p_i = 1 \quad (6.35)$$

12. En explicitant les indices : $i \rightarrow i_A, m \rightarrow i_B$ et

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_i c_i |\varphi_{i_A} \otimes \chi_{i_B}\rangle$$

où les bases $|i_A\rangle$ et $|i_B\rangle$ dépendent de $|\Phi_{AB}\rangle$. Le nombre d_S ($d_S \leq \text{Min}(d_A, d_B)$), est appelé *nombre de Schmidt*. Une démonstration possible de ce théorème fait appel à l'opérateur statistique réduit. Soit $|\Phi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ un état pur du système couplé \mathcal{AB} , et soit $\{|i_A\rangle\}$ et $\{|i_B\rangle\}$ deux bases orthonormales de \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B . La décomposition la plus générale de $|\Phi_{AB}\rangle$ sur la base $\{|i_A \otimes i_B\rangle\}$ de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ s'écrit

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_{i_A, i_B} c_{i_A i_B} |i_A \otimes i_B\rangle$$

Définissant les vecteurs $|\tilde{i}_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ par

$$|\tilde{i}_B\rangle = \sum_{i_B} c_{i_A i_B} |i_B\rangle,$$

nous pouvons récrire

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sum_i |i_A \otimes \tilde{i}_B\rangle$$

Il n'y a évidemment aucune raison pour que l'ensemble $\{|\tilde{i}_B\rangle\}$ forme une base orthonormale de \mathcal{H}_B . Choisissons cependant une base *particulière* $\{|i_A\rangle\}$ de \mathcal{H}_A telle que l'opérateur statistique réduit ρ_A soit diagonal

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Phi_{AB}\rangle \langle \Phi_{AB}| = \sum_{i_A=1}^{d_S} p_i |i_A\rangle \langle i_A|$$

Si le nombre d_S de coefficients non nuls p_i est inférieur à la dimension d_A de \mathcal{H}_A , on complète $\{|i_A\rangle\}$ par un ensemble $(d_A - d_S)$ de vecteurs orthonormés orthogonaux au sous-espace sous-tendu par $\{|i_A\rangle\}$. On utilise (6.33) pour calculer ρ_A

$$\rho_A = \sum_{i, j} \langle \tilde{j}_B | \tilde{i}_B \rangle |i_A\rangle \langle j_A|$$

En comparant les deux expressions de ρ_A , on constate que

$$\langle \tilde{j}_B | \tilde{i}_B \rangle = p_i \delta_{ij}$$

et avec notre choix de base, il s'avère que les vecteurs $\{|\tilde{i}_B\rangle\}$ sont, tout compte fait, orthogonaux. Pour obtenir une base orthogonale, il suffit de redéfinir

$$|i_B\rangle = p_i^{-1/2} |\tilde{i}_B\rangle$$

où nous pouvons supposer $p_i > 0$, car, comme expliqué ci-dessus, il est toujours possible de compléter \mathcal{H}_B par un ensemble de $(d_B - d_S)$ vecteurs orthogonaux. On en déduit la représentation de Schmidt (6.35) de $|\Phi_{AB}\rangle$.

Le calcul des opérateurs statistiques réduits est immédiat à partir de (6.34) et (6.35)

$$\rho_A = \sum_i p_i |i_A\rangle\langle i_A| \quad \rho_B = \sum_i p_i |i_B\rangle\langle i_B| \quad (6.36)$$

Les probabilités p_i sont identiques pour ρ_A et ρ_B .

Illustrons ces résultats pour un système de deux spins 1/2 dans l'état pur (6.15). Si le spin \mathcal{A} était dans un état pur, $\text{Tr}_B \rho$ devrait être un projecteur. Or ceci n'est pas le cas comme on le vérifie explicitement en calculant ρ_A à l'aide de (6.34)

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB} = \frac{1}{2} |+\rangle\langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (6.37)$$

Même si le système des deux spins est un état pur, l'état d'un spin individuel est en général un mélange. En fait l'opérateur statistique (6.37) constitue un cas extrême de mélange, qui correspond à un désordre maximal et à une information minimale sur le spin. On montre qu'une mesure quantitative de l'information contenue dans l'opérateur statistique est donnée par l'entropie de von Neumann ou entropie statistique¹³ $S_{vN} = -\text{Tr} \rho \ln \rho$, qui est d'autant plus grande que l'information est réduite. Dans le cas d'un spin 1/2, elle est comprise entre 0 et $\ln 2$ et vaut 0 pour un cas pur, $\ln 2$ pour le mélange (6.37) : $\ln 2$ est la valeur maximale de l'entropie de von Neumann pour un spin 1/2, et le mélange (6.37) est bien celui qui contient l'information minimale. Si l'espace de Hilbert des états d'un système quantique est de dimension d , l'opérateur statistique correspondant au désordre maximal est $\rho = I/d$, soit une entropie de von Neumann $S_{vN} = \ln d$.

Il est intéressant de remarquer que l'opérateur statistique donne la description la plus générale possible d'un système quantique si l'on pose *a priori* un petit nombre de principes généraux. En effet Gleason a démontré le théorème suivant.

Théorème de Gleason. Soit un ensemble de projecteurs \mathcal{P}_i agissant dans un espace de Hilbert \mathcal{H} et soit un test associé à chacun des \mathcal{P}_i . La probabilité $p(\mathcal{P}_i)$ de réussir le test doit obéir aux conditions

$$0 \leq p(\mathcal{P}_i) \leq 1, \quad p(I) = 1,$$

ainsi qu'à

$$p(\mathcal{P}_i + \mathcal{P}_j) = p(\mathcal{P}_i) + p(\mathcal{P}_j) \quad \text{si} \quad \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j = \delta_{ij} \mathcal{P}_i$$

pour tout ensemble de \mathcal{P}_i vérifiant $\sum_i \mathcal{P}_i = I$ et $\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j = \delta_{ij} \mathcal{P}_i$, c'est-à-dire pour toute décomposition de \mathcal{H} en sous-espaces orthogonaux. Alors, si la dimension de $\mathcal{H} \geq 3$, il existe un opérateur hermitien et positif ρ de trace unité tel que

$$p(\mathcal{P}_i) = \text{Tr}(\rho \mathcal{P}_i)$$

13. Il faut prendre garde au fait que $\text{Tr} \rho \ln \rho \neq \sum_\alpha p_\alpha \ln p_\alpha$, sauf si les vecteurs $|\varphi_\alpha\rangle$ dans (6.20) sont orthogonaux entre eux.

En d'autres termes, si on associe à des projecteurs des tests avec des propriétés « raisonnables », ces probabilités doivent être données par un opérateur statistique. L'hypothèse forte est en fait la suivante : considérons un sous-espace à deux dimensions de \mathcal{H} et deux bases orthonormées différentes $\{|i\rangle, |j\rangle\}$ et $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ qui définissent les projecteurs

$$\mathcal{P}_i = |i\rangle\langle i| \quad \mathcal{P}_j = |j\rangle\langle j| \quad \mathcal{P}_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \mathcal{P}_\beta = |\beta\rangle\langle\beta|$$

On a bien sûr

$$\mathcal{P}_i + \mathcal{P}_j = \mathcal{P}_\alpha + \mathcal{P}_\beta$$

En mécanique quantique ceci entraîne immédiatement l'égalité

$$\mathfrak{p}(\mathcal{P}_i) + \mathfrak{p}(\mathcal{P}_j) = \mathfrak{p}(\mathcal{P}_\alpha) + \mathfrak{p}(\mathcal{P}_\beta)$$

mais il n'y a aucune raison *a priori* pour qu'une telle égalité soit valable dans toute théorie imaginable.

6.2.3 Opérateur statistique pour un système à deux niveaux

Comme exemple, nous allons donner la forme la plus générale de l'opérateur statistique d'un système quantique à deux niveaux : l'espace de Hilbert des états est de dimension deux. Les applications sont multiples : description de la polarisation d'une particule massive de spin $1/2$, de la polarisation d'un photon, d'un atome à deux niveaux, etc. Comme un cas très courant de système à deux niveaux est celui du spin $1/2$, nous utiliserons ce cas particulier pour fixer les notations et la terminologie. Choisissons deux vecteurs de base de l'espace des états notés $|+\rangle$ et $|-\rangle$, qui sont par exemple les vecteurs propres de la composante z du spin. Dans cette base l'opérateur statistique est représenté par une matrice 2×2 , la *matrice statistique* ρ . Écrivons d'abord que cette matrice est hermitienne et de trace unité : la matrice la plus générale de ce type est

$$\rho = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & 1-a \end{pmatrix} \quad (6.38)$$

où a est un nombre réel et c un nombre complexe. L'équation (6.38) ne définit pas encore une matrice statistique, car en plus ρ doit être positive. Les valeurs propres λ_+ et λ_- de ρ vérifient

$$\lambda_+ + \lambda_- = 1 \quad \lambda_+ \lambda_- = \det \rho = a(1-a) - |c|^2$$

et on doit avoir $\lambda_+ \geq 0$ et $\lambda_- \geq 0$. La condition $\det \rho \geq 0$ implique que λ_+ et λ_- sont de même signe, et la condition $\lambda_+ + \lambda_- = 1$ que la valeur maximale du produit $\lambda_+ \lambda_-$ est $1/4$, soit finalement

$$0 \leq a(1-a) - |c|^2 \leq \frac{1}{4} \quad (6.39)$$

Une condition nécessaire et suffisante pour que ρ décrive un cas pur est

$$\det \rho = a(1-a) - |c|^2 = 0$$

À titre d'exercice, on peut calculer a et c pour la matrice statistique décrivant le vecteur d'état normalisé $|\psi\rangle = \lambda|+\rangle + \mu|-\rangle$ avec $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$, et vérifier que le déterminant de la matrice s'annule.

Il est souvent commode de décomposer la matrice statistique (6.38) sur la base des matrices de Pauli σ_i ; en effet toute matrice 2×2 hermitienne peut s'écrire comme une combinaison linéaire avec des coefficients réels de la matrice unité I et des σ_i

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & 1-b_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (I + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \quad (6.40)$$

Le vecteur \vec{b} , appelé *vecteur de Bloch*, doit vérifier $|\vec{b}|^2 \leq 1$ en raison de (6.39). Le cas pur, qui correspond à $|\vec{b}|^2 = 1$, est aussi appelé complètement polarisé, le cas $\vec{b} = 0$ non polarisé, ou de polarisation nulle, et le cas $0 < |\vec{b}| < 1$ partiellement polarisé. Pour interpréter physiquement le vecteur \vec{b} , on calcule la valeur moyenne du spin $\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$ en utilisant $\text{Tr} \sigma_i \sigma_j = 2\delta_{ij}$ et on en déduit

$$\langle S_i \rangle = \text{Tr} (\rho S_i) = \frac{1}{2} \hbar b_i \quad (6.41)$$

$\hbar \vec{b}/2$ est donc la valeur moyenne $\langle \vec{S} \rangle$ du spin. Il est utile de donner une représentation géométrique du vecteur de Bloch (figure 6.1) : \vec{b} est un vecteur d'origine O défini par ses angles polaires (θ, ϕ) et dont l'extrémité se trouve à l'intérieur d'une sphère de centre O et de rayon unité, la *sphère de Poincaré-Bloch*¹⁴. Un cas pur correspond à un vecteur dont l'extrémité se trouve la surface de la sphère.

Il est essentiel de bien faire la différence entre état pur et mélange : supposons par exemple qu'un spin 1/2 soit dans l'état pur

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \quad (6.42)$$

L'analyse par un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique \vec{B} est parallèle à Oz va donner une probabilité de 50 % de déviation vers le haut et 50 % de déviation vers le bas. Cependant l'état (6.42) est un état propre de S_x , $|\chi\rangle = |+\hat{x}\rangle$: si \vec{B} est parallèle à Ox , 100 % des spins seront déviés dans la direction des x positifs : le vecteur de Bloch est $\vec{b} = (1, 0, 0)$. Lorsque $\vec{b} = 0$, cas non polarisé où la matrice statistique est donnée par (6.37), les probabilités de déviation vers les x positifs et négatifs seront toujours de 50 % : en fait, *quelle*

14. Cette sphère a été introduite la première fois par Poincaré pour décrire la polarisation de la lumière, et redécouverte par Bloch pour la description du spin 1/2.

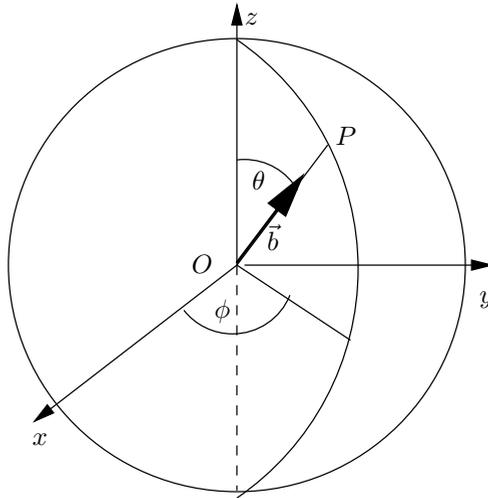


FIG. 6.1 – La sphère de Poincaré-Bloch et le vecteur de Bloch \vec{b} ($OP = 1$).

que soit l'orientation de l'appareil de Stern-Gerlach, il y aura toujours 50 % des spins déviés dans la direction de \vec{B} et 50 % dans celle de $-\vec{B}$. La différence entre les deux cas est que pour le cas pur (6.42), état complètement polarisé, il existe une *relation de phase* bien définie entre les amplitudes pour trouver $|\chi\rangle$ dans les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. L'état pur $|\chi\rangle$ est une superposition *cohérente* des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, et le mélange (6.37) est une superposition *incohérente* de ces mêmes états. Dans un mélange, l'information sur les phases est perdue, au moins partiellement (car il peut bien sûr exister des états partiellement polarisés $0 < |\vec{b}| < 1$); elle est totalement perdue pour un état non polarisé. L'information sur les phases est contenue dans les éléments de matrice non diagonaux, les cohérences de la matrice statistique ρ .

Les mêmes remarques valent pour la polarisation de la lumière, ou la polarisation d'un photon : une lumière non polarisée est une superposition incohérente de lumière polarisée linéairement à 50 % suivant Ox et 50 % suivant Oy , sans relation de phase entre les deux. Une lumière polarisée circulairement à droite $|D\rangle$ ou à gauche $|G\rangle$ est décrite par les vecteurs (3.24)

$$|D\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle) \quad |G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle) \quad (6.43)$$

Une telle lumière sera arrêtée à 50 % par un polariseur linéaire dirigé suivant Ox , et plus généralement suivant un axe quelconque, tout comme une lumière non polarisée, mais elle sera transmise à 100 % ou complètement arrêtée par un analyseur circulaire. Au contraire, si les photons sont non polarisés, tout polariseur (λ, μ) (cf. § 3.1.1) laissera passer les photons avec une probabilité de 50 %.

De façon générale, la caractéristique d'un état pur est qu'il existe un test maximal dont un des résultats a une probabilité de 100 %, tandis que pour un mélange il n'existe pas de test maximal possédant cette propriété (exercice 6.6.3). Dans le cas du spin 1/2, cela veut dire qu'il n'existe pas d'orientation de \vec{B} telle que 100 % des spins soient déviés dans la direction de \vec{B} , et dans celui du photon qu'il n'existe pas de polariseur (λ, μ) laissant passer tous les photons avec probabilité unité.

6.2.4 Non-unicité de la préparation

Nous avons donné une préparation possible de la forme diagonale (6.23) de l'opérateur statistique : chaque état $|i\rangle$ apparaît avec la probabilité p_i . Mais dès que les valeurs propres sont dégénérées, nous voyons que cette préparation ne peut pas être unique : si une valeur propre p_k est dégénérée, nous pouvons choisir comme états des superpositions linéaires arbitraires dans le sous-espace de cette valeur propre. En fait la situation est encore bien plus ambiguë, car rien n'oblige à choisir des états orthogonaux : on peut parfaitement utiliser la décomposition (6.20) avec $\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle \neq \delta_{\alpha\beta}$. Une préparation détermine ρ , mais à un opérateur statistique donné correspondent une infinité de préparations possibles. Donnons un exemple simple sur le cas du spin 1/2. Supposons qu'un expérimentateur, Bob, envoie à sa collègue Alice une série de spins 1/2 qui ont probabilité p de se trouver dans l'état $|+\rangle$, et probabilité $q = 1 - p$ de se trouver dans l'état $|-\rangle$. On peut par exemple imaginer que Bob utilise un filtre de Stern-Gerlach pour préparer des spins dans l'état $|+\rangle$, et qu'il dispose à la sortie du filtre d'un champ magnétique oscillant qui soumet les spins à une impulsion π de façon aléatoire, telle que l'oscillation de Rabi soit effective avec une probabilité q , et qu'elle ne soit pas appliquée avec une probabilité p . Tous les résultats des mesures que peut faire Alice s'expriment en fonction de la matrice statistique

$$\rho = p|+\rangle\langle+| + q|-\rangle\langle-| = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & q \end{pmatrix} \quad (6.44)$$

En résumé, la préparation est la suivante : le spin apparaît dans l'état $|+\rangle$ avec la probabilité p et dans l'état $|-\rangle$ avec la probabilité $q = 1 - p$. Afin d'exhiber une autre préparation possible, définissons les états $|R\rangle$ et $|L\rangle$, $\langle L|R\rangle \neq 0$

$$|R\rangle = \sqrt{p}|+\rangle + \sqrt{q}|-\rangle \quad |L\rangle = \sqrt{p}|+\rangle - \sqrt{q}|-\rangle \quad (6.45)$$

Les projecteurs $|R\rangle\langle R|$ et $|L\rangle\langle L|$ sont

$$|R\rangle\langle R| = \begin{pmatrix} p & \sqrt{pq} \\ \sqrt{pq} & q \end{pmatrix} \quad |L\rangle\langle L| = \begin{pmatrix} p & -\sqrt{pq} \\ -\sqrt{pq} & q \end{pmatrix}$$

et manifestement, si Bob envoie à Alice des spins dans l'état $|R\rangle$ ou dans l'état $|L\rangle$ avec une probabilité 50 %, l'opérateur ρ est inchangé

$$\rho = \frac{1}{2} (|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|) \quad (6.46)$$

Dans cette autre préparation correspondant au même opérateur statistique, le spin apparaît dans l'état $|R\rangle$ avec la probabilité $1/2$ et dans l'état $|L\rangle$ avec la probabilité $1/2$. Alice n'a aucun moyen de déterminer quelle est la préparation utilisée par Bob. Un autre exemple de la non-unicité des préparations est donné dans l'exercice 6.6.7. Si l'on reprend l'exemple de la distribution canonique (6.22), il est habituel de dire que « le système se trouve dans l'état E_r avec une probabilité $p(E_r) = Z^{-1} \exp(E_r/k_B T)$ », mais cette affirmation, bien qu'intuitivement commode, ne correspond qu'à une préparation particulière, et il existe une infinité d'autres préparations donnant le même opérateur statistique.

En outre, il existe une autre situation, entièrement différente, où l'état de spin dont dispose Alice est décrit par la matrice statistique ρ (6.44). Supposons en effet qu'Alice et Bob disposent de paires de spins dans un état intriqué $|\Phi_{AB}\rangle$; l'opérateur statistique d'Alice est

$$\rho(\equiv \rho_A) = \text{Tr}_B |\Phi_{AB}\rangle \langle \Phi_{AB}| \quad (6.47)$$

Alice effectue des mesures sur le spin \mathcal{A} et Bob sur le spin \mathcal{B} . Choisissons pour $|\Phi_{AB}\rangle$

$$|\Phi_{AB}\rangle = \sqrt{p} |+_A \otimes +_B\rangle + \sqrt{q} |-_A \otimes -_B\rangle \quad (6.48)$$

L'opérateur statistique (6.47) coïncide avec (6.44)

$$\text{Tr}_B |\Phi_{AB}\rangle \langle \Phi_{AB}| = p |+_A\rangle \langle +_A| + q |-_A\rangle \langle -_A|$$

Si Alice est limitée à des mesures sur le spin \mathcal{A} , elle n'a aucun moyen de distinguer entre la situation où Bob lui envoie des spins orientés de façon aléatoire, et celle où elle mesure le spin \mathcal{A} d'une paire intriquée \mathcal{AB} dans l'état (6.48). Le vecteur $|\Phi_{AB}\rangle$ est appelé une *purification* de l'opérateur statistique ρ_A . Il existe une infinité de façons d'écrire la purification, par exemple, en utilisant la base $\{|+, \hat{x}_B\rangle, |-, \hat{x}_B\rangle\}$ qui diagonalise σ_{xB} . Un calcul immédiat permet de mettre $|\Phi_{AB}\rangle$ sous la forme

$$|\Phi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R_A \otimes +, \hat{x}_B\rangle + |L_A \otimes -, \hat{x}_B\rangle) \quad (6.49)$$

Supposons que Bob mesure la composante σ_{zB} du spin \mathcal{B} . S'il trouve la valeur $+1$ (avec une probabilité p), alors Alice recevra le spin \mathcal{A} dans l'état $|+_A\rangle$, et s'il mesure la valeur -1 (avec une probabilité q), alors Alice recevra le spin \mathcal{A} dans l'état $|-_A\rangle$. Ceci correspond à la préparation (6.44) de ρ . Si au contraire Bob mesure dans la base de σ_{xB} , Alice recevra le spin \mathcal{A} dans l'état $|R_A\rangle$ ou $|L_A\rangle$ avec une probabilité de 50 %, ce qui correspond à la préparation (6.46) de ρ .

La généralisation de ces résultats a été énoncée par Gisin, Hughston, Josza et Wootters (GHJW) sous la forme du théorème suivant énoncé sans démonstration.

Théorème GHJW. Soit un opérateur statistique ρ agissant dans \mathcal{H}_A de dimension d_A et N préparations

$$\rho = \sum_{i=1}^{D_n} \mathbf{p}_i^{(n)} |\varphi_i^{(n)}\rangle \langle \varphi_i^{(n)}| \quad (6.50)$$

Il existe alors dans \mathcal{H}_{AB} de dimension $\geq d_A \times D$, avec $D = \text{Max}[D_n]$, un vecteur $|\Phi_{AB}\rangle$ et D_n propriétés physiques $B_i^{(n)}$ telles qu'une mesure de $B_i^{(n)}$ laisse le système \mathcal{A} dans l'état $|\varphi_i^{(n)}\rangle$ avec probabilité $\mathbf{p}_i^{(n)}$.

En résumé, lorsqu'Alice est limitée à des mesures sur le spin \mathcal{A} , elle peut déterminer ρ en effectuant un nombre suffisant de mesures, mais elle ne peut pas savoir si Bob lui envoie la préparation (6.44) de ρ ou la préparation (6.45) (ou une autre). Elle ne peut pas non plus savoir si Bob lui envoie, par exemple, une série spins qui se trouvent avec probabilité \mathbf{p} (\mathbf{q}) dans l'état $|+\rangle$ ($|-\rangle$), ou si elle mesure le spin \mathcal{A} de paires intriquées \mathcal{AB} de deux spins dans l'état $|\Phi_{AB}\rangle$ (6.48). Cependant, les deux situations diffèrent radicalement. Dans le premier cas chacun des spins \mathcal{A} se trouve dans un état bien défini, même s'il est inconnu d'Alice : les opérateurs statistiques construits à partir de (6.20) seront appelés *mélanges propres*. Dans le second cas, l'état de spin n'est pas seulement inconnu d'Alice, *il n'existe pas* tant que Bob (ou Alice) n'ont effectué aucune mesure : dans une paire intriquée de spins 1/2, comme celle décrite par (6.15), *l'état de spin d'une particule individuelle n'existe pas!* Un opérateur statistique obtenu en prenant une trace partielle sur un état pur de \mathcal{H}_{AB} sera appelé *mélange impropre*. Cette distinction entre les deux types de mélange sera fondamentale pour la discussion de la mesure.

6.2.5 Dépendance temporelle de l'opérateur statistique

Il n'est pas difficile de trouver la loi d'évolution temporelle de l'opérateur statistique pour un système fermé. En effet, si nous considérons d'abord l'opérateur statistique d'un cas pur, nous obtenons l'équation d'évolution suivante pour le projecteur $\mathcal{P}_{\varphi(t)}$ en utilisant (4.11)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{P}_{\varphi(t)} = i\hbar \frac{d}{dt} (|\varphi(t)\rangle \langle \varphi(t)|) = H(t) \mathcal{P}_{\varphi(t)} - \mathcal{P}_{\varphi(t)} H(t) = [H(t), \mathcal{P}_{\varphi(t)}]$$

En sommant sur les probabilités \mathbf{p}_α on obtient l'équation d'évolution de $\rho(t)$

$$\boxed{i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H(t), \rho(t)]} \quad (6.51)$$

On obtient une loi équivalente en utilisant l'opérateur d'évolution $U(t, 0)$ (4.14)

$$\rho(t) = U(t, 0) \rho(t=0) U^{-1}(t, 0) \quad (6.52)$$

Une telle évolution temporelle de l'opérateur statistique est appelée *évolution hamiltonienne*, ou *évolution unitaire* (cf. § 4.2.1). Il est intéressant d'observer qu'un état de désordre maximal est un invariant dynamique car $[H, \rho] = 0$ si $\rho = I/d$.

Comme exemple important, écrivons la loi d'évolution de l'opérateur statistique d'un spin 1/2 dans un champ magnétique constant. Avec \vec{B} parallèle à Oz , le hamiltonien (3.62) s'écrit

$$H = -\frac{1}{2}\gamma\sigma_z$$

et l'équation d'évolution (6.51) devient, en utilisant les relations de commutation (3.52) et le vecteur de Bloch \vec{b} (6.40)

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho] = -\frac{1}{2}\gamma B(b_x\sigma_y - b_y\sigma_x) \quad (6.53)$$

ce qui est équivalent à

$$\frac{db_x}{dt} = -\gamma B b_y \quad \frac{db_y}{dt} = \gamma B b_x \quad \frac{db_z}{dt} = 0$$

soit sous forme vectorielle

$$\frac{d\vec{b}}{dt} = -\gamma\vec{B} \times \vec{b} \quad (6.54)$$

ce qui est exactement l'équation différentielle classique (3.31) donnant la précession de Larmor. Le vecteur de Bloch suit le même mouvement qu'un spin classique.

Dans notre discussion de la RMN au § 5.2.2, nous avons examiné un spin isolé. En fait les spins se trouvent dans un environnement fluctuant à la température T , et, en l'absence de champ de radiofréquences, ils sont décrits par un opérateur statistique ρ correspondant à l'équilibre thermique dans un champ magnétique constant \vec{B}_0

$$\rho \simeq \frac{1}{2} \left(I + \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T} \sigma_z \right) = \frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \delta\mathbf{p} \sigma_z \right) \quad (6.55)$$

où $\delta\mathbf{p}$ est la différence de populations $\delta\mathbf{p} = \mathbf{p}_+ - \mathbf{p}_-$ (5.45) entre les niveaux $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Le vecteur de Bloch a pour composantes $\vec{b} = (0, 0, \delta\mathbf{p}/2)$. L'application d'une impulsion de radiofréquences résonante pendant un temps $t = \theta/\omega_1$ transforme ρ en ρ_θ

$$\rho \rightarrow \rho_\theta = U[\mathcal{R}_x(-\theta)] \rho U^\dagger[\mathcal{R}_x(-\theta)]$$

en raison de (5.35). Il est facile d'effectuer explicitement le produit de matrices, mais il est plus élégant d'utiliser (2.53)

$$\begin{aligned} e^{i\theta\sigma_x/2}\sigma_z e^{-i\theta\sigma_x/2} &= \sigma_z + \frac{i\theta}{2}[\sigma_x, \sigma_z] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\theta}{2} \right)^2 [\sigma_x, [\sigma_x, \sigma_z]] + \dots \\ &= \sigma_z + \frac{i\theta}{2} \sigma_y - \frac{1}{2!} \theta^2 \sigma_z + \dots = \sigma_z \cos \theta + \sigma_y \sin \theta \end{aligned}$$

ce qui n'est pas autre chose que la loi de transformation des composantes y et z d'un vecteur dans une rotation d'angle $-\theta$ autour de Ox . On en déduit

$$\rho_\theta = \frac{1}{2} \left[I + \frac{1}{2} \delta p (\sigma_z \cos \theta + \sigma_y \sin \theta) \right] \quad (6.56)$$

Dans le cas particulier d'une impulsion $\pi/2$ ($\theta = \pi/2$), le résultat est

$$\rho_{\pi/2} = \frac{1}{2} \left[I + \frac{1}{2} \delta p \sigma_y \right] \quad (6.57)$$

Comme la matrice σ_y est non diagonale, on a créé des cohérences : *la différence de populations initiale a été convertie en cohérences*. Le retour à l'équilibre est contrôlé par le temps de relaxation T_2 . Dans le cas d'une impulsion π , on obtient une inversion des populations des niveaux $|+\rangle$ et $|-\rangle$ et le retour à l'équilibre est contrôlé par le temps de relaxation T_1 . On utilise de préférence une impulsion $\pi/2$ car en général $T_2 \ll T_1$.

6.2.6 Postulats

L'introduction de l'opérateur statistique permet de donner une formulation plus générale des postulats du chapitre 4.

- **Postulat Ia.** L'état d'un système quantique est représenté mathématiquement par un opérateur statistique ρ agissant dans un espace de Hilbert des états \mathcal{H} .
- **Postulat IIa.** La probabilité p_χ de trouver le système quantique dans l'état $|\chi\rangle$ est donnée par

$$p_\chi = \text{Tr}(\rho |\chi\rangle\langle\chi|) = \text{Tr}(\rho \mathcal{P}_\chi) \quad (6.58)$$

- **Postulat IVa.** L'évolution temporelle de l'opérateur statistique est donnée par (6.51), le postulat **III** restant inchangé.

Soulignons à nouveau que (6.51) ne vaut que pour un système fermé. L'évolution temporelle de l'opérateur statistique d'un système qui n'est pas fermé est beaucoup plus complexe et sera examinée au chapitre 17. En mécanique statistique, le cas d'un système en contact avec un réservoir de chaleur donne un exemple typique de système qui n'est pas fermé. L'évolution de l'ensemble système+réservoir est unitaire (si cet ensemble est fermé!), mais celle du système, obtenue en prenant la trace sur les variables du réservoir, ne l'est pas¹⁵.

15. Dans une évolution hamiltonienne, l'entropie de von Neumann $-\text{Tr} \rho \ln \rho$ est conservée, mais ce n'est pas le cas pour une évolution non hamiltonienne : l'entropie de von Neumann d'un système en contact avec un réservoir de chaleur n'est pas constante.

6.3 Corrélations quantiques

6.3.1 États de Bell et de Hardy

Considérons un état de Bell $|\Phi\rangle$ (6.15) de deux spins $1/2$ \mathcal{A} et \mathcal{B} , et supposons qu'Alice et Bob mesurent respectivement la composante du spin \mathcal{A} et du spin \mathcal{B} suivant des directions \hat{a} et \hat{b} . La forme de $|\Phi\rangle$ implique une anticorrélation complète entre les composantes Oz des deux spins, et compte tenu de l'invariance par rotation de (6.15), la probabilité jointe de trouver les spins orientés dans la même direction ($\hat{a} \equiv \hat{b}$) est nulle quelle que soit cette direction. Afin de simplifier la géométrie, nous supposons que \hat{a} et \hat{b} sont situés dans le plan xOz et font un angle θ_A et θ_B avec l'axe Oz (figure 6.2). Alice et Bob vont utiliser trois angles différents pour leurs mesures : $\theta_A = \theta_1, \theta_2$ ou θ_3 et $\theta_B = \theta_1, \theta_2$ ou θ_3 . Soit p_{ij} la probabilité jointe pour que le spin \mathcal{A} soit orienté dans la direction θ_i et le spin \mathcal{B} suivant la direction θ_j . On a bien sûr $p_{ii} = 0$, et il n'est pas très compliqué de calculer p_{ij} , $i \neq j$. On remarque tout d'abord que p_{ij} ne peut dépendre que de la différence $\theta_{ij} = (\theta_i - \theta_j)$ en raison de l'invariance par rotation. Choisissons $\theta_i = 0$ et $\theta_j = \theta$. D'après (3.59), l'état $|+\theta\rangle$ obtenu à partir de $|+\rangle$ par une rotation de θ autour de Oy est

$$|+\theta\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (6.59)$$

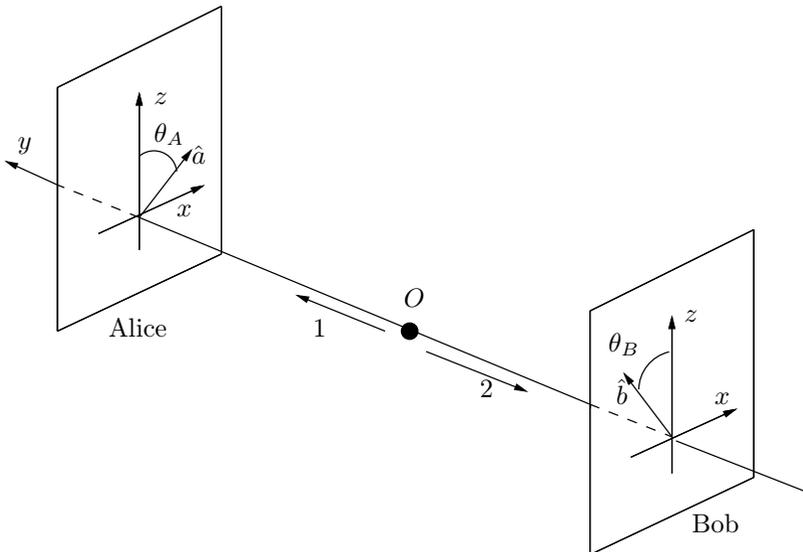


FIG. 6.2 – Configuration des axes pour l'expérience de mesure de deux spins.

et le produit tensoriel $|+\otimes+\theta\rangle$ vaut

$$|+\otimes+\theta\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\otimes+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|+\otimes-\rangle \quad (6.60)$$

L'amplitude de probabilité $a(|\Phi\rangle \rightarrow |+\otimes+\theta\rangle)$ est donnée par le produit scalaire

$$\langle +\otimes+\theta|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\frac{\theta}{2}$$

d'où la probabilité

$$p(|\Phi\rangle \rightarrow |+\otimes+\theta\rangle) = p_{ij} = \frac{1}{2} \sin^2\frac{\theta}{2} \quad (6.61)$$

Notre objectif est de montrer qu'aucune distribution de probabilité classique « raisonnable » (la signification de cet adjectif sera précisée ultérieurement) n'est compatible avec (6.61). Afin d'éviter les facteurs $\hbar/2$, nous allons considérer la mesure de l'opérateur

$$\sigma(\theta) = \sigma_z \cos\theta + \sigma_x \sin\theta$$

dont le résultat est soit $+1$, soit -1 . Le raisonnement qui sous-tend l'hypothèse d'une distribution de probabilité classique est le suivant : alors que la mécanique quantique nous dit que les valeurs mesurées des propriétés physiques ne préexistent pas à la mesure, le raisonnement probabiliste classique suppose au contraire que ces propriétés possèdent des valeurs qui préexistent à la mesure, et que la mesure a pour seul effet de révéler une réalité préexistante. C'est l'hypothèse du *réalisme*. Les valeurs moyennes sont obtenues comme des moyennes d'ensemble, les valeurs préexistantes fluctuant d'une paire à l'autre. On introduit donc un nombre suffisant de variables classiques c_j , dites *variables cachées*, avec une certaine distribution de probabilité. Dans l'exemple qui nous concerne, nous allons introduire 9 variables cachées c_i sous forme de couples $(\sigma_k\tau_l)$

$$c_1 = \sigma_1\tau_1, c_2 = \sigma_1\tau_2, \dots, c_9 = \sigma_3\tau_3$$

où $\sigma_i = \pm 1$ ($\tau_i = \pm 1$), $i = 1, 2, 3$ est le résultat de la mesure de $\sigma(\theta_i)$ pour le spin \mathcal{A} (\mathcal{B}). Chaque variable c_i peut prendre 4 valeurs : $\sigma_k\tau_l = ++, +-, -+, --$, et la distribution de probabilité $p(c_1, \dots, c_9)$ comprend donc 4^9 termes. Il est intuitivement évident, et ceci est confirmé par des modèles explicites tels que celui de Bohm, qu'une distribution adéquate $p(c_1, \dots, c_9)$ est capable de reproduire tous les résultats de la mécanique quantique. Pour restreindre p , nous allons ajouter l'hypothèse suivante, dite de *localité*, sur laquelle nous reviendrons dans la sous-section suivante : l'orientation de l'appareil de Stern-Gerlach utilisé pour mesurer le spin \mathcal{A} ne peut pas influencer le résultat de la mesure du spin \mathcal{B} . Dans ces conditions, une variable cachée telle que $\sigma_1\tau_2$ n'est pas admissible, car elle est non locale. La

conjonction des hypothèses de réalisme et de localité est appelée hypothèse du *réalisme local*. Cette hypothèse, même si elle n'est pas formulée de façon aussi explicite, sous-tend le raisonnement de l'article original d'Einstein, Podolsky et Rosen (Einstein *et al.* [1935]), connu sous ses initiales EPR. Dans les conditions du réalisme local, si $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 = \pm 1$ et $\tau_1, \tau_2, \tau_3 = \pm 1$ sont les résultats des mesures du spin suivant les directions $\theta_1, \theta_2, \theta_3$, il devrait exister une distribution de probabilité jointe $\mathbf{p}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3; \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ décrivant les résultats de toutes ces mesures. L'hypothèse de localité réduit le nombre de termes de $4^9 = 262\,144$ à $2^6 = 64$. Soulignons à nouveau que pour une paire de spins donnée, σ_1, \dots, τ_3 ont des valeurs bien déterminées, mais ces valeurs fluctuent d'une paire à l'autre, les fluctuations étant décrites par la distribution jointe. Cette vision est orthogonale à la vision quantique, puisque l'on admet que, si on mesure la composante σ_1 du spin \mathcal{A} suivant la direction θ_1 par exemple, les composantes σ_2 et σ_3 de ce même spin existent suivant les directions θ_2 et θ_3 , bien qu'une mesure simultanée des trois composantes ne soit pas possible. Les composantes existent, même si nous ne les mesurons pas : c'est la conséquence du réalisme¹⁶. Les composantes σ_i et τ_i sont les « éléments de réalité » introduits dans l'article EPR.

Il existe *a priori* 64 termes $\mathbf{p}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3; \tau_1, \tau_2, \tau_3)$, mais la condition $\sigma_i = -\tau_i$ en réduit le nombre à 8. La probabilité jointe \mathbf{p}_{13} pour que le spin \mathcal{A} soit orienté suivant θ_1 et le spin \mathcal{B} suivant θ_3 est

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{13} &= \sum_{\sigma_2, \sigma_3} \sum_{\tau_1, \tau_2} \mathbf{p}(+, \sigma_2, \sigma_3; \tau_1, \tau_2, +) \\ &= \mathbf{p}(++-; --+) + \mathbf{p}(+- -; -++) \end{aligned}$$

On trouve de même pour \mathbf{p}_{23} et \mathbf{p}_{12}

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{23} &= \mathbf{p}(++-; --+) + \mathbf{p}(-+-; +-+) \\ \mathbf{p}_{12} &= \mathbf{p}(+-+; -+-) + \mathbf{p}(+--; -++) \end{aligned}$$

Les probabilités étant positives, on déduit de ces équations

$$\mathbf{p}_{12} + \mathbf{p}_{23} \geq \mathbf{p}_{13} \tag{6.62}$$

Cette inégalité est un exemple *d'inégalité de Bell*. Elle n'est compatible avec le résultat (6.61) de la mécanique quantique que si

$$\sin^2 \frac{\theta_{12}}{2} + \sin^2 \frac{\theta_{23}}{2} \geq \sin^2 \frac{\theta_{13}}{2} \tag{6.63}$$

Choisissant $\theta_2 = 0$, $\theta_1 = -\theta_3 = \theta$, (6.63) devient

$$\cos^2 \frac{\theta}{2} \leq \frac{1}{2} \quad \text{soit} \quad \pi/2 \leq \theta \leq \pi$$

16. Contrairement à une idée reçue, le fait que des variables cachées correspondant à des opérateurs incompatibles puissent avoir simultanément des valeurs précises pour un système *individuel* ne contredit pas les inégalités de Heisenberg. Celles-ci contraignent les dispersions de mesures faites sur un grand nombre de systèmes dans le même état quantique.

Il existe donc un intervalle $]0, \pi/2[$ en θ où la mécanique quantique est incompatible avec le réalisme local.

Les *états de Hardy* donnent un second exemple d'impossibilité d'une distribution de probabilité classique, peut-être encore plus spectaculaire car il suffit de considérer 4 mesures possibles au lieu de 9. Pour définir les états de Hardy, considérons deux bases incompatibles pour deux spins 1/2, (A, α) pour \mathcal{A} et (B, β) pour \mathcal{B} , par exemple $A = \sigma_{zA}, \alpha = \sigma_{xA}, B = \sigma_{zB}, \beta = \sigma_{xB}$ avec des vecteurs propres $|A_{\pm}\rangle, \dots, |\beta_{\pm}\rangle$ et définissons l'état de Hardy $|\Phi_H\rangle$ par

$$|\Phi_H\rangle = |A_+B_+\rangle - |\alpha_+\beta_+\rangle \langle \alpha_+\beta_+ | A_+B_+\rangle \quad (6.64)$$

Cet état n'est pas normalisé

$$\|\Phi_H\|^2 = 1 - |\langle \alpha_+\beta_+ | A_+B_+\rangle|^2$$

mais ceci n'a aucune importance pour la discussion qui va suivre. Il existe 16 résultats possibles pour les mesures ($A_{\pm} = \pm 1$, etc.)

$$(A_+, B_+), \dots, (\alpha_-\beta_-)$$

et on vérifie immédiatement que trois configurations ont une probabilité nulle

$$p(\alpha_-, B_-) = p(\alpha_+, \beta_+) = p(A_-, \beta_-) = 0 \quad (6.65)$$

car les amplitudes suivantes s'annulent

$$\langle \alpha_- B_- | \Phi_H \rangle = \langle \alpha_+ \beta_+ | \Phi_H \rangle = \langle A_- \beta_- | \Phi_H \rangle = 0$$

Cependant, on note que la probabilité conditionnelle $p(A_- | B_-)$ est certainement non nulle

$$p(A_-, B_-) \neq 0 \implies p(A_- | B_-) \neq 0 \quad (6.66)$$

Supposons dans le cadre du réalisme local l'existence d'une distribution de probabilité jointe

$$p(A_{\pm}, \alpha_{\pm}, B_{\pm}, \beta_{\pm})$$

Par inspection, il existe seulement 6 p différents de zéro

$$\begin{aligned} & p(A_+, \alpha_+, B_-, \beta_-) ; p(A_+, \alpha_+, B_-, \beta_+) ; p(A_+, \alpha_+, B_+, \beta_-) \\ & p(A_+, \alpha_-, B_+, \beta_-) ; p(A_+, \alpha_-, B_+, \beta_+) ; p(A_-, \alpha_-, B_+, \beta_+) \end{aligned} \quad (6.67)$$

On en déduit

$$p(A_+ | B_-) = 1 \text{ ce qui contredit } p(A_- | B_-) \neq 0$$

Il n'existe aucune distribution de probabilité jointe qui permette de calculer les valeurs moyennes, par exemple on ne peut pas calculer $\langle A\beta \rangle$ comme une moyenne d'ensemble

$$\langle A\beta \rangle = \sum_{A_{\pm}, \dots, \beta_{\pm}} A_{\pm} \beta_{\pm} p(A_{\pm}, \alpha_{\pm}, B_{\pm}, \beta_{\pm})$$

En physique quantique, les notions probabilistes s'appliquent à des systèmes individuels et ne correspondent pas à des moyennes d'ensemble. On peut connaître simultanément les corrélations

$$\langle AB \rangle, \langle A\beta \rangle, \langle \alpha B \rangle, \langle \alpha\beta \rangle$$

même si, par exemple A et α ne commutent pas, $[A, \alpha] \neq 0$.

Mermin a montré que la connaissance de toutes les corrélations possibles d'un système quantique, internes et externes, est équivalente à celle de son opérateur statistique (Mermin [1998]). Par exemple le projecteur sur l'état $|\Phi\rangle$ (6.15) est

$$\mathcal{P}_\Phi = \frac{1}{4} \left(I - \sum_{i=1}^3 \sigma_i^A \otimes \sigma_i^B \right)$$

et la donnée des corrélations de σ_A^i et σ_B^i est équivalente à celle de $|\Phi\rangle$

$$\langle \sigma_i^A \otimes \sigma_i^B \rangle = -1 \quad \forall i \iff |\Phi\rangle$$

La physique quantique fait un usage intensif des corrélations bien qu'il n'existe pas de propriétés à corrélérer : en général les particules quantiques ne possèdent pas de telles propriétés. Comme nous l'avons vu, un spin 1/2 appartenant à une paire dans l'état $|\Phi\rangle$ n'a pas d'état de spin.

6.3.2 Inégalités de Bell

Dans la sous-section précédente, nous avons montré l'incompatibilité de la mécanique quantique et du réalisme local. En dernier ressort, c'est à l'expérience de trancher entre deux possibilités théoriques incompatibles. Les expériences cruciales ont été effectuées avec des paires de photons intriqués en polarisation, et nous allons abandonner le spin 1/2 pour passer aux photons. Les premières expériences concluantes ont été réalisées avec des paires produites dans une cascade atomique (Aspect *et al.* [1982]). On utilise aujourd'hui une technique plus performante, la conversion paramétrique. Dans l'expérience de Weihs *et al.* [1998], la conversion paramétrique produit une paire de photons dans un état intriqué en polarisation

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x_A y_B\rangle - |y_A x_B\rangle) \quad (6.68)$$

où $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont des états de polarisation linéaire. Cet état est invariant par rotation autour de Oz . Soit en effet $|\theta\rangle$ et $|\theta_\perp\rangle$ les états de polarisation (3.23)-(3.24) pour un photon polarisé suivant les directions θ et θ_\perp

$$\begin{aligned} |\theta\rangle &= \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle \\ |\theta_\perp\rangle &= -\sin \theta |x\rangle + \cos \theta |y\rangle \end{aligned} \quad (6.69)$$

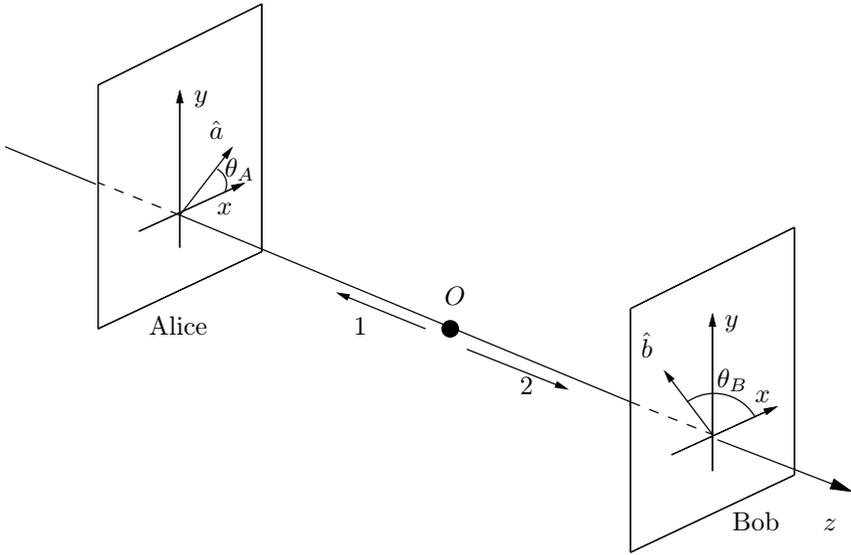


FIG. 6.3 – Définition des axes pour l'expérience avec des photons.

Un calcul immédiat montre que

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta_A\theta_{\perp B}\rangle - |\theta_{\perp A}\theta_B\rangle) \quad (6.70)$$

La polarisation des photons est analysée par Alice et Bob qui utilisent des axes \hat{a} et \hat{b} orientés suivant les directions θ_A et θ_B du plan xOy (figure 6.3). Introduisons la quantité $A(\hat{a})$ définie comme suit : $A(\hat{a}) = +1$ si la polarisation du photon est orientée suivant θ_A et $A(\hat{a}) = -1$ si elle est orientée suivant $\theta_{\perp A}$. On définit de même pour Bob $B(\hat{b}) = \pm 1$. À partir de mesures effectuées sur une série de \mathcal{N} paires intriquées, Alice et Bob construisent la quantité expérimentale suivante

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} A_n(\hat{a}) B_n(\hat{b}) \quad (6.71)$$

où $A_n = \pm 1$ et $B_n = \pm 1$ représentent le résultat de la mesure sur la paire numéro n . Nous supposons qu'Alice et Bob sont séparés par une distance telle qu'aucune information ne peut transiter entre les deux expérimentateurs pour des mesures effectuées sur une même paire n : l'orientation choisie par Alice pour mesurer la polarisation du photon \mathcal{A} ne peut pas influencer le résultat de la mesure effectuée par Bob sur le photon \mathcal{B} . C'est une conséquence de l'hypothèse de localité. Si Alice et Bob choisissent aléatoirement l'orientation de leurs polariseurs pendant que les photons sont en vol entre leur point de

production et leur détection, aucune information sur l'orientation choisie par Alice ne peut être parvenue à Bob quand il effectue sa propre mesure.

Ajoutons maintenant à l'hypothèse de localité celle de réalisme : comme les photons ne peuvent plus communiquer entre eux, chaque photon doit posséder indépendamment de l'autre toute l'information nécessaire sur $A_n(\hat{a})$ et $B_n(\hat{b})$, quelle que soit l'orientation choisie au dernier moment par Alice et Bob. L'information sur le couple $[A_n(\hat{a}), B_n(\hat{b})]$ doit exister pour tout choix de directions $[\hat{a}, \hat{b}]$, même si ce ne sont pas au final les directions choisies par Alice et Bob. Construisons la combinaison suivante X_n , dépendant de deux orientations (\hat{a}, \hat{a}') pour Alice et (\hat{b}, \hat{b}') pour Bob

$$\begin{aligned} X_n &= A_n(\hat{a})B_n(\hat{b}) + A_n(\hat{a})B_n(\hat{b}') + A_n(\hat{a}')B_n(\hat{b}') - A_n(\hat{a}')B_n(\hat{b}) \\ &= A_n(\hat{a})[B_n(\hat{b}) + B_n(\hat{b}')] + A_n(\hat{a}')[B_n(\hat{b}') - B_n(\hat{b})] \end{aligned} \quad (6.72)$$

Contrairement à celle de $E(\hat{a}, \hat{b})$, l'écriture de X_n repose sur un *a priori* théorique, celui où les particules a et b « possèdent » les propriétés $A_n(\hat{a}), \dots, B_n(\hat{b})$. Un seul des quatre couples possibles $\{A_n(\hat{a}), B_n(\hat{b})\} \dots \{A_n(\hat{a}'), B_n(\hat{b}')\}$ peut être effectivement mesuré dans une expérience sur la paire n , mais le résultat potentiel des trois autres expériences est bien défini, même s'il nous est inconnu.

Pour chaque paire, la combinaison X_n vaut ± 2 . En effet, on a soit $B_n(\hat{b}') = B_n(\hat{b})$, auquel cas $B_n(\hat{b}') - B_n(\hat{b}) = 0$ et $B_n(\hat{b}) + B_n(\hat{b}') = \pm 2$, soit $B_n(\hat{b}') = -B_n(\hat{b})$, auquel cas $B_n(\hat{b}') + B_n(\hat{b}) = 0$ et $B_n(\hat{b}) - B_n(\hat{b}') = \pm 2$. Comme les valeurs possibles de $A_n(\hat{a})$ et $A_n(\hat{a}')$ sont ± 1 , on a nécessairement $X_n = \pm 2$. La moyenne sur un grand nombre d'expériences ne peut donner qu'une valeur moyenne $\langle X \rangle$ dont la valeur absolue est inférieure à 2

$$\boxed{|\langle X \rangle| = \left| \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} X_n \right| \leq 2} \quad (6.73)$$

Le résultat $|\langle X \rangle| \leq 2$ est un autre exemple d'inégalité de Bell. Soulignons à nouveau que cette inégalité dépend de façon cruciale du réalisme local : le photon \mathcal{A} possède *simultanément* les propriétés $A_n(\hat{a})$ et $A_n(\hat{a}')$, le photon \mathcal{B} les propriétés $B_n(\hat{b})$ et $B_n(\hat{b}')$, et la localité implique que la valeur de $A_n(\hat{a})$ par exemple ne peut pas dépendre des orientations \hat{b} ou \hat{b}' de l'analyseur de Bob.

Quelles sont les prédictions de la mécanique quantique ? Utilisant l'invariance par rotation autour de Oz , on choisit \hat{a} suivant Ox et \hat{b} dans xOy faisant un angle θ avec Ox . Il faut calculer la probabilité

$$\text{p}(|\Psi_{AB}\rangle \rightarrow |x_A \otimes \theta_B\rangle)$$

avec

$$|x_A \otimes \theta_B\rangle = \cos \theta |x_A \otimes x_B\rangle + \sin \theta |x_A \otimes y_B\rangle$$

soit pour l'amplitude de probabilité

$$a(|\Psi_{AB}\rangle \rightarrow |x_A \otimes \theta_B\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$$

et pour la probabilité

$$p(|\Psi_{AB}\rangle \rightarrow |x_A \otimes \theta_B\rangle) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta \quad (6.74)$$

Comme on pouvait s'y attendre, il suffit de remplacer l'angle $\theta/2$ du résultat (6.61) pour le spin 1/2 par l'angle θ pour le photon de spin 1 et l'on trouve

$$E(\hat{x}, \hat{\theta}) = \frac{1}{2} [2 \cos^2 \theta - 2 \sin^2 \theta] = \cos(2\theta)$$

Faisons maintenant le choix suivant pour les axes de mesure des deux spins : \hat{a} est parallèle à \hat{x} , \hat{b} fait un angle de $\pi/8$ avec \hat{x} , \hat{a}' un angle de $-\pi/4$ et \hat{b}' un angle de $-\pi/8$ (figure 6.4). Les différentes valeurs moyennes sont données par

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = E(\hat{a}, \hat{b}') = E(\hat{a}', \hat{b}') = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad E(\hat{a}', \hat{b}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (6.75)$$

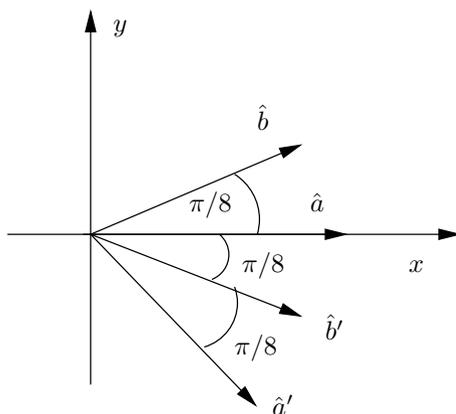


FIG. 6.4 – Configuration optimale des angles.

La combinaison $\langle X \rangle$ de ces valeurs moyennes vaut $-2\sqrt{2}$ en mécanique quantique

$$\langle X \rangle = E(\hat{a}, \hat{b}) + E(\hat{a}, \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b}') - E(\hat{a}', \hat{b}) = -2\sqrt{2} \quad (6.76)$$

On peut montrer que le choix des orientations de la figure 6.4 donne la valeur maximale de $|\langle X \rangle|$: $|\langle X \rangle|_{\max} = 2\sqrt{2}$. Cette valeur viole la borne (6.73) $|\langle X \rangle| \leq 2$. La mécanique quantique est incompatible avec les inégalités de Bell, et donc avec l'hypothèse du réalisme local : les corrélations de la mécanique

quantique sont trop fortes ! Les théories de variables cachées locales sont un exemple de théorie réaliste locale, et les prédictions de la mécanique quantique sont donc incompatibles avec toute théorie de ce type. La contradiction entre la mécanique quantique et le réalisme local vient de ce qu'une mesure en mécanique quantique ne peut pas attribuer simultanément des valeurs bien définies aux quatre quantités $A_n(\hat{a})$, $B_n(\hat{b})$, $A_n(\hat{a}')$ et $B_n(\hat{b}')$ de (6.72) pour une même paire de photons, car ces quantités correspondent à des valeurs propres d'opérateurs qui ne commutent pas tous entre eux. Une expérience permet de mesurer au plus deux de ces quantités simultanément, et sur deux particules différentes, et on n'a pas le droit de supposer l'existence de ces quantités, même inconnues, dans un raisonnement physique. La quantité X_n dans (6.72) est « contrefactuelle », c'est-à-dire qu'elle ne peut être mesurée dans aucune expérience réalisable.

Les premières expériences concluantes ont été réalisées par Aspect *et al.* [1982], voir aussi Aspect [1999]. Une expérience plus récente est celle de Weihs *et al.* [1998], que nous décrirons brièvement : un photon ultraviolet est converti dans un cristal non linéaire en deux photons dans l'état de polarisation (6.68) : figure 6.5. Dans cette expérience, on peut modifier de façon aléatoire l'orientation des analyseurs pendant que les photons sont en vol entre leur point de production et les détecteurs. En effet les deux détecteurs sont distants de 400 m, distance franchie par la lumière en $1.3 \mu\text{s}$, alors que la durée combinée des mesures individuelles et de la rotation des polariseurs ne dépasse pas 100 ns. Il est impossible que les détections d'Alice et de Bob soient reliées de façon causale et on élimine toute information sur l'orientation des analyseurs qui pourrait avoir été stockée à l'avance. La seule objection possible est que seulement 5 % des paires de photons sont détectées, et il faut admettre que ces 5 % constituent un échantillon représentatif. *A priori* on ne peut voir aucune raison qui s'y oppose¹⁷. On peut très raisonnablement affirmer que l'expérience a tranché en faveur de la mécanique quantique et a éliminé le principe de réalisme local d'Einstein. On pourrait être tenté de conclure que la physique quantique est non locale, mais cette « non-localité » ne contredit jamais la relativité restreinte, en ne permettant pas par exemple de transmission d'information à une vitesse supérieure à celle de la lumière, ou communication supraluminale : Alice et Bob observent chacun une suite aléatoire de +1 et de -1, qui ne contient aucune information, et c'est seulement en comparant leurs résultats transmis par une voie classique, à une vitesse inférieure à c , qu'ils peuvent se rendre compte de leur corrélation. On trouvera des commentaires additionnels sur ce point dans la section 6.5.1.

Plutôt que de non-localité, il est préférable de parler de *non-séparabilité du vecteur d'état* $|\Psi_{AB}\rangle$ (6.68), qui ne contient aucune référence à l'espace-temps. Les expériences décrites ci-dessus ne permettent de conclure à la non-localité

17. On admet que le résultat de l'élection du Président de la République en France peut être prédit avec un bon niveau de confiance sur un échantillon de 1000 personnes sur 30 millions d'électeurs, soit 0.003 % ! Mais il peut y avoir des surprises. . .

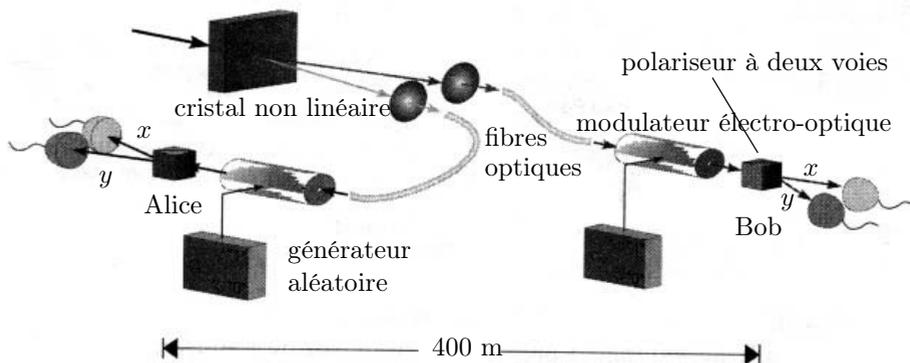


FIG. 6.5 – Expérience avec des photons intriqués. La paire de photons intriqués est produite dans un cristal non linéaire BBO et les deux photons partent dans des fibres optiques qui les amènent aux analyseurs de polarisation. D'après A. Zeilinger [1999].

uniquement que si on y ajoute le « réalisme » : c'est le « réalisme local » qui est réfuté.

6.3.3 Contextualité

Nous avons vu qu'une théorie de variables cachées doit être non locale si l'on exige qu'elle reproduise les résultats de la mécanique quantique. Une autre propriété qu'une telle théorie doit posséder est la *contextualité*. Afin d'expliquer ce concept, supposons que nous ayons en mécanique quantique deux ensembles d'opérateurs hermitiens (ou propriétés physiques) compatibles $\{K, L, M, \dots\}$ et $\{K, P, Q, \dots\}$, mais que les deux ensembles d'opérateurs ne soient pas compatibles entre eux : $[K, L] = [K, P] = [L, M] \dots = 0$, tandis que $[L, P] \neq 0$. Pour des opérateurs compatibles, une relation opératorielle $f(K, L, M, \dots) = 0$ implique que leurs valeurs propres k, l, m, \dots obéissent à la même relation fonctionnelle : $f(k, l, m, \dots) = 0$. Peut-on généraliser cette propriété si on considère des opérateurs non compatibles ? Pour répondre à cette question, considérons le tableau suivant de 9 opérateurs formés avec les opérateurs de spin de deux particules \mathcal{A} et \mathcal{B} (Mermin [1993])

$$\begin{array}{lll}
 K = \sigma_x^A & L = \sigma_x^B & M = \sigma_x^A \sigma_x^B = KL \\
 P = \sigma_y^B & Q = \sigma_y^A & R = \sigma_y^A \sigma_y^B = QP \\
 U = \sigma_x^A \sigma_y^B & V = \sigma_y^A \sigma_x^B & W = \sigma_z^A \sigma_z^B = UV
 \end{array}$$

Ces 9 opérateurs ont pour valeurs propres ± 1 , les 3 opérateurs de chaque ligne commutent et il en est de même pour ceux de chaque colonne. On devrait donc avoir

$$m = kl \quad r = pq \quad w = uv$$

car $W = UV$. On en déduit

$$mrw = (kl)(pq)(uv) = (kp)(lq)(uv) = (uv)^2 = 1$$

Ce résultat est en contradiction avec l'identité opératorielle $MRW = -I$. Nous venons d'exhiber un cas particulier du *théorème de Kochen-Specker* : il est impossible d'associer leurs valeurs propres à chacun des opérateurs d'un sous-ensemble d'opérateurs compatibles, si l'on exige que ces valeurs propres obéissent aux mêmes relations fonctionnelles que les opérateurs. Dans une théorie de variables cachées reproduisant les résultats de la mécanique quantique, les valeurs de ces variables sont *contextuelles* : elles doivent dépendre des propriétés physiques qui sont mesurées simultanément. Si on mesure une propriété physique K simultanément à L et M , on ne peut pas lui attribuer la même valeur que si on la mesure simultanément à P et Q . Hasegawa *et al.* [2006] ont montré qu'une théorie de variables cachées non contextuelle est incompatible avec l'expérience.

L'observation que toute théorie de variables cachées doit être contextuelle n'est pas obligatoirement un argument décisif contre de telles théories. Cependant, l'hypothèse de non-contextualité est dans certains cas équivalente à celle de localité, comme le montre l'exemple des états GHZ (exercice 6.6.9).

6.4 Décohérence et mesure

6.4.1 Définition de la décohérence

Nous allons désormais interpréter un système intriqué de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ comme formé du système qui nous intéresse, \mathcal{A} , et d'un environnement \mathcal{E} : l'espace de Hilbert sera donc $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$. Le phénomène de décohérence est contenu dans l'équation (6.34) : dans l'état intriqué $|\Phi_{AE}\rangle$ construit avec des vecteurs $|\varphi_{i_A}\rangle \in \mathcal{H}_A$ et les vecteurs $|\chi_{i_E}\rangle$ d'une base orthonormée de \mathcal{H}_E

$$|\Phi_{AE}\rangle = \sum_i c_i |\varphi_{i_A}\rangle \otimes |\chi_{i_E}\rangle \quad (6.77)$$

l'état $|\varphi_{i_A}\rangle \in \mathcal{H}_A$ du système est corrélé à un état $|\chi_{i_E}\rangle \in \mathcal{H}_E$ de l'environnement, et ces états vérifient la condition d'orthogonalité

$$\langle \chi_{i_E} | \chi_{j_E} \rangle = \delta_{ij} \quad (6.78)$$

Dans ces conditions, l'équation (6.34) donne l'opérateur statistique de \mathcal{A}

$$\rho_A = \text{Tr}_{\mathcal{E}} |\Phi_{AE}\rangle \langle \Phi_{AE}| = \sum_i |c_i|^2 |\varphi_{i_A}\rangle \langle \varphi_{i_A}| \quad (6.79)$$

ρ_A ne dépend que du module de c_i , et toute l'information sur les phases des nombres complexes c_i a disparu dans ρ_A . En résumé, *si des états du système \mathcal{A}*

sont corrélés à des états orthogonaux de l'environnement \mathcal{E} , toute cohérence de phase entre les états de \mathcal{A} est perdue. Cette perte de la cohérence de phase est appelée *décohérence*.

La décohérence vient de ce que l'état de \mathcal{E} agit comme un *marqueur* de l'état de \mathcal{A} . Ceci est illustré par une expérience d'interférences. Dans la discussion des expériences d'interférences du chapitre 1, nous avons insisté sur le fait que les interférences étaient détruites s'il était possible, au moins en principe, de connaître la trajectoire de la particule et de déterminer si elle était passée par une fente plutôt que par l'autre. La qualification « au moins en principe » est cruciale : il importe peu qu'un expérimentateur soit ou non présent pour effectuer l'observation, et il importe peu que l'observation soit ou non possible avec les techniques expérimentales d'aujourd'hui. Il suffit de concevoir que cette observation soit possible en principe dans le cadre du dispositif expérimental envisagé.

Imaginons une expérience où une particule 1 passe à travers un dispositif de fentes d'Young, et soit $|a_1\rangle$ (resp. $|a'_1\rangle$) son état quantique lorsqu'elle passe par la fente F (resp. F'), c'est-à-dire son état quantique quand la fente F' (resp. F) est fermée. Supposons l'état de la particule 1 intriqué avec celui d'une particule 2, l'état global $|\Psi\rangle$ étant

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a_1 \otimes a_2\rangle + |a'_1 \otimes a'_2\rangle)$$

Si par exemple les deux particules sont issues de la désintégration d'une particule instable d'impulsion nulle, leurs impulsions sont corrélées par conservation de l'impulsion

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$$

La mesure de \vec{p}_2 donne une information sur \vec{p}_1 , et peut permettre sous certaines conditions de remonter à la trajectoire de la particule 1, et par exemple de déterminer la fente d'Young choisie par celle-ci, ce qui entraîne la destruction des interférences. Dans le cas des interférences avec une seule particule, on dit souvent que l'observation de la trajectoire « perturbe » celle-ci, et que cette perturbation est à l'origine de la destruction des interférences. Notre exemple d'interférences avec des particules intriquées confirme la discussion du § 1.4.4 en montrant que cette « explication » passe à côté du point essentiel : dans cette nouvelle expérience, la particule 1 n'est jamais observée, et c'est l'information fournie sur 1 par une mesure effectuée (ou non effectuée !) sur 2 qui permet de conclure à la destruction des interférences. C'est la possibilité d'étiqueter les différentes trajectoires, et non la perturbation due à leur observation, qui est à l'origine de la destruction des interférences.

Comme nous l'avons vu, la décohérence détruit la cohérence de phase. Toutefois, les phases ont seulement disparu *localement*, c'est-à-dire si on se limite à des mesures sur le système \mathcal{A} . Il est facile de trouver des propriétés physique jointes de \mathcal{A} et \mathcal{E} dont les éléments de matrice dépendent des phases des coefficients c_i . Si l'on est capable de garder le contrôle de l'ensemble des

variables quantiques du système \mathcal{AE} , alors on a affaire à une « fausse décohérence », dont un exemple (théorique!) a été donné par Hagley *et al.* [1997]. Un autre exemple est fourni par une expérience de trous d'Young effectuée avec des atomes : si les électrons sont considérés comme l'environnement des noyaux, il est clair que les fonctions d'onde électroniques correspondant aux atomes passant par l'une ou l'autre des deux fentes sont orthogonales. Mais les fonctions d'onde électroniques suivent adiabatiquement le mouvement des noyaux, et la recombinaison des deux amplitudes se fait sur l'écran de façon cohérente, avec des interférences. Au contraire, si l'on perd le contrôle des variables de l'environnement, alors on a affaire à une vraie décohérence : l'information fuit de façon incontrôlable dans l'environnement. Par exemple, si l'environnement est constitué des photons du rayonnement du fond cosmologique à 3 K, il est évidemment impossible de garder le contrôle sur les photons de ce rayonnement qui ont diffusé sur le système.

Le *temps de décohérence* τ_{dec} est le temps caractéristique de décroissance de la cohérence de phase. Ce temps de décohérence est d'autant plus court que le système \mathcal{A} est complexe. Nous allons le voir sur un exemple simple ; des modèles plus élaborés seront discutés dans le chapitre 17 et confirmeront la validité de cet énoncé. Supposons qu'un spin 1/2 interagisse avec son environnement de telle sorte que rien ne change s'il est dans l'état $|+\rangle$, mais que son vecteur d'état change de signe s'il est dans l'état $|-\rangle$

$$|+\rangle \rightarrow |+\rangle \quad |-\rangle \rightarrow -|-\rangle \quad (6.80)$$

Dans un intervalle Δt , le processus (6.80) appelé *basculement de phase*¹⁸ se produit avec une probabilité $p = \Gamma \Delta t$, où Γ représente la probabilité par unité de temps. Nous supposons toujours $p \ll 1$ de telle sorte que la probabilité pour deux basculements de phase dans l'intervalle Δt soit négligeable. Si l'état de spin est la superposition linéaire vecteur propre de σ_x avec la valeur propre +1

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

cet état se transforme par basculement de phase en

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

vecteur propre de σ_x avec la valeur propre -1, avec une probabilité $p = \Gamma \Delta t$: le temps de décohérence est $\tau_{\text{dec}} = 1/\Gamma$. Partons maintenant d'un état de N spins ayant la forme suivante, appelé état GHZ (Greenberger *et al.* [1990]), voir l'exercice (6.6.9)

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\dots+\rangle + |--\dots-\rangle) \quad (6.81)$$

18. Ce processus est important dans la discussion des codes correcteurs d'erreur en informatique quantique.

Pour que la relation de phase initiale entre les deux composantes de $|\Psi_n\rangle$ soit perdue, il suffit *qu'un seul* des spins soit affecté

$$|\Psi_n\rangle \rightarrow |\Psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\dots+\rangle - |-\dots-\rangle) \quad (6.82)$$

En admettant en première approximation que le processus (6.80) se produit indépendamment pour tous les spins, le processus (6.82) a une probabilité $n\mathbf{p} = n\Gamma\Delta t$ de se produire dans l'intervalle de temps Δt . Le temps de décohérence $\tau_{\text{dec}}^{(n)} = \tau_{\text{dec}}/n$ est d'autant plus court que le nombre de spins est grand. Ceci est un trait général de la décohérence, étudié plus en détail au chapitre 17. Par exemple, dans le mouvement brownien quantique, il suffit d'une collision pour provoquer la décohérence, alors que plusieurs collisions sont nécessaires pour changer la vitesse de façon appréciable : pour un système complexe, *le temps de décohérence est extrêmement court par rapport aux autres temps caractéristiques, par exemple le temps de relaxation de l'énergie*. Compte tenu de cette propriété, l'observation expérimentale du phénomène de décohérence n'est pas facile. Cependant, la décohérence a été observée dans des conditions parfaitement contrôlées par Brune *et al.* [1996].

6.4.2 Modèle pour l'émission spontanée

Pour illustrer le phénomène de décohérence, nous allons étudier un modèle très schématique d'émission spontanée d'un photon par un atome. Le système \mathcal{A} est l'atome, qui peut être dans un état excité $|1_A\rangle$ ou dans l'état fondamental $|0_A\rangle$. L'environnement est le champ électromagnétique quantifié, qui peut être dans son état fondamental à zéro photon, $|0_E\rangle$, ou dans un état à un photon $|1_E\rangle$. L'évolution unitaire se fait dans l'espace $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, et si l'état initial est $|0_A \otimes 0_E\rangle$, rien ne peut se passer

$$U_{AE}|0_A \otimes 0_E\rangle = |0_A \otimes 0_E\rangle \quad (6.83)$$

Mais si l'état initial est $|1_A \otimes 0_E\rangle$, l'atome peut émettre un photon avec une probabilité $\mathbf{p} = \Gamma\Delta t$

$$U_{AE}|1_A \otimes 0_E\rangle = \sqrt{1-\mathbf{p}} |1_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\mathbf{p}} |0_A \otimes 1_E\rangle \quad (6.84)$$

On part de l'état initial

$$|\Phi_{AE}\rangle = (\lambda|0_A\rangle + \mu|1_A\rangle) \otimes |0_E\rangle \quad (6.85)$$

qui correspond à la matrice statistique suivante pour \mathcal{A}

$$\rho_A = \begin{pmatrix} |\mu|^2 & \lambda\mu^* \\ \lambda^*\mu & |\mu|^2 \end{pmatrix}$$

Utilisons (6.83)-(6.84) pour calculer la matrice statistique $\rho_A^{(1)}$ au temps Δt . Le vecteur d'état devient l'état intriqué

$$U_{AE}|\Phi_{AE}\rangle = (\lambda|0_A\rangle + \mu\sqrt{1-\mathbf{p}} |1_A\rangle) \otimes |0_E\rangle + \mu\sqrt{\mathbf{p}} |0_A \otimes 1_E\rangle \quad (6.86)$$

et la matrice $\rho_A^{(1)}$

$$\rho_A^{(1)} = \text{Tr}_{\mathcal{E}} [U_{AE} |\Phi_{AE}\rangle \langle \Phi_{AE}| U_{AE}^\dagger] = \begin{pmatrix} 1 - (1 - \mathfrak{p})|\mu|^2 & \sqrt{1 - \mathfrak{p}} \lambda \mu^* \\ \sqrt{1 - \mathfrak{p}} \lambda^* \mu & (1 - \mathfrak{p})|\mu|^2 \end{pmatrix}$$

Pour obtenir la matrice statistique au temps t , on divise t en n intervalles $\Delta t = t/n$, avec $\Gamma \Delta t \ll 1$

$$\rho_A^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 - (1 - \mathfrak{p})^n \rho_{11} & (1 - \mathfrak{p})^{n/2} \rho_{01} \\ (1 - \mathfrak{p})^{n/2} \rho_{10} & (1 - \mathfrak{p})^n \rho_{11} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 - e^{-\Gamma t} \rho_{11} & e^{-\Gamma t/2} \rho_{01} \\ e^{-\Gamma t/2} \rho_{10} & e^{-\Gamma t} \rho_{11} \end{pmatrix} \quad (6.87)$$

On observe que le temps de décroissance des cohérences est $T_2 = 2/\Gamma$, et celui des populations est $T_1 = 1/\Gamma$, et donc $T_2 = 2T_1$. Ce résultat, qui nous servira au chapitre 15, est spécifique au cas où l'environnement est limité au seul champ électromagnétique. Dans le cas d'environnements plus complexes (avec des collisions, etc.), les cohérences dans la base {état fondamental, état excité} sont en général beaucoup plus fragiles que les populations, et $T_2 \ll T_1$. C'est aussi la situation générale en RMN dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ pour un champ \vec{B}_0 orienté suivant Oz , et c'est pourquoi on utilise une impulsion $\pi/2$ de préférence à une impulsion π : le retour à l'équilibre se fait plus rapidement.

Une seconde observation est la suivante : supposons que le détecteur de photons ait une efficacité de 100 %, qu'il couvre tout l'angle solide, et que nous n'observions aucun photon entre les instants $t = 0$ et $t = \Delta t$. Cela veut dire que nous avons préparé au temps Δt l'atome dans l'état (non normalisé)

$$\lambda|0_A\rangle + \mu\sqrt{1 - \mathfrak{p}}|1_A\rangle \quad (6.88)$$

Bien que nous n'ayons absolument pas agi sur l'atome, son vecteur d'état a évolué en raison de l'absence de détection d'un photon !

6.4.3 Modèle de von Neumann pour la mesure

Dans l'interprétation de Bohr de la mécanique quantique¹⁹, le problème de la mesure ne se pose pas : les objets quantiques n'ont pas de propriétés indépendantes de l'appareillage expérimental utilisé pour les observer. Les appareils de mesure se comportent de façon classique, non pas parce qu'ils sont macroscopiques, mais en raison de leur rôle dans le dispositif expérimental.

La faiblesse manifeste de ce point de vue est qu'il suppose l'existence d'une frontière classique-quantique, alors qu'on aimerait que la physique classique soit un cas limite de la physique quantique. Dans ce cadre, il est naturel de supposer que la mesure doit avoir comme phase initiale une interaction

19. Ou plus exactement, comme l'écrit justement Leggett (Leggett [2002b]), la « non-interprétation », car Bohr se refuse à attribuer une quelconque « réalité » aux vecteurs d'état, opérateurs, etc. : « Microscopic entities are not even to be thought as possessing properties in the absence of specification of a macroscopic arrangement ».

quantique entre le système étudié et l'appareil de mesure, considéré, au moins au départ, comme un objet quantique. C'est le modèle de mesure proposé par von Neumann. Dans ce modèle, l'appareil de mesure \mathcal{M} est donc traité comme un système quantique, et on se propose d'effectuer des mesures sur un système \mathcal{A} . Soit $|\varphi_n\rangle$ une base de \mathcal{H}_A formée de vecteurs propres d'une propriété physique A , les valeurs propres a_n étant supposées non dégénérées pour simplifier la discussion

$$A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle \quad (6.89)$$

Soit $|\Phi_n\rangle$ une base orthonormée de \mathcal{H}_M , $\langle\Phi_n|\Phi_m\rangle = \delta_{nm}$, et soit $|\Phi_0\rangle$ l'état initial de l'appareil de mesure, qui est *a priori* quelconque, pas nécessairement un des états $|\Phi_n\rangle$. L'état initial, avant toute interaction entre \mathcal{A} et \mathcal{M} , est un produit tensoriel $|\Psi_i\rangle$

$$|\Psi_i\rangle = |\varphi_n\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \quad (6.90)$$

et le résultat de l'interaction est de transformer $|\Psi_i\rangle$ en $|\Psi_f\rangle$

$$|\Psi_i\rangle \rightarrow |\Psi_f\rangle = U(\infty)|\Psi_i\rangle = |\varphi_n\rangle \otimes |\Phi_n\rangle \quad (6.91)$$

L'évolution (6.91) est bien compatible avec l'unitarité : elle transforme des états orthogonaux en états orthogonaux, $\langle\Psi_i|\Psi'_i\rangle = 0 \implies \langle\Psi_f|\Psi'_f\rangle = 0$. Un modèle explicite qui réalise cette évolution est décrit à l'exercice 9.6.13. L'équation (6.91) montre que si \mathcal{M} est observé dans l'état $|\Phi_n\rangle$, cela implique que \mathcal{A} est dans l'état $|\varphi_n\rangle$, et le résultat de la mesure de A est a_n . Si l'état initial de \mathcal{A} est une superposition linéaire $\sum_n c_n|\varphi_n\rangle$, soit

$$|\Psi_i\rangle = \left(\sum_n c_n |\varphi_n\rangle \right) \otimes |\Phi_0\rangle \quad (6.92)$$

$|\Psi_f\rangle$ est un état intriqué

$$|\Psi_f\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \otimes |\Phi_n\rangle \quad (6.93)$$

L'opérateur statistique de \mathcal{A} est alors

$$\rho_A = \text{Tr}_{\mathcal{M}} |\Psi_f\rangle\langle\Psi_f| = \sum_n |c_n|^2 |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \quad (6.94)$$

Un examen superficiel de (6.94) pourrait conduire à la conclusion suivante : nous venons de montrer la règle de Born et la réduction du paquet d'ondes. En effet, \mathcal{A} est trouvé dans l'état $|\varphi_n\rangle$ avec la probabilité $|c_n|^2$. Bien entendu c'est une illusion, car en premier lieu la prescription de trace partielle utilisée pour démontrer (6.94) a été déduite de la règle de Born, et la « démonstration » est en fait un raisonnement circulaire. En second lieu il n'y a pas eu réduction du paquet d'ondes, car le mélange dans (6.94) est un mélange impropre, et non

un mélange incohérent d'états $|\varphi_n\rangle$ avec la probabilité $|c_n|^2$. Mais il y a plus grave. Un premier problème est celui de l'ambiguïté de la propriété physique mesurée, que nous allons illustrer en prenant pour \mathcal{A} et \mathcal{M} deux spins $1/2$, une base $|z_\pm\rangle$ d'états propres de σ_z pour \mathcal{A} et une base $|Z_\pm\rangle$ d'états propres de Σ_z pour \mathcal{M} : afin d'alléger les notations, nous notons *uniquement jusqu'à la fin de cette section* les vecteurs de base $|z_\pm\rangle$ au lieu de $|\pm, z\rangle$. Nous aurons également besoin des bases de vecteurs propres $|x_\pm\rangle = (|z_+\rangle \pm |z_-\rangle)/\sqrt{2}$ de σ_x dans \mathcal{H}_A et $|X_\pm\rangle = (|Z_+\rangle \pm |Z_-\rangle)/\sqrt{2}$ de Σ_x dans \mathcal{H}_M . Nous choisissons $|\Phi_0\rangle = |X_+\rangle$ et l'évolution suivante

$$\begin{aligned} U(\infty)|z_+ \otimes X_+\rangle &= |z_+ \otimes Z_+\rangle \\ U(\infty)|z_- \otimes X_+\rangle &= |z_- \otimes Z_-\rangle \end{aligned} \quad (6.95)$$

Partant d'une superposition linéaire initiale

$$|\Psi_i\rangle = (\lambda|z_+\rangle + \mu|z_-\rangle) \otimes |X_+\rangle$$

nous arrivons à l'état final

$$|\Psi_f\rangle = \lambda|z_+ \otimes Z_+\rangle + \mu|z_- \otimes Z_-\rangle \quad (6.96)$$

Comme on s'y attendait, les phases de λ et μ restent présentes dans les éléments de matrice de propriétés jointes de \mathcal{A} et \mathcal{M} , par exemple

$$\langle \Psi_f | \sigma_x \Sigma_x | \Psi_f \rangle = \frac{1}{2} [|\lambda|^2 + |\mu|^2 + 2\text{Re}(\lambda^* \mu)] \quad (6.97)$$

et de plus, si nous choisissons $\lambda = \mu = 1/\sqrt{2}$, (6.96) peut se récrire

$$|\Psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x_+ \otimes X_+\rangle + |x_- \otimes X_-\rangle) \quad (6.98)$$

ce qui fait que \mathcal{M} mesure σ_x , et non σ_z : il y a ambiguïté sur la propriété physique mesurée. En observant \mathcal{M} longtemps après que la mesure a été effectuée, l'expérimentateur peut choisir de mesurer σ_x ou σ_z , qui sont pourtant des propriétés physiques incompatibles. Le deuxième problème est celui du chat de Schrödinger. Revenant au cas général, si l'état initial de \mathcal{A} est une combinaison linéaire

$$|\varphi\rangle = \lambda|\varphi_1\rangle + \mu|\varphi_2\rangle$$

alors l'état final est

$$|\Psi_f\rangle = \lambda|\varphi_1 \otimes \Phi_1\rangle + \mu|\varphi_2 \otimes \Phi_2\rangle \quad (6.99)$$

Si \mathcal{M} est macroscopique, on obtient une superposition linéaire de deux états macroscopiquement distincts, appelée *chat de Schrödinger* : c'est l'intrication des états microscopiques de \mathcal{A} et macroscopiques de \mathcal{M} qui fabrique des chats de Schrödinger. Les deux composantes de $|\Psi_f\rangle$ sont présentes dans l'état final, on ne peut pas dire que \mathcal{M} est dans l'état $|\Phi_1\rangle$ ou dans l'état $|\Phi_2\rangle$ et aucune mesure n'a été faite, car aucune des éventualités : \mathcal{M} dans l'état $|\Phi_1\rangle$ ou \mathcal{M} dans l'état $|\Phi_2\rangle$ n'a été réalisée. L'appareil de mesure est dans un état de superposition linéaire, et non dans un mélange statistique.

6.4.4 Modèle de Zurek

Zeh (Zeh [1970]) et Zurek (Zurek [1991]) ont remarqué que \mathcal{M} étant macroscopique, il interagit fortement avec son environnement \mathcal{E} . En raison de cette interaction, il existe dans l'espace de Hilbert des états privilégiés, les *états pointeurs*²⁰, qui ne s'intriquent pas avec l'environnement et qui sont déterminés par la forme du hamiltonien d'interaction H_{ME} . En revanche, toute superposition linéaire de ces états est très rapidement détruite par la décohérence et l'appareil de mesure ne peut « se trouver » que dans un des états pointeurs. Des modèles explicites de ce phénomène sont étudiés au chapitre 17. Cette observation est très importante pour le processus de mesure, car elle permet de lever l'ambiguïté sur la base mentionnée précédemment : si les états $|Z_{\pm}\rangle$ de (6.95) sont des états pointeurs, les superpositions linéaires

$$|X_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|Z_{+}\rangle \pm |Z_{-}\rangle)$$

ne le sont pas. Cependant, ainsi que nous allons le montrer, la prise en compte de l'environnement ne résout pas le problème de la mesure, ce que suggèrent les guillemets entre lesquels nous avons mis « se trouver ».

Dans le modèle de Zurek, \mathcal{A} et \mathcal{M} sont des spins 1/2 comme dans la section 6.4.3, et l'environnement \mathcal{E} est constitué de $N \gg 1$ spins 1/2, $k = 1, 2, \dots, N$. Le hamiltonien H_{ME} est supposé de la forme

$$H_{ME} = \sum_{k=1}^N H_{ME}^{(k)} \quad H_{ME}^{(k)} = \hbar g_k \Sigma_z \otimes \sigma_z^{(k)} \quad (6.100)$$

où g_k est une constante de couplage sans dimension prenant des valeurs aléatoires en fonction de k ; $|z_{\pm}^{(k)}\rangle$ désigne les vecteurs propres de $\sigma_z^{(k)}$

$$\sigma_z^{(k)} |z_{\pm}^{(k)}\rangle = \pm |z_{\pm}^{(k)}\rangle$$

Après interaction entre \mathcal{A} et \mathcal{M} , le vecteur d'état est donné par (6.96)

$$|\Psi_{\text{tot}}(0)\rangle = |\Psi_f\rangle \otimes \prod_{k=1}^N \left(\alpha_k |z_{+}^{(k)}\rangle + \beta_k |z_{-}^{(k)}\rangle \right) \quad (6.101)$$

Afin de simplifier l'argument, nous avons supposé que le temps caractéristique de l'interaction \mathcal{AM} est très court par rapport à celui de l'interaction \mathcal{ME} . Il est facile de déterminer l'évolution ultérieure de $|\Psi_{\text{tot}}\rangle$ en remarquant que celle des quatre vecteurs de base suivants est évidente

$$\begin{aligned} |Z_{+} \otimes z_{+}^{(k)}\rangle &\rightarrow e^{-ig_k t} |Z_{+} \otimes z_{+}^{(k)}\rangle \\ |Z_{+} \otimes z_{-}^{(k)}\rangle &\rightarrow e^{ig_k t} |Z_{+} \otimes z_{-}^{(k)}\rangle \\ |Z_{-} \otimes z_{+}^{(k)}\rangle &\rightarrow e^{ig_k t} |Z_{-} \otimes z_{+}^{(k)}\rangle \\ |Z_{-} \otimes z_{-}^{(k)}\rangle &\rightarrow e^{-ig_k t} |Z_{-} \otimes z_{-}^{(k)}\rangle \end{aligned}$$

20. En anglais : « pointer states ».

On obtient donc

$$\begin{aligned}
 U(t, 0)|\Psi_{\text{tot}}(0)\rangle &= \lambda|z_+ \otimes Z_+\rangle \otimes \prod_{k=1}^N \left(\alpha_k e^{-ig_k t} |z_+^{(k)}\rangle + \beta_k e^{ig_k t} |z_-^{(k)}\rangle \right) \\
 &+ \mu|z_- \otimes Z_-\rangle \otimes \prod_{k=1}^N \left(\alpha_k e^{ig_k t} |z_+^{(k)}\rangle + \beta_k e^{-ig_k t} |z_-^{(k)}\rangle \right) \\
 &= \lambda|z_+ \otimes Z_+ \otimes \mathcal{E}_+(t)\rangle + \mu|z_- \otimes Z_- \otimes \mathcal{E}_-(t)\rangle
 \end{aligned}$$

Les états $|\mathcal{E}_+\rangle$ et $|\mathcal{E}_-\rangle$ sont corrélés respectivement à $|z_+ \otimes Z_+\rangle$ et à $|z_- \otimes Z_-\rangle$. On en déduit l'opérateur statistique de \mathcal{AM} en prenant la trace partielle sur l'environnement

$$\begin{aligned}
 \rho_{AM} &= \text{Tr}_{\mathcal{E}} \rho_{\text{tot}} = \text{Tr}_{\mathcal{E}} [U(t, 0)|\Psi_{\text{tot}}(0)\rangle \langle \Psi_{\text{tot}}(0)| U^\dagger(t, 0)] \\
 &= |\lambda|^2 |z_+ \otimes Z_+\rangle \langle z_+ \otimes Z_+| + |\mu|^2 |z_- \otimes Z_-\rangle \langle z_- \otimes Z_-| \\
 &+ [z(t)\lambda\mu^* |z_+ \otimes Z_+\rangle \langle z_- \otimes Z_-| + \text{h.c.}]
 \end{aligned}$$

où $z(t)$ mesure le recouvrement de $|\mathcal{E}_+\rangle$ et de $|\mathcal{E}_-\rangle$

$$z(t) = \langle \mathcal{E}_-(t) | \mathcal{E}_+(t) \rangle = \prod_{k=1}^N [\cos 2g_k t + i(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2) \sin 2g_k t] \quad (6.102)$$

La superposition d'un grand nombre de fréquences différentes dans (6.102) entraîne que $|z(t)| \rightarrow 0$, ce que Zurek a vérifié numériquement, de sorte que

$$\rho_{AM} \rightarrow |\lambda|^2 |z_+ \otimes Z_+\rangle \langle z_+ \otimes Z_+| + |\mu|^2 |z_- \otimes Z_-\rangle \langle z_- \otimes Z_-| \quad (6.103)$$

Les états $|\mathcal{E}_+\rangle$ et $|\mathcal{E}_-\rangle$ deviennent orthogonaux à la limite $t \rightarrow \infty$ et les états $|Z_\pm\rangle$ sont bien des états pointeurs. Alors que le système \mathcal{AM} était décrit dans la section 6.4.3 par un vecteur d'état, la prise en compte de l'environnement fait que ce système est maintenant décrit par un opérateur statistique, dont les cohérences ont été éliminées. Un examen superficiel de la situation pourrait conduire à la conclusion suivante : il n'y a plus de superposition linéaire, et donc plus d'ambiguïté de la base de mesure, et il n'y a plus de chats de Schrödinger. Le système \mathcal{AM} « se trouve » dans l'état $|z_+ \otimes Z_+\rangle$ avec une probabilité $|\lambda|^2$ et dans l'état $|z_- \otimes Z_-\rangle$ avec une probabilité $|\mu|^2$.

Cependant, est-ce vraiment là la solution au problème de la mesure ? Le consensus qui semble se dégager est le suivant : si on se limite à un point de vue strictement opérationnel, le modèle de l'environnement est satisfaisant, mais en tant que théorie fondamentale, il n'est pas pertinent²¹. Tout d'abord

21. « Point de vue strictement opérationnel » est la traduction de « *For all practical purposes* » (FAPP) (Bell [1990]), et « non pertinent » celle de « *It is a non starter* » (Leggett [2002b]).

on observe que le problème des superpositions linéaires a simplement été déplacé du système \mathcal{AM} vers le système global $\mathcal{AM}\mathcal{E}$. La valeur moyenne de la propriété physique suivante (d'Espagnat [1995])

$$R = \sigma_x \otimes \Sigma_x \otimes \prod_{k=1}^N \sigma_x^{(k)}$$

est indépendante du temps

$$\langle R \rangle = 2\text{Re}(\lambda^* \mu) \prod_{k=1}^N 2\text{Re}(\alpha_k^* \beta_k)$$

et par conséquent les phases de λ, μ, α_k et β_k restent pertinentes. On peut rétorquer que R est en pratique certainement très difficile, voire impossible à mesurer (on est en présence de décohérence vraie), et c'est la raison pour laquelle le modèle de Zurek peut être considéré comme satisfaisant d'un point de vue strictement opérationnel : les phases sont là, mais on ne peut pas les atteindre. Il est cependant peu satisfaisant d'invoquer la difficulté *pratique* d'une mesure comme argument en faveur d'une théorie que l'on voudrait *fondamentale*. La seconde objection au modèle de Zurek (non indépendante de la précédente) est que le mélange (6.103) est un mélange impropre : on ne peut pas dire que le système \mathcal{AM} se trouve dans l'état $|z_+ \otimes Z_+\rangle$ avec une probabilité $|\lambda|^2$ et dans l'état $|z_- \otimes Z_-\rangle$ avec une probabilité $|\mu|^2$, et que cet état nous est simplement inconnu. Si tel était le cas, la mesure ne ferait que révéler un résultat qui nous était précédemment caché, car nous aurions affaire à un mélange propre (cf. la discussion de la section 6.2.4). Mais (6.103) décrit un mélange impropre, aucune des deux éventualités $|z_+ \otimes Z_+\rangle$ ou $|z_- \otimes Z_-\rangle$ n'est en fait réalisée... à moins de disposer d'un appareil \mathcal{M}' extérieur à \mathcal{AM} et qui permet d'observer ce système. Mais si nous supposons l'existence d'un tel appareil, nous sommes ramenés au problème précédent pour le système \mathcal{AMM}' !

Dans le cas d'une expérience d'interférences du type fentes d'Young, réalisée par exemple avec des atomes, on ne peut pas dire que l'éventualité : l'atome numéro n est passé par la fente F_1 ou l'atome numéro n est passé par la fente F_2 , a été réalisée. Si tel était le cas, on n'observerait pas d'interférences. Si les superpositions d'états macroscopiquement distincts sont possibles, alors il n'y a pas plus de raison pour que l'éventualité : l'appareil de mesure est dans l'état $|z_+ \otimes Z_+\rangle$, ou l'appareil de mesure est dans l'état $|z_- \otimes Z_-\rangle$, soit réalisée. On ne peut pas changer subrepticement les règles de la mécanique quantique en passant du microscopique au macroscopique !

Est-ce à dire que la décohérence est un concept sans intérêt ? Tel n'est pas le cas, car la décohérence est fondamentale pour expliquer pourquoi un objet macroscopique nous *apparaît* classique, parce que nous sommes en pratique limités à des observations locales. L'observation d'un objet macroscopique nous donne une image classique, exempte de superpositions linéaires, mais la

décohérence ne nous permet pas de dire que l'objet « se trouve » dans tel ou tel état.

6.4.5 La réduction du paquet d'ondes

Pour conclure cette section consacrée à la mesure, revenons sur une question que nous avons laissée en suspens au chapitre 4, celle de la « réduction du paquet d'ondes ». Imaginons que nous effectuions au temps t_1 sur un système \mathcal{A} une mesure d'une propriété physique A (6.89) et au temps $t_2 > t_1$ une mesure d'une propriété physique B dont les valeurs propres sont b_q et les vecteurs propres $|\psi_q\rangle$

$$B|\psi_q\rangle = b_q|\psi_q\rangle$$

Afin de nous débarrasser de l'évolution temporelle des vecteurs d'état, nous nous plaçons dans le point de vue de Heisenberg, et les propriétés physiques mesurées sont en fait $A(t_1)$ et $B(t_2)$. Afin de simplifier la discussion sans affecter la physique sous-jacente, nous supposons que les mesures s'effectuent pendant un temps très court $\sim \Delta t$ par rapport au temps caractéristique d'évolution de $A(t)$ et $B(t)$, dans deux intervalles de temps $[t_1 - \Delta t, t_1 + \Delta t]$ et $[t_2 - \Delta t, t_2 + \Delta t]$ qui ne se recouvrent pas. Le rôle de $U(\infty)$ dans (6.91) est joué par deux opérateurs unitaires U_1 et U_2

$$\begin{aligned} U_1|\varphi_n \otimes \Phi_0\rangle &= |\varphi_n \otimes \Phi_n\rangle \\ U_2|\psi_q \otimes \Psi_0\rangle &= |\psi_q \otimes \Phi_q\rangle \end{aligned}$$

où $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ sont des vecteurs de l'espace des états \mathcal{H}_{M_1} et \mathcal{H}_{M_2} des appareils de mesure \mathcal{M}_1 et \mathcal{M}_2 . Si l'état initial de \mathcal{A} est $|\varphi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$, l'action de U_1 sur l'état initial de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_{M_1} \otimes \mathcal{H}_{M_2}$ est

$$U_1|\varphi \otimes \Phi_0 \otimes \Psi_0\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \varphi \rangle |\varphi_n \otimes \Phi_n \otimes \Psi_0\rangle$$

car U_1 (U_2) agit dans \mathcal{H}_{M_1} (\mathcal{H}_{M_2}). L'action de U_2 se traduit par

$$U_2 U_1 |\varphi \otimes \Phi_0 \otimes \Psi_0\rangle = \sum_{n,q} \langle \varphi_n | \varphi \rangle \langle \psi_q | \varphi_n \rangle |\varphi_n \otimes \Phi_n \otimes \Psi_q\rangle$$

D'après le postulat **II** (règle de Born), cette équation donne immédiatement la probabilité jointe

$$\mathbf{p}(B = b_q; A = a_n) = |\langle \varphi_n | \varphi \rangle|^2 |\langle \psi_q | \varphi_n \rangle|^2 \quad (6.104)$$

La probabilité conditionnelle d'observer b_q sachant que a_n a été observé dans la première mesure est donnée par la loi de Bayes

$$\mathbf{p}(B = b_q | A = a_n) = \frac{\mathbf{p}(B = b_q; A = a_n)}{\mathbf{p}(A = a_n)} = |\langle \psi_q | \varphi_n \rangle|^2 \quad (6.105)$$

Si nous avons appliqué le « postulat » de réduction du paquet d’ondes, nous aurions conclu qu’après la première mesure, le système \mathcal{A} se trouvait dans l’état (4.7)

$$|\varphi_n\rangle = \frac{\mathcal{P}_n|\varphi\rangle}{\langle\varphi_n|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle}$$

et que la probabilité de mesurer b_q était $|\langle\psi_q|\varphi_n\rangle|^2$, en accord avec (6.105). Le « postulat » RPO est donc une *conséquence de la règle de Born*. L’argument ci-dessus montre en outre que la validité du postulat RPO est soumise au caractère idéal de la mesure. Il ne serait pas valable si la loi d’évolution du système \mathcal{A} lors de la première mesure était

$$U_1|\varphi_n \otimes \Phi_0\rangle = |\varphi'_n \otimes \Phi_n\rangle$$

6.5 Information quantique

6.5.1 Théorème de non-clonage quantique

Pour conclure ce chapitre, nous allons examiner quelques applications des états intriqués à *l’information quantique*, c’est-à-dire la théorie du traitement et de la transmission de l’information utilisant les spécificités de la mécanique quantique : principe de superposition et intrication. Un ingrédient important de l’information quantique est le *théorème de non-clonage quantique* que nous allons montrer comme résultat préliminaire. La condition indispensable pour que la méthode de cryptographie quantique décrite au § 3.1.3 soit parfaitement sûre est que l’espionne Ève ne puisse pas reproduire (cloner) l’état de la particule envoyée par Bob à Alice tout en conservant pour elle le résultat de sa mesure, ce qui rendrait l’interception du message indétectable. Que ceci ne soit pas possible est garanti par le théorème de non-clonage quantique. Pour montrer ce théorème, supposons que l’on souhaite dupliquer un état quantique *inconnu* $|\chi_1\rangle \in \mathcal{H}_A$. Le système sur lequel on veut imprimer la copie est noté $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_B$, où $d_A = d_B$: c’est l’équivalent de la feuille blanche. Par exemple si l’on veut cloner un état de spin 1/2 $|\chi_1\rangle$, $|\varphi\rangle$ est aussi un état de spin 1/2. Afin de donner le traitement le plus général possible, nous supposons que nous disposons d’un système quantique auxiliaire²² dans un état $|m\rangle \in \mathcal{H}_C$. L’évolution quantique la plus générale dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$ est donnée par un opérateur unitaire U , et nous souhaitons que cet opérateur ait l’action hypothétique suivante

$$U|\chi_1 \otimes \varphi \otimes m\rangle = |\chi_1 \otimes \chi_1 \otimes m(\chi_1)\rangle \quad (6.106)$$

de façon à créer un clone de $|\chi_1\rangle$. Pour un autre original $|\chi_2\rangle$ on devrait avoir

$$U|\chi_2 \otimes \varphi \otimes m\rangle = |\chi_2 \otimes \chi_2 \otimes m(\chi_2)\rangle \quad (6.107)$$

22. En anglais : « *ancilla* ».

Pour montrer qu'un tel opérateur U ne peut pas exister, évaluons le produit scalaire

$$X = \langle \chi_2 \otimes \varphi \otimes m | U^\dagger U | \chi_1 \otimes \varphi \otimes m \rangle \quad (6.108)$$

de deux façons différentes.

1. Utilisant $U^\dagger U = I$

$$X_1 = \langle \chi_2 \otimes \varphi \otimes m | \chi_1 \otimes \varphi \otimes m \rangle = \langle \chi_2 | \chi_1 \rangle$$

2. Utilisant (6.106) et (6.107)

$$X_2 = \langle \chi_2 \otimes \chi_2 \otimes m(\chi_2) | \chi_1 \otimes \chi_1 \otimes m(\chi_1) \rangle = (\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle)^2 \langle m(\chi_2) | m(\chi_1) \rangle$$

Si $\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle \neq 0$, la condition $X_1 = X_2$ implique $\chi_1 \equiv \chi_2$ en raison de l'inégalité de Schwartz. Si une machine à cloner peut cloner deux états orthogonaux, elle ne peut pas cloner leurs superpositions linéaires. Cette preuve du théorème de non-clonage explique pourquoi on ne peut pas se restreindre en cryptographie quantique à une base d'états de polarisation orthogonaux $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ pour les photons. C'est l'utilisation de superpositions linéaires des états de polarisation $|x\rangle$ et $|y\rangle$ qui permet de détecter la présence éventuelle d'un espion.

Si le clonage quantique était possible, on pourrait communiquer à des vitesses supérieures à celles de la lumière (communication supraluminale). Pour le montrer sur un exemple simple, supposons qu'Alice et Bob partagent des paires de spins 1/2 intriqués dans l'état (6.15), et que Bob mesure σ_x ou σ_z : s'il mesure σ_z , Alice recevra le spin \mathcal{A} dans un des deux états $|\pm\rangle$, et s'il mesure σ_x dans l'un des deux états $|\pm, x\rangle = (|+\rangle \pm |-\rangle)/\sqrt{2}$. Supposons qu'Alice soit capable de faire une copie de l'état qu'elle reçoit : avec sa machine à cloner, qui, rappelons-le, fonctionne quel que soit l'état (inconnu) qu'elle reçoit, elle fabrique l'état $|+\otimes+\rangle$ si elle reçoit $|+\rangle$ et l'état $|+, x\otimes+, x\rangle$ si elle reçoit $|+, x\rangle$. Si Bob mesure σ_z , elle construit donc l'opérateur statistique

$$\rho_z = \frac{1}{2}(|+\otimes+\rangle\langle+\otimes+| + |-\otimes-\rangle\langle-\otimes-|)$$

et si Bob mesure σ_x elle construit

$$\rho_x = \frac{1}{2}(|+, x\otimes+, x\rangle\langle+, x\otimes+, x| + |-, x\otimes-, x\rangle\langle-, x\otimes-, x|)$$

On vérifie aisément (par exemple en calculant $\langle + - | \rho_{x,z} | + - \rangle$) que $\rho_x \neq \rho_z$. Si le clonage était possible, Alice pourrait connaître instantanément le système d'axes utilisé par Bob pour sa mesure, même si elle en est distante de plusieurs années-lumière.

Le clonage parfait étant impossible, on peut se demander s'il est possible de cloner de façon approchée, et dans ce cas trouver la meilleure approximation possible d'un état $|\chi\rangle$ compatible avec les règles de la mécanique quantique.

Il nous faut donc un critère permettant de définir la « proximité » de deux états quantiques. Il n'existe pas de critère unique, mais le plus utilisé est la *fidélité* \mathcal{F} : si l'on essaie d'approcher un état quantique $|\chi\rangle$ par un opérateur statistique ρ , alors la fidélité est définie par

$$\mathcal{F} = \langle \chi | \rho | \chi \rangle = \text{Tr}(|\chi\rangle\langle \chi | \rho) \quad (6.109)$$

On note que $\mathcal{F} = 1$ si $\rho = |\chi\rangle\langle \chi|$, et $\mathcal{F} = 0$ si $\rho = |\varphi\rangle\langle \varphi|$ avec $\langle \varphi | \chi \rangle = 0$, c'est-à-dire si $|\varphi\rangle$ est orthogonal à $|\chi\rangle$.

Le cas le plus étudié, et le plus important en pratique, est celui du spin 1/2. Il sera commode, dans la suite de cette section, d'utiliser les notations de l'information quantique

$$|+\rangle \rightarrow |0\rangle \quad |-\rangle \rightarrow |1\rangle \quad (6.110)$$

Le clonage optimal a été trouvé par Buzek et Hillery [1996] (BH). On peut toujours choisir comme page blanche $|\varphi\rangle = |0\rangle$, et le clonage approché BH fonctionne en prenant aussi un spin 1/2 comme système \mathcal{C} (les \otimes ont été supprimés pour alléger l'écriture)

$$U|\chi 00\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|\chi\chi\chi_\perp\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}}(|\chi\chi_\perp\rangle + |\chi_\perp\chi\rangle)|\chi\rangle \quad (6.111)$$

où $|\chi_\perp\rangle$ est l'état orthogonal à $|\chi\rangle$

$$|\chi\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle \quad |\chi_\perp\rangle = -\mu^*|0\rangle + \lambda^*|1\rangle \quad (6.112)$$

L'opérateur statistique de \mathcal{A} s'obtient par une trace partielle

$$\rho_A = \text{Tr}_{\mathcal{BC}}[U|\chi 00\rangle\langle \chi 00|U^\dagger]$$

Si $|\chi\rangle$ est caractérisé par son vecteur de Bloch \vec{b} , l'opérateur statistique de \mathcal{A} sera (exercice 6.6.10)

$$\rho_A = \frac{5}{6}|\chi\rangle\langle \chi| + \frac{1}{6}|\chi_\perp\rangle\langle \chi_\perp| = \frac{1}{2}\left(I + \frac{2}{3}\vec{b}\right) = \rho_B \quad (6.113)$$

La première des équations (6.113) montre que la fidélité du clonage est $\mathcal{F} = 5/6$. La preuve que cette fidélité est optimale est assez longue, et le lecteur est renvoyé à l'article original de Buzek et Hillery [1996]. On peut montrer qu'une fidélité meilleure que 5/6 permettrait la communication supraluminale : on peut donc voir la borne supérieure $\mathcal{F} \leq 5/6$ comme une condition de compatibilité entre la mécanique quantique et la relativité.

Le clonage approché BH est optimal et universel : \mathcal{F} ne dépend pas de l'état $|\chi\rangle$ que l'on souhaite cloner. Il est également symétrique : $\rho_A = \rho_B$. Il est possible d'obtenir une meilleure fidélité si on se limite à une classe particulière

de vecteurs de \mathcal{H}_A . Un cas important pour la sécurité de la cryptographie quantique est le clonage d'états de la forme

$$|\chi(\phi)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle) \quad (6.114)$$

Les deux bases complémentaires utilisées en cryptographie quantique correspondent à des vecteurs de base construits avec $(\phi = 0, \phi = \pi)$ et $(\phi = \pi/2, \phi = 3\pi/2)$, c'est-à-dire aux vecteurs propres de σ_x et σ_y

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle) \quad |\pm y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm i|1\rangle) \quad (6.115)$$

Ces quatre états appartiennent à un équateur de la sphère de Poincaré-Bloch, et on se pose la question du meilleur clonage possible pour les états de cet équateur, dont l'opérateur statistique est

$$\rho(\phi) = |\chi(\phi)\rangle\langle\chi(\phi)| = \frac{1}{2}(I + \cos\phi\sigma_x + \sin\phi\sigma_y) \quad (6.116)$$

On peut montrer que le meilleur clonage possible se passe de spin auxiliaire et fonctionne de la façon suivante

$$\begin{aligned} |0_A 0_B\rangle &\rightarrow |0_A 0_B\rangle \\ |1_A 0_B\rangle &\rightarrow \cos\eta |1_A 0_B\rangle + \sin\eta |0_A 1_B\rangle \end{aligned} \quad (6.117)$$

avec $0 \leq \eta \leq \pi/2$. C'est bien une transformation unitaire dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, qui transforme des états orthogonaux en états orthogonaux. On calcule aisément les fidélités (exercice 6.6.10) avec pour résultat

$$\mathcal{F}_A = \frac{1}{2}(1 + \cos\eta) \quad \mathcal{F}_B = \frac{1}{2}(1 + \sin\eta) \quad (6.118)$$

Si ce clonage est utilisé par Ève, son meilleur choix possible est $\mathcal{F}_A = \mathcal{F}_B$: elle renvoie à Bob un état aussi proche que possible de l'original, tout en gardant pour elle une copie aussi proche que possible de l'original, ce qui correspond à un clonage symétrique plus performant que le clonage universel BH

$$\mathcal{F}_{\text{sym}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \simeq 0.8535 > \frac{5}{6} \quad (6.119)$$

6.5.2 Calcul quantique

Le second sujet de cette section est le calcul quantique. En théorie de l'information, l'unité élémentaire est le bit, qui peut prendre deux valeurs, conventionnellement 0 ou 1. Ce bit est stocké classiquement par un système à deux états, par exemple un condensateur qui peut être non chargé (valeur 0 du bit) ou chargé (valeur 1 du bit). Un bit d'information implique typiquement le

transfert de 10^4 à 10^5 électrons dans la mémoire vive d'un ordinateur actuel. Une question intéressante est alors : est-il possible de stocker l'information sur des électrons (ou d'autres particules) isolé(e)s ? Ainsi que nous l'avons déjà vu, un système quantique à deux états est susceptible de stocker un bit d'information : par exemple nous avons utilisé au § 3.1.3 deux états de polarisation orthogonaux d'un photon pour stocker un bit. Pour fixer les idées, nous allons plutôt utiliser les deux états de polarisation d'un spin $1/2$: par convention l'état de spin up $|+\rangle$ correspondra à la valeur 0, l'état de spin down $|-\rangle$ à la valeur 1, et, suivant (6.110), $|+\rangle \equiv |0\rangle$, $|-\rangle \equiv |1\rangle$. Mais, contrairement au système classique qui ne peut exister que dans les états 0 ou 1, le système quantique peut exister dans des états de superposition linéaire $|\varphi\rangle$ de $|0\rangle$ et $|1\rangle$

$$|\varphi\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (6.120)$$

Au lieu d'un bit ordinaire, le système quantique stocke un *bit quantique*, ou *qubit*, dont la valeur dans l'état (6.120) reste indéterminée jusqu'à la mesure de la composante z du spin : la mesure donnera le résultat 0 avec une probabilité $|\lambda|^2$, et le résultat 1 avec une probabilité $|\mu|^2$, ce qui n'est pas en soi une propriété particulièrement utile. L'information stockée à l'aide de qubits est un exemple d'information quantique. Le théorème de non-clonage implique qu'il est impossible de recopier cette information exactement.

Supposons que nous voulions inscrire dans un registre un nombre entre 0 et 7. Il faudra pour cela disposer de 3 bits. En effet, dans un système de base 2, on peut représenter un nombre de 0 à 7 par une suite de trois nombres 0 ou 1. Un registre classique stockera *une* des 8 configurations suivantes

$$\begin{aligned} 0 &= \{000\} & 1 &= \{001\} & 2 &= \{010\} & 3 &= \{011\} \\ 4 &= \{100\} & 5 &= \{101\} & 6 &= \{110\} & 7 &= \{111\} \end{aligned}$$

Un système de trois spins $1/2$ \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} permettra également de stocker un nombre de 0 à 7, par exemple en faisant correspondre ces nombres aux 8 états suivants de trois spins

$$\begin{aligned} 0 : |000\rangle & \quad 1 : |001\rangle & \quad 2 : |010\rangle & \quad 3 : |011\rangle \\ 4 : |100\rangle & \quad 5 : |101\rangle & \quad 6 : |110\rangle & \quad 7 : |111\rangle \end{aligned} \quad (6.121)$$

La notation $|101\rangle$ est un abrégé pour $|1_A \otimes 0_B \otimes 1_C\rangle$. On notera $|x\rangle$, $x = 0, \dots, 7$ un des huit états de (6.121), par exemple $|5\rangle = |101\rangle$, et la base de $\mathcal{H}^{\otimes 3}$ formée des vecteurs $|x\rangle$ est appelée *base de calcul*. Comme on peut former une superposition linéaire des états (6.121), on pourrait en conclure que le vecteur d'état d'un système de trois spins nous a permis de stocker d'un seul coup $2^3 = 8$ nombres, et avec n spins on pourrait stocker 2^n nombres ! Cependant une mesure des trois spins suivant l'axe Oz donnera nécessairement un des huit états (6.121). Nous disposons d'une importante information virtuelle, mais lorsque nous cherchons à la matérialiser dans une mesure effective, nous

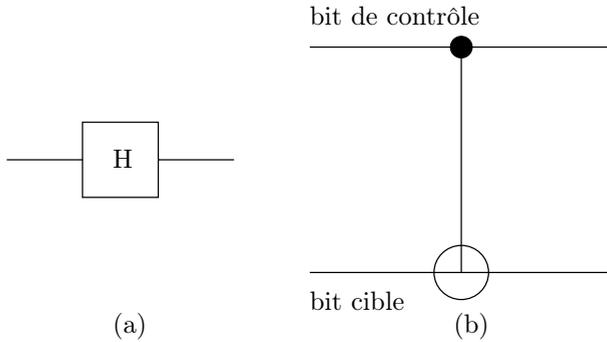


FIG. 6.6 – Représentation graphique des portes logiques quantiques (a) Porte de Hadamard. (b) Porte cNOT.

ne faisons pas mieux que le système classique : la mesure donne un des huit nombres, et pas les huit à la fois.

Les opérations effectuées par un ordinateur quantique sont des transformations unitaires (4.14) dans l'espace de Hilbert des états $\mathcal{H}^{\otimes n}$ des qubits. Ces opérations sont exécutées au moyen de *portes logiques quantiques*. Il est possible de montrer que toutes les opérations unitaires dans $\mathcal{H}^{\otimes n}$ peuvent être décomposées en :

- des transformations sur des qubits *individuels*;
- des portes dites *control-not* (cNOT) agissant sur des *paires* de qubits, définies en (6.125).

Une porte logique individuelle très souvent utilisée est la *porte de Hadamard* (figure 6.6(a))

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.122)$$

dont l'action sur les vecteurs de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ est

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \quad (6.123)$$

En appliquant une porte H sur chacun des n qubits dans l'état $|0\rangle$, nous obtenons la combinaison linéaire suivante $|\Phi\rangle$ d'états de la base de calcul

$$|\Phi\rangle = H^{\otimes n} |0 \dots 0\rangle = H^{\otimes n} |0^{\otimes n}\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \quad (6.124)$$

La porte cNOT (figure 6.6(b)) a l'action suivante sur un état à deux qubits : si le premier qubit, appelé *qubit de contrôle*, est dans l'état $|0\rangle$, le second qubit, appelé *qubit cible*, est inchangé. Si le qubit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$, alors

les deux états de base du qubit cible sont échangés : $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. La représentation matricielle de la porte cNOT est, dans la base $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$

$$\text{cNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}. \quad (6.125)$$

Quel gain peut-on attendre d'un ordinateur quantique qui fonctionnerait avec des qubits ? En fait un ordinateur quantique serait susceptible de mener en parallèle un grand nombre d'opérations. Les opérations élémentaires sur les qubits sont des évolutions unitaires régies par l'équation d'évolution (4.11), ou sa version intégrale (4.14). Dans certains cas, une information utile peut être extraite de ces opérations, si l'on utilise le calcul parallèle quantique. Le principe d'un tel calcul est le suivant : un registre de données de n qubits stocke un état $|\Phi\rangle$ (6.124). On construit ensuite le produit tensoriel $|\Psi\rangle$ de $|\Phi\rangle$ avec l'état $|0^{\otimes m}\rangle$ d'un registre de résultats de 2^m qubits

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \otimes |0^{\otimes m}\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle \otimes |0^{\otimes m}\rangle \quad (6.126)$$

Étant donné une fonction $f(x)$ prenant 2^m valeurs différentes stockées dans le registre de résultats, on construit une opération unitaire²³ U_f telle que

$$U_f|x\rangle \otimes |y\rangle = |x\rangle \otimes |y \oplus f(x)\rangle$$

où \oplus est l'addition modulo 2 sans retenue. Il est clair que $U_f^2 = I$, et que U_f , qui est une simple permutation des vecteurs de base, est une opération unitaire. Si U_f est appliqué sur $|\Psi\rangle$ (6.126), le résultat est

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U_f|\Psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle \otimes |f(x)\rangle$$

L'ensemble des deux registres contient *simultanément* les 2^{n+m} valeurs du couple $(x, f(x))$, bien qu'une mesure donne toujours un couple unique. L'art du calcul quantique consiste à construire des transformations unitaires conduisant à des états finaux tels que les valeurs de x qui nous intéressent soient associées à des probabilités $|a_x|^2$ importantes. C'est une caractéristique des algorithmes quantiques de ne pas donner un résultat certain, mais de donner le résultat avec une certaine probabilité que l'on essaie de rendre aussi grande que possible. Un algorithme *classique* permet ensuite de vérifier rapidement que le résultat est correct : par exemple, dans le cas de l'algorithme de Shor, une fois que l'algorithme quantique a proposé une solution possible pour la factorisation, cette solution peut être vérifiée rapidement sur un ordinateur

23. En dehors du cas où la correspondance $x \leftrightarrow f(x)$ est bijective, la transformation $x \rightarrow f(x)$ ne peut pas être réversible : on ne peut pas avoir de transformation $U|x\rangle = |f(x)\rangle$.

classique. Nous allons illustrer la méthode sur *l'algorithme de recherche de Grover*. C'est un algorithme qui permet de rechercher une entrée dans une base de données *non structurée*, par exemple un numéro de téléphone dans un annuaire lorsque l'on connaît le numéro, mais pas la personne dont on veut trouver le nom. Si N est le nombre d'entrées dans la base, un algorithme classique doit effectuer en moyenne $N/2$ essais : il n'y a pas d'autre possibilité que d'examiner une à une toutes les entrées. L'algorithme de Grover permet de résoudre le problème en $\sim\sqrt{N}$ opérations.

Soit n le nombre minimum de qubits nécessaire pour représenter le nombre N ; afin de simplifier les notations, nous prendrons $N = 2^n$. L'algorithme de Grover va utiliser n qubits stockés dans le registre de données, plus un qubit auxiliaire stocké dans le registre de résultats. On part de l'état (voir la figure 6.7)

$$|\Psi\rangle = (\mathbb{H}^{\otimes n}|0^{\otimes n}\rangle) \otimes \mathbb{H}|1\rangle = \left(\frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle \right) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = |\Phi\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

où le dernier qubit est le qubit auxiliaire et $|\Phi\rangle$ le vecteur (6.124). On applique la porte U_f

$$U_f|\Psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \left(\sum_x (-1)^{f(x)} |x\rangle \right) \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

En effet,

- Si $f(x) = 0$, $(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow (|0\rangle - |1\rangle)$
- Si $f(x) = 1$, $(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow -(|0\rangle - |1\rangle)$.

Dans cette opération, le qubit auxiliaire reste non intriqué avec les n autres qubits. Il est commode de définir un opérateur O , « l'oracle », dont l'action est la suivante dans la base de calcul

$$O|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle \tag{6.127}$$

ce qui permet de limiter le raisonnement aux n qubits du registre de données.

La base de données est stockée au moyen de n qubits et on définit la fonction $f(x)$, $x = \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$ telle que $f(x) = 0$ si $x \neq y$ et $f(x) = 1$ si $x = y$ est solution : $f(x) = \delta_{xy}$. Rappelons que la valeur de y est connue, mais on ne sait pas où cette valeur se trouve dans la base²⁴. Pour simplifier l'argument, on suppose que la valeur de y est unique. L'opérateur de Grover G est défini par

$$G = \mathbb{H}^{\otimes n} X \mathbb{H}^{\otimes n} O = \mathbb{H}^{\otimes n} (2|0\rangle\langle 0| - I) \mathbb{H}^{\otimes n} O \tag{6.128}$$

²⁴. On connaît la valeur de y (le numéro de téléphone), mais pas les données associées à y dans la base (le nom de l'abonné).

où

$$X|x\rangle = -(-1)^{\delta_{x0}}|x\rangle = (2|0\rangle\langle 0| - I)|x\rangle$$

Pour simplifier l'écriture, nous allons nous servir du vecteur $|\Phi\rangle$ (6.124). Compte tenu de $H^2 = I$ on déduit

$$H^{\otimes n}(2|0\rangle\langle 0| - I)H^{\otimes n} = 2H^{\otimes n}|0\rangle\langle 0|H^{\otimes n} - I = 2|\Phi\rangle\langle\Phi| - I$$

et donc

$$G = (2|\Phi\rangle\langle\Phi| - I)O \tag{6.129}$$

Cette construction permet de dessiner le circuit logique quantique correspondant à G (figure 6.7).

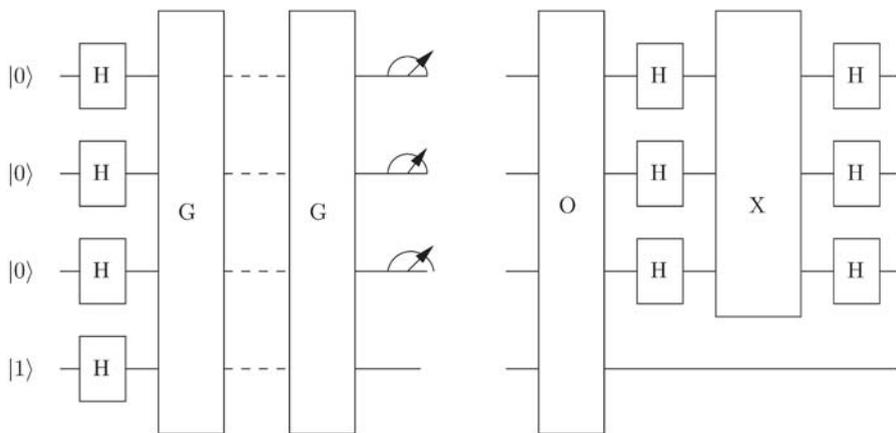


FIG. 6.7 – Circuits logiques de l’algorithme de Grover pour $n = 3$: 3 qubits et un qubit auxiliaire, qui reste non intriqué. Les circuits de G sont détaillés sur la figure de droite. L’action de l’oracle O est $O|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$ et celle de la boîte X : $X|x\rangle = -(-1)^{\delta_{x0}}|x\rangle$.

La première itération de l’algorithme va nous montrer comment le résultat souhaité est obtenu en utilisant un mécanisme d’interférences. Après application de l’opérateur de Grover sur $H^{\otimes n}|0\rangle$, le vecteur d’état du registre de données est

$$\begin{aligned} |\Phi'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x (-1)^{f(x)} (2|\Phi\rangle\langle\Phi| - I)|x\rangle \\ &= \left(\sum_z \frac{2}{N} (-1)^{f(z)} \right) |\Phi\rangle - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x (-1)^{f(x)} |x\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x \left(\frac{2}{N} \sum_z (-1)^{f(z)} - (-1)^{f(x)} \right) |x\rangle = \sum_x a_x |x\rangle \tag{6.130} \end{aligned}$$

où nous avons utilisé $\langle \Phi | x \rangle = 1/\sqrt{N}$. Prenons pour fixer les idées $n = 4$, $N = 16$. Les amplitudes $a_{x \neq y}$ et $a_{x=y}$ sont différentes ; d'après (6.130)

$$a_{x \neq y} = \frac{3}{16} \quad a_{x=y} = \frac{11}{16}$$

Au départ chaque valeur de x avait une probabilité de $1/16 \simeq 0.06$, alors que la probabilité de trouver la valeur y dans la base de données après application de G est $121/256 \simeq 0.47$, soit près de 50 %. Le raisonnement précédent peut manifestement servir à établir une relation de récurrence pour les applications successives de G , mais il est plus commode d'avoir recours à une méthode géométrique que le lecteur trouvera exposée dans les références.

Le gain de l'algorithme de Grover est limité : on passe de N opérations à \sqrt{N} opérations. Un exemple où le gain est exponentiel est celui de la détermination de la période d'une fonction $f(x)$. Supposons $f(x)$ définie sur Z_N , le groupe additif des entiers modulo N ; un algorithme mis en œuvre sur un ordinateur classique exige un nombre d'opérations de l'ordre de N , alors qu'avec un ordinateur quantique ce nombre serait $O(\ln^2 N)$. Ce résultat est à la base de l'algorithme de Shor pour la décomposition d'un nombre en facteurs premiers, la fonction $f(x)$ étant alors $a^x \bmod N$, a entier. Pour un entier N , cet algorithme requiert $O(\ln^3 N)$ opérations sur un ordinateur quantique, alors que les meilleurs algorithmes classiques exigent $O(\exp[(\ln N)^{1/3}])$ opérations.

Le principe d'algorithmes fonctionnant sur des ordinateurs quantiques étant acquis, reste la réalisation concrète d'un tel ordinateur. Les avis sur cette question sont partagés : ils vont du pessimisme intégral à un optimisme mesuré. À l'heure actuelle, le record en nombre de qubits est détenu par un groupe d'IBM (Vandersypen *et al.* [2001]), qui a obtenu la factorisation de $15 : 15 = 3 \times 5$ (!) à l'aide d'un ordinateur quantique utilisant la RMN, mais on est encore très loin de résultats utiles. Un autre schéma prometteur est fondé sur la manipulation d'ions piégés (exercice 11.6.14). Le principal problème est celui de la décohérence : en effet les algorithmes quantiques exigent que l'évolution soit unitaire, ce qui implique l'absence d'interactions incontrôlées avec l'environnement. Bien sûr isoler complètement l'ordinateur quantique est impossible : il s'agit de réduire au maximum les perturbations induites par l'environnement, et de concevoir des algorithmes de correction d'erreurs inévitables en utilisant une information redondante. En dépit des difficultés, le domaine de l'information quantique est en pleine expansion.

6.5.3 Téléportation quantique

La *téléportation quantique* permet de transférer de l'information quantique d'un endroit à un autre sans que ce transfert soit associé à une propagation *physique* d'une particule qui porte l'information (figure 6.8). Supposons qu'Alice souhaite transférer à Bob l'information sur l'état de spin $|\varphi_A\rangle$ d'une

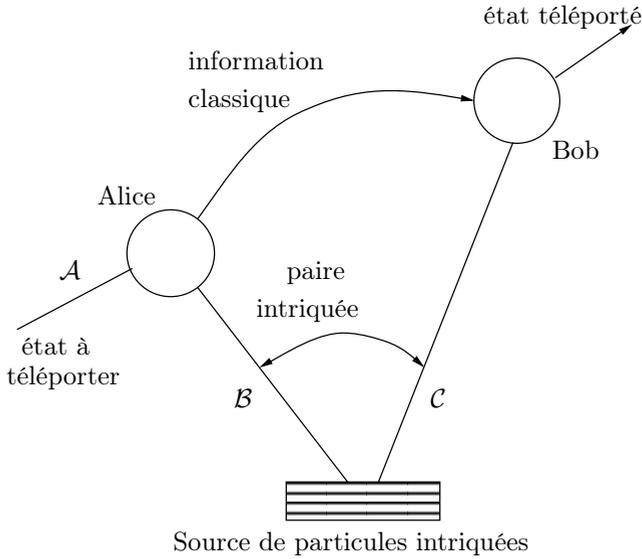


FIG. 6.8 – Téléportation : Alice effectue une mesure de Bell sur les qubits A et B et informe Bob du résultat par une voie classique.

particule \mathcal{A} de spin $1/2$

$$|\varphi_A\rangle = \lambda|0_A\rangle + \mu|1_A\rangle \tag{6.131}$$

qui lui est *a priori* inconnu, sans lui transmettre directement cette particule. Elle ne peut pas faire une mesure du spin, car elle ne connaît pas l'orientation du spin de la particule \mathcal{A} , et toute mesure projetterait en général $|\varphi_A\rangle$ sur un autre état. Le principe du transfert de l'information consiste à utiliser une paire auxiliaire de particules intriquées \mathcal{B} et \mathcal{C} de spin $1/2$ partagées par Alice et Bob : la particule \mathcal{B} est utilisée par Alice et la particule \mathcal{C} est envoyée vers Bob (figure 6.8). Ces particules \mathcal{B} et \mathcal{C} se trouvent par exemple dans l'état intriqué de spin $|\Psi_{BC}\rangle$

$$|\Psi_{BC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_B0_C\rangle + |1_B1_C\rangle) \tag{6.132}$$

L'état initial des trois particules $|\Phi_{ABC}\rangle$ est donc

$$\begin{aligned} |\Phi_{ABC}\rangle &= (\lambda|0_A\rangle + \mu|1_A\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_B0_C\rangle + |1_B1_C\rangle) \\ &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} |0_A\rangle (|0_B0_C\rangle + |1_B1_C\rangle) + \frac{\mu}{\sqrt{2}} |1_A\rangle (|0_B0_C\rangle + |1_B1_C\rangle) \end{aligned} \tag{6.133}$$

Alice va d'abord appliquer sur les qubits \mathcal{A} et \mathcal{C} une porte cNOT, le qubit \mathcal{A} jouant le rôle du qubit de contrôle et le qubit \mathcal{B} celui de qubit cible (figure 6.9).

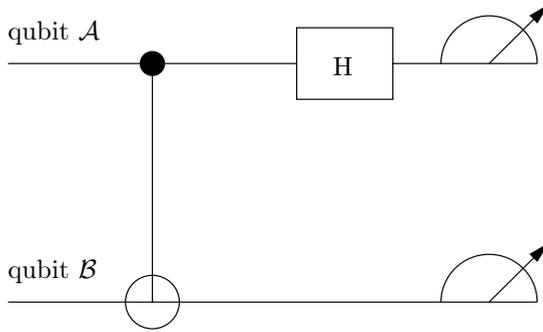


FIG. 6.9 – Alice applique une porte cNOT sur les qubits \mathcal{A} et \mathcal{B} puis une porte de Hadamard sur le qubit \mathcal{A} .

Cette opération transforme l'état initial (6.133) des trois qubits en

$$|\Phi'_{ABC}\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (|0_A\rangle(|0_B0_C\rangle + |1_B1_C\rangle) + \frac{\mu}{\sqrt{2}} (|1_A\rangle(|1_B0_C\rangle + |0_B1_C\rangle)) \quad (6.134)$$

Alice applique ensuite une porte de Hadamard sur le qubit \mathcal{A} , ce qui transforme (6.134) en

$$|\Phi''_{ABC}\rangle = \frac{1}{2} \left[\lambda|0_A0_B0_C\rangle + \lambda|0_A1_B1_C\rangle + \lambda|1_A0_B0_C\rangle + \lambda|1_A1_B1_C\rangle \right. \\ \left. + \mu|0_A1_B0_C\rangle + \mu|0_A0_B1_C\rangle - \mu|1_A1_B0_C\rangle - \mu|1_A0_B1_C\rangle \right] \quad (6.135)$$

Cette équation peut se récrire

$$|\Phi''_{ABC}\rangle = \frac{1}{2} |0_A0_B\rangle (\lambda|0_C\rangle + \mu|1_C\rangle) \\ + \frac{1}{2} |0_A1_B\rangle (\mu|0_C\rangle + \lambda|1_C\rangle) \\ + \frac{1}{2} |1_A0_B\rangle (\lambda|0_C\rangle - \mu|1_C\rangle) \\ + \frac{1}{2} |1_A1_B\rangle (-\mu|0_C\rangle + \lambda|1_C\rangle) \quad (6.136)$$

La dernière opération d'Alice consiste à mesurer les deux qubits dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. La mesure conjointe par Alice des qubits \mathcal{A} et \mathcal{B} est appelée *mesure de Bell*. Cette mesure projette la paire \mathcal{AB} sur l'un des quatre états $|i_Aj_B\rangle$, $i, j = 0, 1$, et le vecteur d'état du qubit \mathcal{C} se lit sur chacune des lignes de (6.136).

Le cas le plus simple est celui où le résultat de la mesure est $|0_A0_B\rangle$. Le qubit \mathcal{C} arrive alors à Bob dans l'état

$$\lambda|0_C\rangle + \mu|1_C\rangle$$

c'est-à-dire dans l'état initial du qubit \mathcal{A} , avec les mêmes coefficients λ et μ . Alice informe Bob par une voie classique (téléphone...) que le qubit va lui arriver dans le même état que le qubit \mathcal{A} . Si au contraire elle mesure $|0_A 1_B\rangle$, le qubit \mathcal{C} est dans l'état

$$\mu|0_C\rangle + \lambda|1_C\rangle$$

et elle informe Bob qu'il doit appliquer au qubit \mathcal{C} une rotation de π autour de Ox , ou de façon équivalente la matrice σ_x

$$\exp\left(-i\frac{\pi\sigma_x}{2}\right) = -i\sigma_x$$

Dans le troisième cas ($|1_A 0_B\rangle$), il faut appliquer une rotation de π autour de Oz , et dans le dernier cas ($|1_A 1_B\rangle$) une rotation de π autour de Oy . On note que dans les quatre cas de figure, Alice ne connaît pas les coefficients λ et μ , et elle communique uniquement à Bob les informations sur la rotation qu'il doit effectuer.

Il est utile d'ajouter les remarques finales :

- à aucun moment les coefficients λ et μ ne sont mesurés, et l'état $|\varphi_A\rangle$ est détruit au cours de la mesure faite par Alice. Il n'y a donc pas de contradiction avec le théorème de non-clonage ;
- Bob ne « connaît » l'état de la particule \mathcal{C} que lorsqu'il a reçu le résultat de la mesure d'Alice. La transmission de cette information doit se faire par une voie classique, à une vitesse au plus égale à celle de la lumière. Il n'y a donc pas transmission instantanée de l'information à distance ;
- il n'y a jamais transport de matière dans la téléportation quantique²⁵.

6.6 Exercices

6.6.1 Indépendance du produit tensoriel par rapport au choix de la base

Vérifier que la définition (6.3) du produit tensoriel de deux vecteurs est bien indépendante du choix de la base dans \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B .

6.6.2 Produit tensoriel de deux matrices 2×2

Écrire explicitement la matrice 4×4 $A \otimes B$ produit tensoriel des matrices 2×2 A et B

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

25. Des expériences récentes de téléportation sont décrites par Barrett *et al.* [2004] et par Riebe *et al.* [2004].

6.6.3 Propriétés des opérateurs statistiques

1. On construit avec les éléments de matrice ρ_{ii} , ρ_{ij} , ρ_{ji} et ρ_{jj} d'un opérateur statistique ρ dans un espace de dimension d la matrice 2×2

$$A = \begin{pmatrix} \rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & \rho_{jj} \end{pmatrix}$$

Montrer que $\rho_{ii} \geq 0$, $\rho_{jj} \geq 0$ et que $\det A \geq 0$, d'où $|\rho_{ij}|^2 \leq \rho_{ii}\rho_{jj}$. En déduire également que si $\rho_{ii} = 0$, alors $\rho_{ij} = \rho_{ji}^* = 0$.

2. Montrer que s'il existe un test maximal donnant une probabilité de 100 % pour l'état physique décrit par un opérateur statistique ρ , alors cet état est un cas pur. Montrer également que si ρ décrit un cas pur, et que l'on peut écrire

$$\rho = \lambda\rho' + (1 - \lambda)\rho'' \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

alors $\rho = \rho' = \rho''$.

3. Montrer que $\text{Tr}\rho^2 = 1$ est une condition nécessaire et suffisante pour un cas pur.

4. Vérifier que ρ défini par (6.26) obéit bien à toutes les propriétés d'un opérateur statistique.

6.6.4 Structure fine et effet Zeeman du positronium

Le positronium est un état lié électron-positron très semblable à l'état lié électron-proton de l'atome d'hydrogène.

1. Calculer l'énergie de l'état fondamental du positronium en fonction de celui de l'atome d'hydrogène. On rappelle que la masse du positron est égale à celle de l'électron.

2. Dans la suite de l'exercice, on s'intéressera uniquement à la structure en spin de l'état fondamental du positronium. L'espace des états à prendre en compte est donc un espace \mathcal{H} à quatre dimensions, produit tensoriel des espaces des états de spin 1/2 de l'électron et du positron. Suivant les notations du § 6.1.2, on notera $|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$ un état où la composante z du spin de l'électron est $\hbar\varepsilon_1/2$ et celle du positron $\hbar\varepsilon_2/2$, avec $\varepsilon = \pm 1$. Déterminer l'action des opérateurs $\sigma_{1x}\sigma_{2x}$, $\sigma_{1y}\sigma_{2y}$ et $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ sur les quatre états de base $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-\rangle$ et $|--\rangle$ de \mathcal{H} . En déduire l'action sur ces états de

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}$$

3. Montrer que les quatre vecteurs

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |++\rangle \\ |II\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-\rangle) \\ |III\rangle &= |--\rangle \\ |IV\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-\rangle) \end{aligned}$$

forment une base orthonormée de \mathcal{H} et que ces vecteurs sont vecteurs propres de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ avec des valeurs propres 1 et -3 .

4. Déterminer les projecteurs \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_{-3} sur les sous-espaces des valeurs propres 1 et -3 , en écrivant ces projecteurs sous la forme

$$\lambda I + \mu \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$$

5. Montrer que l'opérateur \mathcal{P}_{12}

$$\mathcal{P}_{12} = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$

échange les valeurs de ε_1 et ε_2

$$\mathcal{P}_{12}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = |\varepsilon_2\varepsilon_1\rangle$$

6. Le hamiltonien H_0 du système de spins est donné en l'absence de champ extérieur par

$$H_0 = E_0 I + A \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad A > 0$$

où E_0 et A sont des constantes. Déterminer les vecteurs propres et valeurs propres de H_0 .

7. Le positronium est placé dans un champ magnétique \vec{B} uniforme et constant parallèle à Oz . Montrer que le hamiltonien devient

$$H = H_0 - \frac{q_e \hbar}{2m} B (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$$

où m est la masse de l'électron et q_e sa charge. Déterminer la matrice représentative de H dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$. On définit le paramètre x par

$$\frac{q_e \hbar}{2m} B = -Ax$$

Déterminer les valeurs propres de H et tracer sur un graphique leur dépendance en fonction de x .

6.6.5 Ondes de spin et magnons

NB : Cet exercice utilise les notations et les résultats des questions 2 à 5 de l'exercice précédent. On peut représenter un corps ferromagnétique à une dimension comme une chaîne de spins $1/2$: N spins $1/2$ numérotés $n = 0, \dots, N-1$, $N \gg 1$, sont disposés en chaque point d'un réseau à une distance l l'un de l'autre. Il sera commode d'utiliser des conditions aux limites périodiques, où le spin N est identifié au spin 0 : $N \equiv 0$. On suppose que chaque spin peut interagir uniquement avec ses deux plus proches voisins et le hamiltonien s'écrit en fonction d'une constante A

$$H = \frac{1}{2} N A I - \frac{1}{2} A \sum_{n=0}^{N-1} \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1}$$

1. Montrer que toute valeur propre E de H vérifie $E \geq 0$ et que le minimum E_0 correspondant à l'état fondamental est atteint quand tous les spins sont orientés dans la même direction. Dans la suite de l'exercice on choisira cette direction comme axe des z . Un choix possible pour l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ est alors²⁶

$$|\Phi_0\rangle = |++++ \dots + + +\rangle$$

2. Montrer que H s'écrit

$$H = N A I - A \sum_{n=0}^{N-1} \mathcal{P}_{n,n+1} = A \sum_{n=0}^{N-1} (I - \mathcal{P}_{n,n+1})$$

26. Tout état obtenu à partir de $|\Phi_0\rangle$ par une rotation de l'ensemble des spins d'un même angle autour d'un même axe est encore un état fondamental possible.

où

$$\mathcal{P}_{n,n+1} = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})$$

En utilisant le résultat de la question 5 de l'exercice précédent, montrer que les vecteurs propres de H sont des combinaisons linéaires de vecteurs où le nombre de spins up moins le nombre de spins down est une constante. Soit $|\Psi_n\rangle$ l'état où le spin n est down, tous les autres spins étant up. Quelle est l'action de H sur $|\Psi_n\rangle$?

3. On cherche des vecteurs propres $|k_s\rangle$ de H comme combinaisons linéaires des $|\Psi_n\rangle$. Compte tenu de la symétrie cyclique, on pose

$$|k_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{ik_s n l} |\Psi_n\rangle$$

avec

$$k_s = \frac{2\pi s}{Nl} \quad s = 0, 1, \dots, N-1$$

Montrer que $|k_s\rangle$ est vecteur propre de H et déterminer l'énergie correspondante E_k . Montrer que l'énergie est proportionnelle à k_s^2 si $k_s \rightarrow 0$. On associe à l'état $|k_s\rangle$ de (pseudo-)vecteur d'onde k_s et d'énergie E_k une particule appelée *magnon*.

6.6.6 Écho de spin et décomposition des niveaux en RMN

1. Pour diverses raisons, il est important de mesurer avec précision le temps de relaxation T_2 (§ 5.2.3 et § 6.4.2) dans des expériences de RMN. Dans le référentiel en rotation, le signal RMN $a(t)$ prend la forme (δ est le désaccord)

$$a(t) \propto e^{i\delta t/2} e^{-t/T_2}.$$

Calculer la transformée de Fourier $\tilde{a}(\omega)$ de $a(t)$

$$\tilde{a}(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} a(t).$$

On pourrait espérer déduire T_2 de la largeur $1/T_2$ du pic de la partie réelle de $\tilde{a}(\omega)$. Cependant, les différentes molécules auront des désaccords différents, par exemple parce que \vec{B}_0 peut être légèrement inhomogène, ce qui conduit à des fréquences de Larmor différentes, de sorte que les signaux des différentes molécules interfèrent destructivement, et $a(t)$ décroît avec un temps caractéristique beaucoup plus petit que T_2 . Pour contourner cette difficulté, on applique la séquence suivante d'opérations sur la matrice statistique (6.57) : évolution libre pendant $t/2$, rotation de π autour de l'axe y et évolution libre pendant $t/2$. Montrer qu'en l'absence de relaxation, la matrice statistique évoluerait à partir de $\rho(t=0)$ (6.57) selon

$$\begin{aligned} \rho(t=0) \rightarrow \rho(t) &= U(t) \rho(t=0) U^\dagger(t) \\ U(t) &= \exp\left(\frac{-i\delta\sigma_z t}{4}\right) (-i\sigma_y) \exp\left(\frac{-i\delta\sigma_z t}{4}\right) \end{aligned}$$

Montrer que $U(t) = -i\sigma_y$, et que si l'on prend en compte la relaxation $\rho(t)$ est

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \delta p \sigma_y e^{-t/T_2} \right)$$

indépendamment du désaccord δ . Montrer que la mesure de la décroissance de la hauteur du pic de $\tilde{a}(\omega)$ permet une détermination fiable de T_2 , et expliquer pourquoi cette séquence d'opérations s'appelle « écho de spin ».

2. Considérons deux noyaux identiques de spin 1/2 (par exemple deux protons) appartenant à une même molécule observée dans un expérience de RMN. Les deux spins nucléaires ont un hamiltonien d'interaction H_{12} , qui, dans le cas le plus simple, a la forme suivante

$$H_{12} = \hbar\omega_{12} \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}$$

Montrer que l'opérateur d'évolution correspondant est donné par

$$U_{12}(t) = \exp(-iH_{12}t/\hbar) = I_{12} \cos \omega_{12}t - i[\sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}] \sin \omega_{12}t$$

Montrer l'identité suivante

$$U[\mathcal{R}_x^{(1)}(\pi)] \exp(-iH_{12}t/\hbar) U[\mathcal{R}_x^{(1)}(\pi)] \exp(-iH_{12}t/\hbar) = I_{12}$$

où $U[\mathcal{R}_x^{(1)}(\pi)]$ est une rotation de π du spin 1 autour de l'axe x . À partir de cette équation, montrer que la séquence d'opérations

$$\begin{aligned} \text{évolution pendant } t &\rightarrow \text{rotation de } \pi \text{ autour de } O_x \rightarrow \text{évolution pendant } t \\ &\rightarrow \text{rotation de } \pi \text{ autour de } O_x \end{aligned}$$

ramène les spins à leur configuration originale à $t = 0$. La séquence précédente d'opérations est utilisée en calcul quantique RMN. Elle repose sur la propriété suivante : ω_{12}^{-1} est de l'ordre de la centaine de millisecondes, tandis qu'une rotation prend quelques dizaines de microsecondes.

3. Montrer que le hamiltonien complet des deux spins est, dans le référentiel en rotation

$$H_{\text{tot}} = \frac{1}{2}\hbar\delta^{(1)}\sigma_z^{(1)} + \frac{1}{2}\hbar\delta^{(2)}\sigma_z^{(2)} - \frac{1}{2}\hbar\omega_1^{(1)}\sigma_x^{(1)} - \frac{1}{2}\hbar\omega_1^{(2)}\sigma_x^{(2)} + \hbar\omega_{12}\sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}$$

où $\delta^{(i)}$ est le désaccord et $\omega_1^{(i)}$ la fréquence de Rabi pour le spin (i). La différence

$$\delta^{(1)} - \delta^{(2)} = \gamma(B_0^{(1)} - B_0^{(2)})$$

est le déplacement chimique (§ 5.2.3). Quels sont les quatre niveaux d'énergie en l'absence de champ de radiofréquences ($\omega_1^{(1)} = \omega_1^{(2)} = 0$) ? Introduisons l'opérateur²⁷

$$\Sigma_z = \frac{1}{2}(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)})$$

On peut montrer que les transitions permises correspondent à $\Delta\Sigma_z = \pm 1$, tandis que $\Delta\Sigma_z = \pm 2$ et $\Delta\Sigma_z = 0$ sont interdites. Montrer que les quatre fréquences qui apparaissent dans le signal RMN sont

$$\delta^{(1)} + \omega_{12} \quad \delta^{(1)} - \omega_{12} \quad \delta^{(2)} + \omega_{12} \quad \delta^{(2)} - \omega_{12}$$

Tracer qualitativement le schéma de niveaux et comparer avec la figure 5.10.

27. Σ_z est la composante z du spin total, voir chapitre 10.

6.6.7 Non-unicité de l'opérateur statistique pour le spin 1/2

Soit O le centre de la sphère de Poincaré-Bloch et $\vec{b} = O\vec{M}$ le vecteur de Bloch. Traçons une corde de la sphère passant par l'extrémité de \vec{b} . Cette corde coupe la sphère en deux points P_1 et P_2 ; définissons les vecteurs unitaires

$$\hat{n}_1 = O\vec{P}_1, \quad \hat{n}_2 = O\vec{P}_2.$$

Montrer que le vecteur de Bloch peut s'écrire

$$\vec{b} = \hat{n}_1 + \lambda(\hat{n}_2 - \hat{n}_1) = (1 - \lambda)\hat{n}_1 + \lambda\hat{n}_2, \quad 0 < \lambda < 1$$

Montrer que la matrice statistique définie par ce vecteur \vec{b} est

$$\rho = \frac{1}{2}(1 - \lambda)(I + \vec{\sigma} \cdot \hat{n}_1) + \frac{1}{2}\lambda(I + \vec{\sigma} \cdot \hat{n}_2) \quad (6.137)$$

Montrer que l'on peut utiliser la préparation suivante : probabilité $p_1 = (1 - \lambda)$ pour l'état $|+, \hat{n}_1\rangle$ et probabilité $p_2 = \lambda$ pour l'état $|+, \hat{n}_2\rangle$

$$\rho = p_1|+, \hat{n}_1\rangle\langle+, \hat{n}_1| + p_2|+, \hat{n}_2\rangle\langle+, \hat{n}_2|$$

En déduire qu'il existe une infinité de préparations de ρ .

6.6.8 Photons intriqués en polarisation

On considère deux photons partant en sens inverse, l'un (1) suivant Oz et l'autre (2) suivant $-Oz$, dans un état de polarisation intriqué

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle_1 \otimes |y\rangle_2 - |y\rangle_1 \otimes |x\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|xy\rangle - |yx\rangle)$$

Les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont des états de polarisation linéaire suivant Ox et Oy .

1. Soit

$$|\theta\rangle = \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle$$

l'état de polarisation linéaire suivant la direction \hat{n}_θ du plan xOy et $|\theta_\perp\rangle$ l'état de polarisation orthogonale, voir (6.69). Montrer que

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta\theta_\perp\rangle - |\theta_\perp\theta\rangle)$$

L'état $|\Phi\rangle$ est donc invariant par rotation autour de Oz .

2. Écrire $|\Phi\rangle$ en fonction des états de polarisation circulaire $|D\rangle$ et $|G\rangle$ (6.43) en prenant garde à l'orientation des axes (figure 6.10) : le sens de la rotation dépend de la direction de propagation

$$|\Phi\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|DD\rangle - |GG\rangle)$$

Vérifier en utilisant (6.69) que cette deuxième forme de $|\Phi\rangle$ est bien invariante par rotation autour de Oz .

3. Montrer que l'état

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|xx\rangle + |yy\rangle)$$

est également invariant par rotation autour de Oz . Donner son expression en fonction des états de polarisation circulaire²⁸.

28. Les états $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ sont tous deux de moment angulaire nul. Si les deux photons proviennent de la désintégration d'une particule de spin 0, le choix entre les deux états dépend de la parité de la particule mère : voir l'exercice 14.5.4.

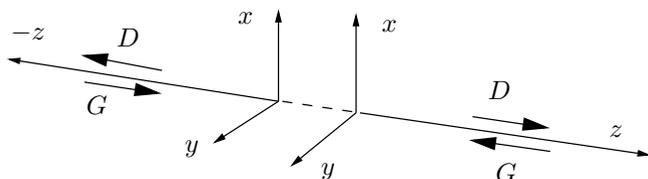


FIG. 6.10 – Configuration des polarisations des photons intriqués.

6.6.9 États GHZ

On suppose qu’une particule instable se désintègre en trois particules identiques de spin $1/2$, \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} émises dans un plan, dans une configuration où les trois impulsions font entre elles un angle de $2\pi/3$ et dans l’état intriqué de spin

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+++ \rangle - |-- \rangle)$$

Trois expérimentateurs, Alice (a), Bob (b) et Charlotte (c) peuvent mesurer la composante du spin suivant une direction perpendiculaire à la direction de propagation de chaque particule (figure 6.11). Le plan des impulsions est le plan horizontal, l’axe Oz est choisi le long de la direction de propagation (il dépend donc de la particule), l’axe Oy est vertical et $\hat{x} = \hat{y} \times \hat{z}$.

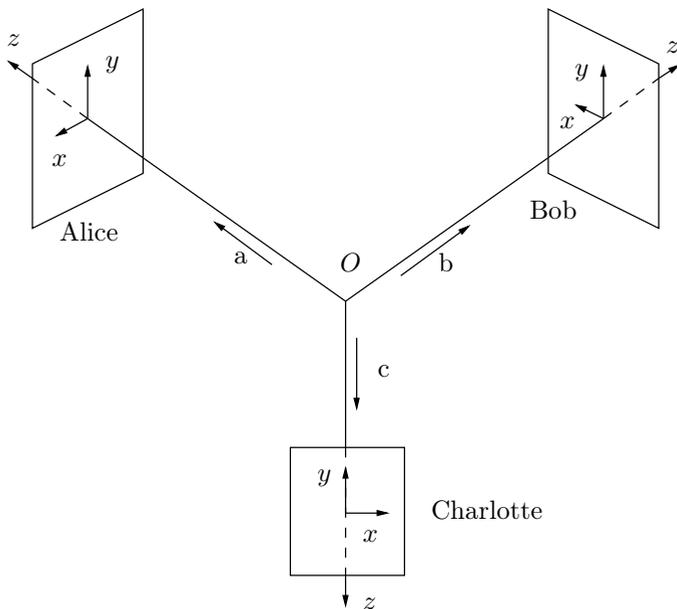


FIG. 6.11 – Configuration d’une expérience de type GHZ.

1. On considère les trois opérateurs

$$\Sigma_a = \sigma_{ax}\sigma_{by}\sigma_{cy} \quad \Sigma_b = \sigma_{ay}\sigma_{bx}\sigma_{cy} \quad \Sigma_c = \sigma_{ay}\sigma_{by}\sigma_{cx}$$

En utilisant l'action des opérateurs σ_x et σ_y sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, montrer que

$$\Sigma_a|\Psi\rangle = \Sigma_b|\Psi\rangle = \Sigma_c|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

Soit $A_x = \pm 1$ le résultat de la mesure de σ_x pour le spin \mathcal{A} par Alice, \dots , C_y le résultat de la mesure de σ_y pour le spin \mathcal{C} par Charlotte. Montrer que

$$A_x B_y C_y = +1 \quad A_y B_x C_y = +1 \quad A_y B_y C_x = +1$$

2. Supposons qu'au lieu de décider de mesurer une composante suivant Ox et deux composantes suivant Oy , les trois expérimentateurs décident de tous mesurer σ_x . Cette décision peut être prise alors que les trois spins sont en vol et ne peuvent plus communiquer entre eux. Montrer que

$$\sigma_{ax}\sigma_{bx}\sigma_{cx}|\Psi\rangle \equiv \Sigma|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$$

et par conséquent $A_x B_x C_x = -1$. Montrer que ce résultat est incompatible avec celui de la question 1.

Montrer que $\Sigma = -\Sigma_a \Sigma_b \Sigma_c$ et en déduire que Σ , Σ_a , Σ_b et Σ_c peuvent être mesurés simultanément. Discuter la façon dont la contextualité se manifeste dans cette expérience.

6.6.10 Théorème de non-clonage quantique

Effectuer la trace partielle pour montrer (6.113) et en déduire l'expression (6.118) des fidélités.

6.6.11 Interférences des temps d'émission

Dans une expérience réalisée par une collaboration Nice-Genève²⁹, un faisceau laser (laser de pompe) incident de longueur d'onde $\lambda = 655$ nm arrive sur un cristal non linéaire (figure 6.12). Une fraction des photons incidents est convertie en paires de photons de longueur d'onde $2\lambda = 1310$ nm, chaque photon partant dans une des deux fibres optiques et traversant ensuite un interféromètre de Mach-Zehnder (MZ) (cf. § 1.4.5). Ces interféromètres ont un bras court et un bras long, la différence entre les deux bras étant $\Delta l = 20$ cm. Une lame permet de faire varier le chemin optique de δ sur le bras long de l'interféromètre de droite. La longueur de cohérence (§ 5.4.2) $l_{\text{coh}} \simeq 40$ μm des photons convertis est très petite par rapport à Δl : $l_{\text{coh}} \ll \Delta l$ (alors que la longueur de cohérence du laser de pompe est voisine de 100 m).

1. On fait varier la phase δ sur le bras long de l'interféromètre de droite. Montrer que le taux de comptage des photons par le détecteur D_1 est indépendant de δ .

2. On détecte les deux photons en coïncidence dans D_1 et D_2 , avec une fenêtre de coïncidence de l'ordre de 0.1 ns ; comme le faisceau pompe est continu, on ne dispose d'aucune information sur le temps de formation d'une paire de photons. Montrer qu'il n'est pas possible de distinguer entre les deux chemins court-court et long-long suivis par les photons. En déduire que si l'on fait varier δ on obtient une variation sinusoïdale du taux de comptage en coïncidence, mais que les taux de détection individuels dans D_1 et D_2 restent indépendants de δ . Suggestion : montrer que si l'on supprime les deux diviseurs de faisceau du MZ de gauche, on peut déduire une information sur le trajet suivi par le photon de droite. Que se passe-t-il si l'on supprime l'ensemble du dispositif de gauche (MZ et détecteurs) ?

29. Tanzilli *et al.* [2002].

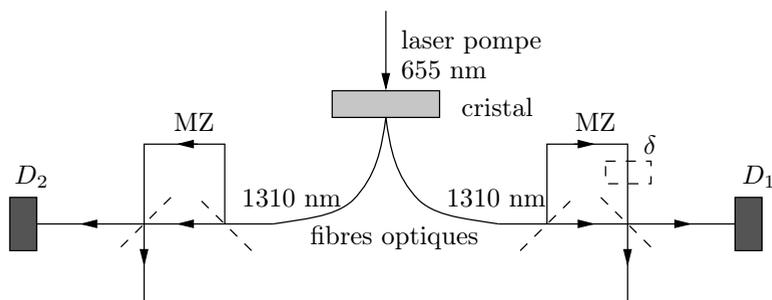


FIG. 6.12 – Interférences des temps d'émission.

6.7 Bibliographie

Le produit tensoriel et l'opérateur statistique sont traités dans Messiah [1959], chapitres VII et VIII ou Cohen-Tannoudji [1973] *et al.*, compléments E_{III} et E_{IV}. Deux références plus récentes sont Isham [1995], chapitre 6 ou Basdevant et Dalibard [2001], annexe D. Une discussion approfondie des concepts fondamentaux est donnée par Mermin [1998]. Pour les applications de l'opérateur statistique à la mécanique statistique et les propriétés de l'entropie de von Neumann, on pourra consulter Balian [1991], chapitres 2 à 5, Diu *et al.* [1990], chapitre 2 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 2. Les applications de l'opérateur statistique à la RMN sont discutées par exemple par Levitt [2001], chapitre 10. Il existe de nombreux exposés sur les inégalités de Bell, parmi lesquels on peut recommander ceux de Peres [1993], chapitres 6 et 7, Isham [1995], chapitres 8 et 9, Mermin [1993], ou Laloë [1999] ; le premier exemple du § 6.3.1 est dû à Wigner [1970]. On trouvera dans ces références une discussion de la contextualité et des théorèmes de Gleason et de Kochen-Specker. Les cours de Cohen-Tannoudji [1989] et [1990] contiennent un exposé très complet de la théorie de la mesure et de la décohérence ; voir aussi Zurek [1991] et [2003], Leggett [2002a], [2002b] et [2005], Joos et Zeh [1985], Schlossauer [2004] et d'Espagnat [1995]. L'exposé du § 6.4.5 suit Balentine [1990] ; voir également Cohen-Tannoudji [1990]. Pour une excellente introduction au calcul quantique, on pourra consulter le livre de Nielsen et Chuang [2000] ; des livres plus récents (et plus courts !) sont ceux de Stolze et Suter [2004] et Le Bellac [2006]. Le théorème de non-clonage quantique et ses applications sont traités en détail par Scarani *et al.* [2005] ; voir également Buzek et Hillery [1996]. On trouvera une version grand public de la téléportation dans Zeilinger [2000]. Des expériences sur la téléportation sont décrites par Barrett *et al.* [2004] et Riebe *et al.* [2004]. Les articles « historiques » (antérieurs à 1982) ont été rassemblés dans un ouvrage édité par Wheeler et Zurek [1983]. On y trouvera en particulier l'article original EPR (Einstein *et al.* [1935]).

Chapitre 7

Mathématiques de la mécanique quantique II : dimension infinie

NOUS AVONS VU AU CHAPITRE 4 que les relations de commutation canoniques imposaient d'utiliser un espace des états de dimension infinie, dont le traitement rigoureux exigerait un outillage mathématique important. Heureusement les physiciens peuvent en général se contenter de transposer au cas de la dimension infinie les résultats démontrés dans le cas de la dimension finie, avec des modifications simples que nous allons indiquer, sans avoir à se lancer dans des mathématiques trop complexes. Néanmoins il n'est pas inutile d'être conscient des impasses sur la rigueur dont les physiciens sont coutumiers, afin d'éviter d'éventuelles mauvaises surprises.

L'objectif de ce chapitre est donc d'une part d'illustrer sur quelques exemples concrets les nouveautés apportées par la dimension infinie, et d'autre part de donner des règles de calcul pratiques, et en particulier d'écrire la décomposition spectrale des opérateurs hermitiens et unitaires. Les explications mathématiques sont un peu plus détaillées que celles données habituellement dans les manuels de mécanique quantique. Le lecteur intéressé uniquement par les aspects pratiques peut passer directement à la section 7.3, où sont rassemblés les résultats essentiels pour la suite.

7.1 Espaces de Hilbert

7.1.1 Définitions

L'espace des états de la mécanique quantique est un espace de Hilbert \mathcal{H} , en général de dimension infinie. La définition axiomatique d'un espace de Hilbert est la suivante.

1. C'est un espace vectoriel qui, pour les besoins de la mécanique quantique, est défini sur le corps des complexes. Les vecteurs de cet espace sont notés $|\varphi\rangle$.
2. Cet espace est muni d'un produit scalaire défini positif; si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont deux vecteurs, ce produit scalaire est noté $\langle\chi|\varphi\rangle$ et il vérifie

$$\langle\chi|\varphi\rangle = (\langle\varphi|\chi\rangle)^* \quad (7.1)$$

$$\langle\chi|\varphi + \lambda\psi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle + \lambda\langle\chi|\psi\rangle \quad (7.2)$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \|\varphi\|^2 = 0 \iff |\varphi\rangle = 0 \quad (7.3)$$

λ étant un nombre complexe arbitraire; $\|\varphi\|$ désigne la norme de $|\varphi\rangle$.

3. \mathcal{H} est un *espace complet*, c'est-à-dire un espace où toute suite de Cauchy a une limite : si une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ de \mathcal{H} est telle que $\|\varphi^{(l)} - \varphi^{(m)}\| \rightarrow 0$ pour $l, m \rightarrow \infty$, alors il existe un vecteur $|\varphi\rangle$ de \mathcal{H} tel que $\|\varphi^{(l)} - \varphi\| \rightarrow 0$ pour $l \rightarrow \infty$. Si \mathcal{H} n'est pas complet, on peut toujours lui rajouter les vecteurs limites de suites de Cauchy et le rendre complet¹.
4. Un espace de Hilbert est *caractérisé par sa dimension* : tous les espaces de même dimension sont isomorphes. La dimension d'un espace de Hilbert peut être finie et égale à N , elle peut être infinie dénombrable, ou bien non dénombrable. Les espaces de Hilbert qui interviennent en mécanique quantique sont soit de dimension finie, soit de dimension infinie dénombrable.

Nous avons étudié en détail au chapitre 2 les espaces de Hilbert de dimension finie. Si la dimension est N , il faut N vecteurs unitaires orthogonaux $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$ pour former une base orthonormée : $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle$. Dans le cas dénombrable, il existe une suite dénombrable de vecteurs unitaires orthogonaux $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ formant une base de \mathcal{H} : tout vecteur de \mathcal{H} peut s'écrire comme combinaison linéaire de ces vecteurs de base

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (7.4)$$

mais contrairement au cas de la dimension finie, toute combinaison de la forme (7.4) n'est pas un vecteur de \mathcal{H} ! En effet, le carré de la norme de $|\varphi\rangle$ est donné par

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (7.5)$$

et (7.4) ne définit un vecteur que si cette norme est finie : la série dans (7.5) doit être une série convergente

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty$$

1. Cet axiome est donc en fait un peu superflu. Il est automatiquement vérifié dans le cas de la dimension finie.

Dans ces conditions, quel que soit $\varepsilon > 0$, il existe un entier N tel que le vecteur $|\varphi_N\rangle$ défini par la combinaison suivante *finie* de vecteurs de base

$$|\varphi_N\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle$$

vérifie

$$\|\varphi - \varphi_N\|^2 = \sum_{n=N+1}^{\infty} |c_n|^2 \leq \varepsilon \tag{7.6}$$

Autrement dit, il est possible d’approcher $|\varphi\rangle$ par un vecteur $|\varphi_N\rangle$ dont la norme diffère arbitrairement peu de celle de $|\varphi\rangle$. On peut maintenant approcher les c_n par des nombres rationnels, et on voit qu’il est possible de construire dans \mathcal{H} une suite dénombrable de vecteurs qui soit dense² dans \mathcal{H} . Cette propriété, commune aux espaces de dimension finie et dénombrable, s’appelle la *séparabilité* de l’espace de Hilbert : les espaces de Hilbert de la mécanique quantique sont séparables.

La convergence définie par (7.6) est la *convergence en norme*, aussi appelée *convergence forte* : on dit qu’une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ converge en norme vers $|\varphi\rangle$ pour $l \rightarrow \infty$ si quel que soit $\varepsilon > 0$, il existe un entier N tel que pour $l \geq N$

$$\|\varphi - \varphi^{(l)}\| \leq \varepsilon \quad \forall l \geq N \tag{7.7}$$

Il existe un autre type de convergence, la *convergence faible* : une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ converge faiblement vers $|\varphi\rangle$ si pour tout vecteur $|\chi\rangle$ de \mathcal{H}

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \langle \varphi^{(l)} | \chi \rangle = \langle \varphi | \chi \rangle \tag{7.8}$$

Nous n’aurons pas à nous servir de la convergence faible³, mais l’existence de cette convergence permet d’illustrer une différence avec la dimension finie : les deux convergences sont identiques pour un espace de dimension finie, mais non pour un espace de dimension infinie. La convergence forte implique la convergence faible, mais non l’inverse (exercice 7.4.1).

7.1.2 Réalisations d’espaces séparables et de dimension infinie

Tous les espaces de Hilbert séparables et de dimension infinie sont isomorphes ; cependant les réalisations concrètes peuvent *a priori* sembler différentes et il est intéressant de pouvoir les identifier. Nous allons définir successivement les espaces $\ell^{(2)}$, $L^{(2)}[a, b]$ et $L^{(2)}(\mathbb{R})$, qui sont tous séparables et de dimension infinie.

2. Un ensemble de vecteurs $\{|\varphi^{(\alpha)}\rangle\}$ est dense dans \mathcal{H} si pour tout $\varepsilon > 0$ et pour tout vecteur $|\varphi\rangle$ de \mathcal{H} on peut trouver un $|\varphi^{(\alpha)}\rangle$ tel que $\|\varphi - \varphi^{(\alpha)}\| < \varepsilon$.

3. Elle intervient par exemple dans certains problèmes de théorie quantique des champs.

(i) Espace $\ell^{(2)}$. Un vecteur $|\varphi\rangle$ est défini par une suite infinie de nombres complexes $c_1, \dots, c_n \dots$ telle que

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \quad (7.9)$$

Comme dans (7.4), les c_n sont les composantes de $|\varphi\rangle$. Vérifions que $|\varphi + \lambda\chi\rangle$ appartient à \mathcal{H} . Si $|\chi\rangle$ a pour composantes d_n , étant donné que

$$|c_n + \lambda d_n|^2 \leq 2(|c_n|^2 + |\lambda|^2 |d_n|^2)$$

il est clair que $\|\varphi + \lambda\chi\| < \infty$. Le produit scalaire de deux vecteurs

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} d_n^* c_n$$

est bien défini car, d'après l'inégalité de Schwartz (2.10)

$$|\langle \chi | \varphi \rangle| = \left| \sum_{n=1}^{\infty} d_n^* c_n \right| \leq \|\chi\| \|\varphi\|$$

Vérifions ensuite que $\ell^{(2)}$ est complet. Soit $|\varphi^{(l)}\rangle$ et $|\varphi^{(m)}\rangle$ deux vecteurs de composantes $c_n^{(l)}$ et $c_n^{(m)}$. Si $\|\varphi^{(m)} - \varphi^{(l)}\| < \varepsilon$ pour $l, m > N$, cela veut dire que

$$\left(\sum_{n=1}^{\infty} |c_n^{(l)} - c_n^{(m)}|^2 \right)^{1/2} < \varepsilon$$

L'inégalité est *a fortiori* vraie pour chaque valeur individuelle de n et, pour n fixé, les nombres $c_n^{(l)}$ forment une suite de Cauchy qui converge vers c_n pour $l \rightarrow \infty$. On montre facilement (exercice 7.4.1) que le vecteur $\varphi^{(l)}$ converge vers $|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ pour $l \rightarrow \infty$

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_n |c_n - c_n^{(l)}|^2 = \lim_{l \rightarrow \infty} \|\varphi - \varphi^{(l)}\|^2 = 0$$

Enfin $\ell^{(2)}$ est de dimension dénombrable par construction.

(ii) Espace $L^{(2)}[a, b]$. Nous allons maintenant introduire une classe d'espaces vectoriels qui vont jouer un rôle capital, les espaces fonctionnels. L'exemple le plus simple est celui des fonctions de carré sommable sur l'intervalle $[a, b]$. Considérons les fonctions complexes $\varphi(x)$ telles que⁴

$$\int_a^b dx |\varphi(x)|^2 < \infty \quad (7.10)$$

4. Deux fonctions $\varphi(x)$ et $\bar{\varphi}(x)$ telles que

$$\int_a^b dx |\varphi(x) - \bar{\varphi}(x)|^2 = 0$$

représentent le même vecteur de \mathcal{H} : $\|\varphi - \bar{\varphi}\| = 0$.

ou fonctions de carré sommable sur l'intervalle $[a, b]$. Ces fonctions forment un espace vectoriel, noté $L^{(2)}[a, b]$. En effet (i) $\varphi(x) + \lambda\chi(x)$ est de carré sommable si $\varphi(x)$ et $\chi(x)$ le sont (ii) le produit scalaire $\langle \chi | \varphi \rangle$

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \int_a^b dx \chi^*(x)\varphi(x) \tag{7.11}$$

est bien défini en raison de l'inégalité de Schwartz

$$\left| \int_a^b dx \chi^*(x)\varphi(x) \right|^2 \leq \int_a^b dx |\chi(x)|^2 \int_a^b dx |\varphi(x)|^2 = \|\chi\|^2 \|\varphi\|^2 \tag{7.12}$$

Le fait que $L^{(2)}[a, b]$ soit complet résulte d'un théorème dû à Riesz et Fischer, et la séparabilité résulte d'un théorème standard de l'analyse de Fourier : toute fonction de carré sommable $\varphi(x)$ peut s'écrire, au sens de la convergence en moyenne (ou en norme), comme la somme d'une série de Fourier

$$\varphi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \exp\left(\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \tag{7.13}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \int_a^b dx \varphi(x) \exp\left(-\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \tag{7.14}$$

Les fonctions

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \exp\left(\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \tag{7.15}$$

forment une base orthonormée dénombrable de $L^{(2)}[a, b]$, qui est donc un espace de Hilbert séparable.

(iii) *Espace* $L^{(2)}(\mathbb{R})$. Quand l'intervalle $[a, b]$ s'identifie à la droite réelle \mathbb{R} , $[a, b] \rightarrow [-\infty, +\infty]$, on obtient l'espace de Hilbert $L^{(2)}(\mathbb{R})$ (ou $L^{(2)}(-\infty, +\infty)$), l'espace des fonctions de carré sommable sur $[-\infty, +\infty]$. Bien que la démonstration soit plus délicate, on peut montrer que $L^{(2)}(\mathbb{R})$ reste un espace séparable, et donc isomorphe à $\ell^{(2)}$.

7.2 Opérateurs linéaires sur \mathcal{H}

7.2.1 Domaine et norme d'un opérateur

On définit des opérateurs linéaires sur \mathcal{H} comme dans le cas de la dimension finie. Cependant il existe des différences importantes. Il peut arriver, et c'est très souvent le cas en mécanique quantique, qu'un opérateur ne soit pas défini pour tout vecteur de \mathcal{H} , mais seulement sur un sous-ensemble de vecteurs de \mathcal{H} . Soit par exemple l'opérateur A agissant dans $\ell^{(2)}$ de la façon suivante : si $|\varphi\rangle$ a pour composantes $\{c_1, c_2, \dots, c_n, \dots\}$, alors $A|\varphi\rangle$ a pour composantes $\{c_1, 2c_2, \dots, nc_n, \dots\}$. Dans $L^{(2)}[a, b]$, cet opérateur correspond

à la différentiation à un facteur multiplicatif près, comme on le voit immédiatement en examinant la décomposition de Fourier (7.13). Il est clair que la norme au carré de $A|\varphi\rangle$, donnée par

$$\|A\varphi\|^2 = \sum_n n^2 |c_n|^2$$

peut diverger alors que $\sum_n |c_n|^2$ converge : il suffit par exemple de prendre $c_n = 1/n$. Autrement dit $A|\varphi\rangle$ n'est pas un vecteur de \mathcal{H} . On appelle *domaine* de A , noté \mathcal{D}_A , l'ensemble des vecteurs $|\varphi\rangle$ tel que $A|\varphi\rangle$ soit un vecteur de \mathcal{H} . Dans l'exemple ci-dessus, le domaine de A est l'ensemble des vecteurs tels que $\sum_n n^2 |c_n|^2 < \infty$. Il est facile de se convaincre que ce domaine est dense dans \mathcal{H} . En pratique un opérateur A ne présente un intérêt que si son domaine est dense dans \mathcal{H} .

Si $A|\varphi\rangle$ existe quel que soit $|\varphi\rangle$, on dit que l'opérateur A est *borné* : on doit alors avoir $\|A\varphi\| < \infty$ quel que soit $|\varphi\rangle$. Le maximum de $\|A\varphi\|/\|\varphi\|$ est appelé la *norme* de A , qui est notée $\|A\|$

$$\|A\| = \sup_{\|\varphi\|=1} \|A\varphi\| \quad (7.16)$$

Si la norme de $\|A\|$ n'existe pas, A est dit non borné. Les opérateurs non bornés sont d'un maniement beaucoup plus délicat que les opérateurs bornés. Malheureusement ils sont omniprésents en mécanique quantique.

Dans $L^{(2)}[0, 1]$, l'opérateur X qui à $\varphi(x)$ fait correspondre la fonction $x\varphi(x)$

$$\varphi(x) \rightarrow (X\varphi)(x) = x\varphi(x) \quad (7.17)$$

est un opérateur borné de norme un. En revanche l'opérateur d/dx , qui à $\varphi(x)$ fait correspondre sa dérivée

$$\varphi(x) \rightarrow \frac{d\varphi(x)}{dx} \quad (7.18)$$

n'est pas un opérateur borné. Nous l'avons déjà vu ci-dessus ; un autre argument simple consiste à trouver une fonction telle que la norme de $\varphi(x)$ soit finie, mais non celle de $\varphi'(x)$. Par exemple, si

$$\varphi(x) = x^{-1/4} \quad \frac{d\varphi(x)}{dx} = -\frac{1}{4} x^{-5/4}$$

la norme de φ est finie, mais non celle de φ' car

$$\int_0^1 dx x^{-1/2} = 2 \quad \int_0^1 dx \frac{1}{16} x^{-5/2} \text{ diverge à } x = 0$$

Les problèmes de domaine peuvent rendre délicats la définition de la somme et du produit de deux opérateurs non bornés. Par exemple on ne peut *a priori*

définir la somme $A + B$ de deux opérateurs non bornés A et B que sur l'intersection $\mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B$ des deux domaines, ce qui peut devenir problématique si cette intersection est réduite au vecteur nul! Lorsque que deux opérateurs A et B sont égaux sur un même domaine \mathcal{D}_A , mais que le domaine de B contient celui de A : $\mathcal{D}_A \subseteq \mathcal{D}_B$, on dit que B est un prolongement de A : $A \subseteq B$. Donnons un exemple : la relation de commutation canonique (4.45) entre les opérateurs position X et impulsion P , écrite pour une seule dimension d'espace ($d = 1$)

$$[X, P] = i\hbar I \tag{7.19}$$

implique qu'au moins un des deux opérateurs est non borné (exercice 7.4.3). Le membre de gauche $[X, P]$ de (7.19) n'est défini *a priori* que sur un sous-ensemble de \mathcal{H} , tandis que le membre de droite $i\hbar I$ est défini pour tout vecteur de \mathcal{H} . L'écriture correcte de la relation de commutation canonique est donc

$$[X, P] \subseteq i\hbar I$$

Notons une autre différence avec la dimension finie : alors que dans un espace vectoriel de dimension finie l'existence d'un inverse à gauche entraîne celle d'un inverse à droite, et réciproquement, cette propriété n'est plus vraie en dimension infinie⁵. Soit par exemple les opérateurs A et B définis par leur action sur les composantes c_n d'un vecteur $|\varphi\rangle$

$$A(c_1, c_2, c_3 \dots) = (c_2, c_3, c_4 \dots) \qquad B(c_1, c_2, c_3 \dots) = (0, c_1, c_2, \dots)$$

alors

$$\begin{aligned} BA(c_1, c_2, c_3 \dots) &= B(c_2, c_3, c_4 \dots) = (0, c_2, c_3, \dots) \\ AB(c_1, c_2, c_3 \dots) &= A(0, c_1, c_2, \dots) = (c_1, c_2, c_3, \dots) \end{aligned}$$

et $AB = I$ tandis que $BA \neq I$, bien que A et B soient tous deux bornés.

7.2.2 Conjugaison hermitienne

Dans le cas d'un opérateur borné, il n'y a pas de difficulté de principe pour définir l'opérateur hermitien conjugué A^\dagger de A par

$$\langle \chi | A\varphi \rangle = \langle A^\dagger \chi | \varphi \rangle \tag{7.20}$$

Comme dans le cas de la dimension finie, on dira que A est hermitien si $A = A^\dagger$ et on aura alors

$$\langle \chi | A\varphi \rangle = \langle A\chi | \varphi \rangle \tag{7.21}$$

Les choses se compliquent si A n'est pas borné en raison des questions de domaine. Tout d'abord (7.20) ne peut définir A^\dagger que si \mathcal{D}_A est dense dans \mathcal{H} .

5. Un exemple important d'un tel opérateur en physique est l'opérateur de Møller de la théorie de la diffusion.

Ensuite le domaine de définition de A^\dagger est en général plus grand que celui de $A : \mathcal{D}_A \subseteq \mathcal{D}_{A^\dagger}$. Nous allons le voir sur un exemple dans un instant. En général pour un opérateur non borné vérifiant (7.21), on n'aura pas $A = A^\dagger$ mais plutôt $A \subseteq A^\dagger$. Les mathématiciens réservent la dénomination « opérateurs hermitiens » aux opérateurs tels que $A \subseteq A^\dagger$, et appellent « auto-adjoints » les opérateurs tels que $A = A^\dagger$.

Illustrons cette discussion par un exemple dans $L^{(2)}[0, 1]$, qui va nous familiariser avec le produit scalaire et la conjugaison hermitienne dans cet espace. Soit A_0 l'opérateur $-\text{id}/dx$, défini sur le domaine \mathcal{D}_{A_0} des fonctions $\varphi(x)$ de $L^{(2)}[0, 1]$, dérivables et dont la dérivée est de carré sommable, et vérifiant de plus les conditions aux limites $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$, d'où l'indice 0 de A_0 . Il est intuitivement évident, et facile à vérifier, que ce domaine est dense dans $L^{(2)}[0, 1]$. Montrons d'abord que A_0 est hermitien ; $\chi(x)$ étant une fonction de $L^{(2)}[0, 1]$ dérivable et dont la dérivée appartient à $L^{(2)}[0, 1]$

$$\begin{aligned} \langle \chi | A_0 \varphi \rangle &= \int_0^1 dx \chi^*(x) \left(-i \frac{d}{dx} \varphi(x) \right) = -i \int_0^1 dx \chi^*(x) \varphi'(x) \\ \langle A_0 \chi | \varphi \rangle &= \int_0^1 dx \left(-i \frac{d}{dx} \chi(x) \right)^* \varphi(x) = i \int_0^1 dx (\chi'(x))^* \varphi(x) \\ \langle \chi | A_0 \varphi \rangle - \langle A_0 \chi | \varphi \rangle &= -i [\chi^*(x) \varphi(x)]_0^1 = 0 \end{aligned} \quad (7.22)$$

On remarquera la nécessité pour l'hermiticité du facteur i et des conditions aux limites. On peut définir A_0^\dagger sur un domaine plus grand que \mathcal{D}_{A_0} . En effet, pour des fonctions $\chi(x)$ non contraintes par des conditions aux limites, c'est-à-dire telles que $\chi(0)$ et $\chi(1)$ soient quelconques

$$\begin{aligned} \langle A_0^\dagger \chi | \varphi \rangle &= i \int_0^1 dx (\chi'(x))^* \varphi(x) \\ &= i [\chi^*(x) \varphi(x)]_0^1 - i \int_0^1 dx \chi^*(x) \varphi'(x) = \langle \chi | A_0 \varphi \rangle \end{aligned}$$

et par conséquent $A_0 \subseteq A_0^\dagger$. Enfin définissons A_C comme l'opérateur $-\text{id}/dx$ agissant dans le domaine \mathcal{D}_{A_C} des fonctions $\varphi(x)$ de $L^{(2)}[0, 1]$, dérivables, dont la dérivée appartient à $L^{(2)}[0, 1]$, et vérifiant les conditions aux limites

$$\varphi(1) = C\varphi(0) \quad |C| = 1$$

L'opérateur A_C est auto-adjoint. En effet

$$\langle A_C \chi | \varphi \rangle - \langle \chi | A_C \varphi \rangle = -i(C\chi^*(1) - \chi^*(0))\varphi(0)$$

La condition nécessaire et suffisante pour que le membre de droite s'annule⁶ est que $\chi(1) = C\chi(0)$, ce qui montre que le domaine de l'opérateur hermitien

6. Noter que $C^* = 1/C$.

conjugué est aussi $\mathcal{D}_{A_C} : A_C^\dagger = A_C$. Les opérateurs A_C représentent pour chaque valeur de C des *prolongements différents* de A_0 : même si la définition est superficiellement la même ($A = -id/dx$), la différence des domaines fait que A_C et $A_{C'}$ sont des opérateurs différents pour $C \neq C'$! On le vérifie en montrant que les valeurs propres et vecteurs propres de A_C et $A_{C'}$ sont différents pour $C \neq C'$ (exercice 7.4.3).

7.3 Décomposition spectrale

7.3.1 Opérateurs hermitiens

Le théorème de décomposition spectrale qui généralise (2.31) est en toute rigueur valable uniquement pour les opérateurs auto-adjoints⁷. Suivant la tradition des physiciens nous ne ferons désormais plus la différence entre hermitien et auto-adjoint, et nous parlerons uniquement d'opérateurs hermitiens. Si un opérateur A est hermitien, et même s'il est borné, l'équation aux valeurs propres

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \tag{7.23}$$

n'a pas toujours de solution. Par exemple dans $L^{(2)}(\mathbb{R})$ l'opérateur $-id/dx$ est hermitien, ce que l'on voit par une généralisation immédiate de (7.22). L'équation

$$-i\frac{d}{dx}\varphi(x) = a\varphi(x) \tag{7.24}$$

a pour solution l'onde plane

$$\varphi_a(x) = C e^{iax} \tag{7.25}$$

où C est une constante, mais $\varphi_a(x)$ n'appartient pas à $L^{(2)}(\mathbb{R})$ car

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi_a(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |C|^2$$

est une intégrale divergente ; $-id/dx$ est un opérateur non borné, mais même pour un opérateur borné, par exemple la multiplication par x dans $L^{(2)}[0, 1]$, l'équation

$$x\chi_a(x) = a\chi_a(x) \tag{7.26}$$

n'a pas de solution dans $L^{(2)}[0, 1]$. En fait la généralisation de (7.23) au cas de la dimension infinie n'est assurée que pour une classe très particulière d'opérateurs, les opérateurs compacts.

En dimension finie, lorsque $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a suivant (7.23), on dit que a appartient au *spectre* de A . Pour généraliser cette notion à la dimension infinie, considérons l'opérateur $(zI - A)$, où z est un nombre complexe et l'équation

$$(zI - A)|\varphi\rangle = |\chi\rangle \tag{7.27}$$

7. Plus précisément pour les opérateurs « essentiellement auto-adjoints » : $(A^\dagger)^\dagger = A^\dagger$.

Soit \mathcal{D} le domaine de $(zI - A)$ et $\Delta(z)$ son image. Si $\Delta(z) = \mathcal{H}$, z est une valeur régulière de A : la correspondance entre $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ est biunivoque et la résolvante (2.46) $R(z, A) = (zI - A)^{-1}$ existe. Le spectre de A est par définition l'ensemble des valeurs de z non régulières. Cette définition coïncide bien avec celle de la dimension finie : en effet si $|\varphi\rangle$ vérifie (7.23)

$$(zI - A)\Big|_{z=a} |\varphi\rangle = (aI - A)|\varphi\rangle = 0$$

et la résolvante n'est pas définie pour $z = a$. Si A est hermitien, il est facile de montrer (exercice 7.4.2) que $z = a + ib$ est une valeur régulière lorsque $b \neq 0$: le spectre de A est donc réel, comme dans le cas de la dimension finie. Les valeurs de a peuvent, soit être indicées par un indice discret : $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$, soit prendre des valeurs continues, par exemple toutes les valeurs sur un intervalle de la droite réelle : on distingue donc un *spectre discret* et un *spectre continu*. Les valeurs de a appartenant au spectre discret vérifient une équation aux valeurs propres (7.23), mais non celles du spectre continu. Le spectre continu et le spectre discret peuvent se recouvrir : par exemple si a prend toutes les valeurs entre 0 et 1, il peut arriver que le spectre de A contienne des valeurs propres discrètes $0 \leq a_n \leq 1$, bien que ce cas soit exceptionnel en pratique. En général pour les opérateurs utilisés en physique quantique, spectre discret et continu ne se recouvrent pas.

Bien que le spectre de la dimension infinie présente des propriétés nouvelles par rapport à celui de la dimension finie, il existe un théorème de décomposition spectrale qui généralise (2.31)

$$A = \sum_n a_n \mathcal{P}_n$$

La forme mathématique précise de ce théorème est complexe, et les physiciens s'en sortent en utilisant des « pseudo-vecteurs propres », c'est-à-dire comme dans (7.25) des objets qui vérifient formellement l'équation aux valeurs propres mais ne sont pas des éléments de \mathcal{H} . Dans le cas de (7.26), la « solution » sera

$$\chi_a(x) = \delta(x - a) \quad \text{car} \quad x\delta(x - a) = a\delta(x - a) \quad (7.28)$$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac, qui n'est pas une fonction, et certainement pas un élément de $L^{(2)}[0, 1]$.

Les exemples que nous venons de donner nous mettent sur la voie du résultat général. La condition de « normalisation » des pseudo-vecteurs propres (7.25) de $-id/dx$ est, avec le choix $C = 1/\sqrt{2\pi}$

$$\langle \varphi_a | \varphi_b \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax} e^{ibx} = \delta(a - b) \quad (7.29)$$

tandis que pour les valeurs propres (7.28) de x

$$\langle \chi_a | \chi_b \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - a) \delta(x - b) = \delta(a - b) \quad (7.30)$$

La normalisation des pseudo-vecteurs propres est donc donnée, non par un delta de Kronecker, mais par un delta de Dirac. La généralisation du théorème de décomposition spectrale s'énonce ainsi.

- Pour les valeurs a_n du spectre discret étiquetées par un indice discret n , on peut écrire une équation aux valeurs propres et des conditions de normalisation analogues à celles de la dimension finie

$$A|n, r\rangle = a_n|n, r\rangle \tag{7.31}$$

$$\langle n, r|n', r'\rangle = \delta_{nn'} \delta_{rr'} \tag{7.32}$$

où r est un indice de dégénérescence discret.

- Pour les valeurs $a(\nu)$ du spectre continu étiquetées par un indice continu ν , nous aurons

$$A|\nu, s\rangle = a(\nu)|\nu, s\rangle \tag{7.33}$$

$$\langle \nu, s|\nu', s'\rangle = \delta(\nu - \nu') \delta_{ss'} \tag{7.34}$$

où $|\nu, s\rangle$ n'est pas un vecteur de \mathcal{H} ; s est un indice de dégénérescence qui peut être discret ou continu, mais que nous avons pris discret pour fixer les notations.

- En outre les vecteurs propres du spectre discret et ceux du spectre continu sont orthogonaux

$$\langle n, r|\nu, s\rangle = 0 \tag{7.35}$$

La généralisation de la décomposition de l'identité, ou relation de fermeture (2.30) s'écrit

$$I = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle \langle \nu, s| \tag{7.36}$$

tandis que la décomposition spectrale (2.31) de A devient

$$A = \sum_{n,r} |n, r\rangle a_n \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle a(\nu) \langle \nu, s| \tag{7.37}$$

Insistons sur le fait que l'existence d'un spectre discret et/ou continu n'est en rien liée au fait que l'opérateur A soit ou non borné : il existe des opérateurs non bornés dont le spectre est entièrement discret, comme le hamiltonien de l'oscillateur harmonique (§ 11.1.1) ou le carré du moment angulaire \vec{J}^2 (section 10.1), et des opérateurs bornés comme la multiplication par x dans $L^{(2)}[0, 1]$ dont le spectre est entièrement continu.

7.3.2 Opérateurs unitaires

Un opérateur unitaire est défini par

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I \quad \text{ou} \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (7.38)$$

Comme dans le cas de la dimension finie, on peut construire des opérateurs unitaires par exponentiation d'opérateurs hermitiens. Utilisant la décomposition spectrale de A (7.37)

$$U(\alpha) = \exp(i\alpha A) = \sum_{n,r} |n, r\rangle \exp(i\alpha a_n) \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle \exp[i\alpha a(\nu)] \langle \nu, s| \quad (7.39)$$

Cette équation montre que le spectre de $\exp(i\alpha A)$ est localisé sur le cercle $|z| = 1$, et il est facile de vérifier que cette propriété est vraie de tout opérateur unitaire. De plus (7.39) montre que $U(\alpha)$ vérifie la propriété de groupe abélien

$$U(\alpha_1 + \alpha_2) = U(\alpha_1)U(\alpha_2) \quad U(0) = I \quad (7.40)$$

La réciproque de cette propriété est un théorème important, le théorème de Stone⁸.

Théorème de Stone. Soit un ensemble d'opérateurs unitaires dépendant d'un paramètre continu α et vérifiant la loi de groupe abélien (7.40). Il existe alors un opérateur hermitien T , appelé *générateur infinitésimal* du groupe de transformations $U(\alpha)$ tel que $U(\alpha) = \exp(i\alpha T)$. ■

On peut donner une démonstration heuristique de ce théorème, en montrant que $U(\alpha)$ vérifie une équation différentielle. Si $\delta\alpha \rightarrow 0$

$$U(\alpha + \delta\alpha) = U(\delta\alpha)U(\alpha) \simeq \left(I + \delta\alpha \frac{dU}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} \right) U(\alpha) \quad (7.41)$$

Si l'on pose

$$T = -i \frac{dU}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} \quad (7.42)$$

T doit être hermitien car

$$\begin{aligned} U(\delta\alpha)U^\dagger(\delta\alpha) &\simeq (I + i\delta\alpha T)(I - i\delta\alpha T^\dagger) \\ &\simeq I + i\delta\alpha(T - T^\dagger) = I \end{aligned}$$

d'où $T = T^\dagger$. On déduit de (7.41)

$$\frac{dU(\alpha)}{d\alpha} = iTU(\alpha) \quad (7.43)$$

ce qui donne le théorème de Stone par intégration et en tenant compte de la condition $U(0) = I$.

8. Aussi appelé théorème SNAG : Stone, Naimark, Ambrose et Godement.

7.4 Exercices

7.4.1 Espaces de dimension infinie

1. Montrer que l'espace ℓ^2 est complet.
2. Montrer que la convergence forte implique la convergence faible, mais non l'inverse, sauf si l'espace est de dimension finie.

7.4.2 Spectre d'un opérateur hermitien

Montrer que si $A = A^\dagger$ et $z = x + iy$, le vecteur

$$|\chi\rangle = (zI - A)|\varphi\rangle$$

ne peut pas s'annuler si $y \neq 0$.

7.4.3 Relations de commutation canoniques

1. Soit deux opérateurs hermitiens A et B vérifiant la relation de commutation $[B, A] = iI$. Montrer que l'un au moins des deux opérateurs est non borné. On pourra supposer sans restreindre la généralité (pourquoi ?) que $\|B\| = 1$. Suggestion : montrer que

$$[B, A^n] = inA^{n-1}$$

et en déduire

$$\|A^n\| \geq \frac{n}{2} \|A^{n-1}\|$$

2. On suppose que A possède un vecteur propre normalisable $|\varphi\rangle$

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \quad a = a^*$$

On a d'une part

$$\begin{aligned} \langle\varphi|(BA - AB)|\varphi\rangle &= \langle\varphi|B|A\varphi\rangle - \langle A\varphi|B|\varphi\rangle \\ &= a(\langle\varphi|B|\varphi\rangle - \langle\varphi|B|\varphi\rangle) = 0 \end{aligned}$$

et d'autre part

$$\langle\varphi|(BA - AB)|\varphi\rangle = \langle\varphi|[B, A]|\varphi\rangle = i\|\varphi\|^2$$

Quelle est la solution de ce pseudo-paradoxe ? Suggestion : examiner le cas où $B = X$ (multiplication par x) et $A = -id/dx$ sur $L^2[0, 1]$ avec les conditions aux limites $\varphi(x = 0) = \varphi(x = 1) = 0$.

3. On considère les opérateurs A_C définis au § 7.2.2. Trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de A_C , et montrer que le spectre de A_C est différent suivant les valeurs de C . Le théorème de von Neumann (chapitre 8) énonce que les relations de commutation canoniques sont uniques à une équivalence unitaire près. Pourtant

$$[X, A_C] = iI \quad \text{et} \quad [X, A_{C'}] = iI$$

et $A_C \neq A_{C'}$ si $C \neq C'$. Quelle est la solution de ce nouveau pseudo-paradoxe (non indépendant du précédent) ?

7.4.4 Opérateurs de dilatation et de tranformation conforme

1. Soit A l'opérateur

$$A = -i x \frac{\partial}{\partial x}$$

A est-il hermitien ? Montrer que

$$\left[e^{-i\alpha A} \Phi \right] (x) = \Phi(e^{-\alpha} x)$$

Méthode 1 : utiliser la variable $u = \ln x$

2. Méthode 2 : obtenir l'équation aux dérivées partielles

$$\left(\frac{\partial}{\partial \alpha} + x \frac{\partial}{\partial x} \right) \left[e^{-i\alpha A} \Phi \right] (x) = 0$$

3. Soit B l'opérateur

$$B = -i x^2 \frac{\partial}{\partial x}$$

Montrer que

$$\left[e^{-i\alpha B} \Phi \right] (x) = \Phi \left(\frac{x}{1 + \alpha x} \right)$$

7.5 Bibliographie

Jauch [1968], chapitres 1 à 4 et Peres [1993], chapitre 4, contiennent un exposé assez détaillé et mathématiquement rigoureux des notions utiles sur les espaces de Hilbert de dimension infinie et les opérateurs sur ces espaces. Le lecteur porté sur les aspects mathématiques pourra se plonger dans le livre classique de Riesz et Nagy [1955].

Chapitre 8

Symétries en physique quantique

LA RÉOLUTION DE PROBLÈMES de physique classique se simplifie, parfois de façon considérable, en présence de *symétries*, c'est-à-dire de transformations qui laissent invariantes certaines propriétés physiques. Par exemple en mécanique classique le problème d'une particule dans une force centrale $\vec{F} = F(r)\hat{r}$ indépendante du temps est invariant par translation de temps et par rotation autour de tout axe passant par l'origine. L'invariance par translation de temps assure la conservation de l'énergie mécanique E , et l'invariance par rotation la conservation du moment angulaire \vec{J} . En l'absence de symétries, on doit *a priori* résoudre un système de trois équations différentielles du second ordre (une par composante). Grâce à ces symétries, on se ramène à la résolution d'une seule équation différentielle du premier ordre. Résumons ci-dessous les conséquences des principales invariances en mécanique classique.

- L'invariance par translation de temps de l'énergie potentielle V entraîne la conservation de l'énergie mécanique $K + V$, somme de l'énergie cinétique K et de l'énergie potentielle V .
- L'invariance de l'énergie potentielle par translation d'espace parallèle à un vecteur \hat{n} entraîne la conservation de la composante $\vec{P} \cdot \hat{n} = P_{\hat{n}}$ de l'impulsion.
- L'invariance de l'énergie potentielle par rotation autour d'un axe \hat{n} entraîne la conservation de la composante $\vec{J} \cdot \hat{n} = J_{\hat{n}}$ du moment angulaire.

Les propriétés de symétrie jouent un rôle encore plus important en mécanique quantique. Elles permettent d'obtenir des résultats très généraux, qui sont indépendants des approximations faites par exemple pour le hamiltonien (bien sûr si ces approximations respectent les symétries du problème!). Dans ce

chapitre, nous exploiterons les hypothèses d'invariance suivantes, que nous supposerons valables¹ pour un système isolé.

- La description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'origine des temps : elle doit être invariante par translation de l'origine des temps.
- L'espace est homogène, ce qui veut dire que la description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'origine des axes : elle doit être invariante par translation d'espace.
- L'espace est isotrope, ce qui veut dire que la description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'orientation choisie pour les axes : elle doit être invariante par rotation.
- La forme des lois physiques doit être inchangée lorsque l'on passe d'un référentiel d'inertie à un autre.

Cette dernière hypothèse doit être précisée, car il existe deux lois de transformation possibles entre référentiels d'inertie, la transformation de Lorentz et celle de Galilée, cette dernière étant valable lorsque $v/c \rightarrow 0$. Naturellement c'est la transformation de Lorentz que l'on doit choisir en général, mais on ne peut alors éviter le cadre de la théorie quantique des champs. Comme nous considérerons uniquement des particules dont les vitesses sont faibles par rapport à la vitesse de la lumière², nous pourrons nous limiter à la transformation de Galilée, et travailler dans le cadre de ce qui est appelé conventionnellement, mais improprement³, la « mécanique quantique non relativiste ».

8.1 Transformation d'un état dans une opération de symétrie

8.1.1 Invariance des probabilités dans une opération de symétrie

Le point de vue adopté implicitement dans l'introduction de ce chapitre était le point de vue dit *passif* : le système physique est inchangé, mais on

1. Ces hypothèses sont éminemment plausibles, mais après tout il pourrait exister des effets subtils qui remettent en cause une (ou plusieurs) de ces invariances. Avant 1957, l'immense majorité des physiciens auraient parié sur l'invariance de la physique par l'opération parité. Pauli avait même interdit que l'on fasse au CERN à Genève une expérience destinée à montrer l'éventuelle violation de cette invariance, tellement il trouvait cette possibilité absurde. Aussi la violation de l'invariance par parité fut-elle découverte aux États-Unis dans l'expérience de C.S. Wu (*cf.* 8.3.3).

2. Cependant, nous prendrons en compte les interactions de ces particules avec des photons, mais sans entrer dans les complications de l'électrodynamique quantique relativiste.

3. En effet cette théorie est parfaitement relativiste, puisqu'elle obéit à la relativité... galiléenne!

modifie le système d'axes. Il est en général équivalent⁴ d'adopter le point de vue *actif*, où le système d'axes est inchangé, et où on applique une opération de symétrie sur le système physique. Nous avons d'ailleurs déjà utilisé cette équivalence dans la discussion du § 3.2.4. Dans la suite de ce chapitre, nous allons adopter le point de vue actif, qui est peut-être plus intuitif (au moins pour l'auteur !) et sera plus commode pour certaines discussions, par exemple celles de la section 10.5.

Nous avons vu au chapitre 4, postulat **I**, que l'objet mathématique en correspondance biunivoque avec un état physique était un rayon unitaire de l'espace des états \mathcal{H} , c'est-à-dire un vecteur unitaire à un facteur de phase près. Dans cette section *uniquement* la distinction entre vecteurs et rayons sera cruciale ; nous pourrons l'oublier par la suite. On vérifie immédiatement que la relation entre deux vecteurs de \mathcal{H}

$$|\varphi'\rangle = e^{i\theta} |\varphi\rangle \quad (8.1)$$

où θ est un nombre réel, est une relation d'équivalence⁵ $|\varphi'\rangle \sim |\varphi\rangle$. La classe d'équivalence est un rayon, que nous noterons $\tilde{\varphi}$. Le produit scalaire de deux rayons $\tilde{\varphi}$ et $\tilde{\chi}$ n'est pas défini, mais le module de ce produit scalaire, que nous noterons $|\langle \tilde{\chi}, \tilde{\varphi} \rangle|$ est bien défini : on peut choisir deux représentants arbitraires $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ dans les classes d'équivalence et écrire

$$|\langle \tilde{\chi}, \tilde{\varphi} \rangle| = |\langle \chi | \varphi \rangle| \quad (8.2)$$

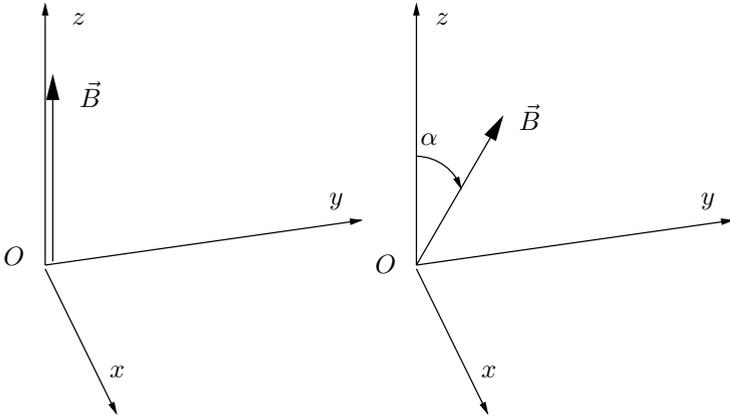
car les facteurs de phase disparaissent lorsque l'on prend le module. Le résultat est indépendant du choix des représentants dans les classes d'équivalence.

Revenons au spin 1/2 du chapitre 3 : nous avons vu comment préparer un état de spin orienté suivant Oz que nous représenterons par le rayon $\tilde{\varphi}_+$, en utilisant un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est orienté suivant Oz et en sélectionnant les atomes déviés vers le haut (en choisissant un signe approprié pour le champ). Faisons tourner le champ d'un angle α autour de la direction de propagation Oy pour l'amener suivant une direction \hat{n}_α faisant un angle α avec Oz , $0 \leq \alpha < 2\pi$. Nous préparons ainsi l'état représenté par le rayon $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$, qui sera par définition l'état transformé de $\tilde{\varphi}_+$ par une rotation de α autour de Oy (figure 8.1). Avec les notations du chapitre 3, la classe d'équivalence du vecteur $|+\rangle$ est le rayon $\tilde{\varphi}_+$, celle du vecteur $|+, \hat{n}_\alpha\rangle$ le rayon $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$. En général le transformé $\tilde{\varphi}_\mathcal{R}$ par une rotation \mathcal{R} d'un état $\tilde{\varphi}$ sera obtenu en effectuant une rotation \mathcal{R} sur l'appareil qui prépare $\tilde{\varphi}$.

Supposons maintenant qu'à la suite du premier appareil de Stern-Gerlach dont le champ est parallèle à Oz , le polariseur, on place un second appareil,

4. Pour certaines transformations comme la réflexion par rapport à un plan, il est plus simple d'utiliser le point de vue passif, qui consiste à regarder le système dans un miroir, mais on peut aussi imaginer de construire un appareillage symétrique de l'original par rapport à un plan.

5. La notation \sim désigne ici une relation d'équivalence, et non « de l'ordre de ».

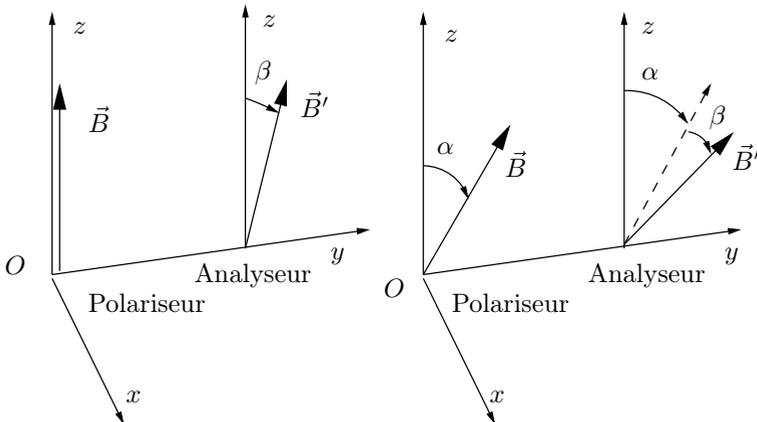
FIG. 8.1 – Préparation des états (rayons) $\tilde{\varphi}_+$ et $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$.

l'analyseur, dont le champ est parallèle à la direction \hat{n}_β , obtenue à partir de Oz par une rotation d'angle β autour de Oy (figure 8.2a). S'il n'y a pas sur le trajet de champ magnétique susceptible de faire tourner le spin, la probabilité pour que le spin soit dévié dans la direction \hat{n}_β est

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\beta), \tilde{\varphi}_+)|^2$$

Effectuons maintenant l'expérience en faisant tourner à la fois le polariseur et l'analyseur d'un angle α (figure 8.2b). La probabilité de déviation dans la direction $\hat{n}_{\alpha+\beta}$ est

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_{\alpha+\beta}), \tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha))|^2$$

FIG. 8.2 – Rotations simultanées du polariseur et de l'analyseur d'un angle α .

Comme on a fait subir la même rotation au polariseur et à l'analyseur, l'invariance par rotation implique que les probabilités sont inchangées

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_{\alpha+\beta}), \tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha))|^2 = |(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\beta), \tilde{\varphi}_+)|^2 \quad (8.3)$$

Généralisons (8.3) : si l'on effectue une transformation g sur un état $\tilde{\varphi}$ en appliquant cette transformation sur l'appareil de préparation de $\tilde{\varphi}$ pour obtenir l'état transformé $\tilde{\varphi}_g : \tilde{\varphi} \rightarrow \tilde{\varphi}_g$, et si l'on effectue la même opération sur l'appareil de mesure pour $\tilde{\chi} : \tilde{\chi} \rightarrow \tilde{\chi}_g$ alors les probabilités doivent être inchangées si la physique est invariante dans cette opération

$$|(\tilde{\chi}_g, \tilde{\varphi}_g)|^2 = |(\tilde{\chi}, \tilde{\varphi})|^2 \quad (8.4)$$

8.1.2 Théorème de Wigner

La propriété (8.4) sur les *rayons* se traduit par une propriété sur les *vecteurs* grâce à un théorème d'une grande importance dû à Wigner.

Théorème de Wigner. Si l'on traduit mathématiquement la loi de transformation des états physiques par une loi de transformation sur les *rayons* correspondants : $\tilde{\varphi} \rightarrow \tilde{\varphi}_g$ lorsque l'on applique une transformation g à un système physique, et si l'on suppose que les probabilités sont invariantes dans cette transformation

$$|(\tilde{\chi}_g, \tilde{\varphi}_g)|^2 = |(\tilde{\chi}, \tilde{\varphi})|^2 \quad \forall \tilde{\varphi}, \tilde{\chi}$$

alors il est possible de choisir un représentant $|\varphi_g\rangle$ de $\tilde{\varphi}_g$ tel que pour tout vecteur $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\varphi_g\rangle = U(g)|\varphi\rangle \quad (8.5)$$

où l'opérateur $U(g)$ est unitaire ou antiunitaire et est unique à un facteur de phase près. ■

La loi de transformation des *rayons* devient donc une loi de transformation des *vecteurs*, par application d'un opérateur qui ne dépend que de la transformation g . Si $U(g)$ est unitaire, le théorème de Wigner implique non seulement l'invariance de la norme du produit scalaire, mais aussi celle de sa phase, puisque

$$\langle U(g)\chi | U(g)\varphi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle$$

Les opérateurs antiunitaires transforment le produit scalaire en son complexe conjugué

$$\langle U(g)\chi | U(g)\varphi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \chi \rangle \quad (8.6)$$

La démonstration du théorème de Wigner ne fait intervenir que des notions élémentaires, mais elle est fastidieuse, et nous la renvoyons à l'annexe A. Les opérateurs antiunitaires n'interviennent que lorsque la transformation g inclut le renversement du sens du temps ; nous en dirons un mot au § 8.3.3, mais nous en renvoyons l'étude détaillée à l'annexe A. Nous nous limitons désormais aux transformations unitaires.

Le théorème de Wigner a des conséquences particulièrement intéressantes si les transformations g forment un groupe \mathcal{G} . Le produit $g = g_2 g_1$ de deux transformations, de même que la transformation inverse g^{-1} , sont alors des transformations de \mathcal{G} . L'ordre des transformations dans $g_2 g_1$ est important car le groupe \mathcal{G} n'est pas en général abélien : $g_2 g_1 \neq g_1 g_2$. Si $g = g_2 g_1$, les rayons $\tilde{\varphi}_g$ et $\tilde{\varphi}_{g_2 g_1}$ doivent être identiques. Par exemple si \mathcal{G} est le groupe des rotations autour de Oz , et si $\mathcal{R}_z(\theta)$ représente la rotation d'angle θ autour de Oz on a

$$\mathcal{R}_z(\theta = \theta_2 + \theta_1) = \mathcal{R}_z(\theta_2)\mathcal{R}_z(\theta_1) \quad (8.7)$$

L'état physique obtenu en effectuant une rotation d'angle $\theta = \theta_2 + \theta_1$ doit être identique à celui obtenu en effectuant d'abord une rotation d'angle θ_1 suivie d'une rotation d'angle θ_2 .

Utilisons maintenant le théorème de Wigner pour faire un choix de phases sur les vecteurs tel que la correspondance entre $|\varphi\rangle$ et $|\varphi_g\rangle$ soit donnée par (8.5). Nous avons d'une part

$$|\varphi_g\rangle = U(g)|\varphi\rangle \quad (8.8)$$

et d'autre part

$$|\varphi_{g_2 g_1}\rangle = U(g_2)|\varphi_{g_1}\rangle = U(g_2)U(g_1)|\varphi\rangle \quad (8.9)$$

Les vecteurs $|\varphi_g\rangle$ et $|\varphi_{g_2 g_1}\rangle$ représentent des états physiques identiques, et ils doivent être égaux à un facteur de phase près

$$|\varphi_g\rangle = e^{i\alpha(g_2, g_1)}|\varphi_{g_2 g_1}\rangle \quad (8.10)$$

Le facteur de phase dans (8.10) pourrait *a priori* dépendre de $|\varphi\rangle$, mais en fait il dépend uniquement de g_1 et de g_2 . En effet si nous écrivons

$$|\varphi_g\rangle = e^{i\alpha}|\varphi_{g_2 g_1}\rangle \quad |\chi_g\rangle = e^{i\beta}|\chi_{g_2 g_1}\rangle$$

nous pouvons examiner le produit scalaire $\langle\chi|\varphi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\chi|\varphi\rangle &= \langle\chi_g|\varphi_g\rangle = e^{i(\alpha-\beta)}\langle\chi_{g_2 g_1}|\varphi_{g_2 g_1}\rangle \\ &= e^{i(\alpha-\beta)}\langle U(g_2)U(g_1)\chi|U(g_2)U(g_1)\varphi\rangle \\ &= e^{i(\alpha-\beta)}\langle\chi|\varphi\rangle \end{aligned}$$

ce qui implique $\alpha = \beta$. Comme le vecteur $|\varphi\rangle$ est arbitraire, (8.10) entraîne une relation correspondante pour les opérateurs $U(g)$

$$U(g) = e^{i\alpha(g_2, g_1)} U(g_2)U(g_1) \quad (8.11)$$

Cette équation traduit une propriété mathématique : on dit que les opérateurs $U(g)$ forment une *représentation projective* du groupe \mathcal{G} . Dans la suite du livre, nous aurons uniquement à considérer deux versions simples de (8.11), l'une

où le facteur de phase est $+1$, et dans ce cas on a affaire à une *représentation vectorielle* de \mathcal{G}

$$U(g) = U(g_2)U(g_1) \quad (8.12)$$

et l'autre où le facteur de phase vaut ± 1

$$U(g) = \pm U(g_2)U(g_1) \quad (8.13)$$

Nous verrons apparaître ce facteur \pm dans le cas où \mathcal{G} est le groupe des rotations ; les représentations (8.13) de ce groupe sont appelées *représentations spinorielles* du groupe des rotations.

8.2 Générateurs infinitésimaux

8.2.1 Définitions

On distingue deux types de groupes de transformations.

- Les groupes discrets, dont le nombre d'éléments est fini ou dénombrable. Comme cas particuliers simples on peut citer la parité, ou opération qui change le signe des coordonnées $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ (cf. § 8.3.3), ou les groupes cristallographiques qui jouent un rôle important en physique du solide.
- Les groupes continus, dont les éléments sont paramétrés par un ou plusieurs paramètres variant de façon continue⁶. Par exemple la rotation $\mathcal{R}_z(\theta)$ autour de Oz est paramétrée par l'angle θ qui varie de façon continue entre 0 et 2π .

Les groupes continus intéressants en physique sont les groupes de Lie (exercice 8.5.4), dont un exemple est le groupe des rotations dans un espace à trois dimensions, ou groupe $SO(3)$, le groupe des matrices orthogonales : $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{R}^T = I$ de déterminant $+1$ dans l'espace à trois dimensions⁷ ; A^T désigne l'opérateur transposé de A . Ce groupe va jouer un rôle majeur dans la suite. C'est un groupe à trois paramètres : on peut par exemple paramétrer une rotation par deux angles donnant la direction \hat{n} de l'axe de rotation dans un référentiel $Oxyz$ et l'angle de rotation, donc en tout trois angles qui varient de façon continue. Le groupe des rotations possède une infinité de sous-groupes abéliens, les rotations autour d'un axe fixe. Nous allons montrer

6. On peut remarquer que dans le cas d'un groupe continu les transformations $U(g)$ doivent nécessairement être unitaires par continuité, si tout élément du groupe peut être relié de façon continue à l'élément neutre e du groupe (en d'autres termes si le groupe est connexe) : en effet $U(e) = I$ est unitaire.

7. La relation $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = I$ implique que $\det \mathcal{R} = \pm 1$. Dans la notation $SO(3)$, S indique que l'on doit choisir $\det \mathcal{R} = +1$, O qu'il s'agit du groupe orthogonal et 3 désigne la dimension de l'espace. Si l'on ajoute aux rotations l'opération d'inversion des axes, ou parité, on obtient le groupe $O(3)$, qui inclut aussi les matrices de déterminant -1 . Le groupe $SO(3)$ est connexe, mais non $O(3)$: on ne peut pas passer de façon continue de $\det \mathcal{R} = +1$ à $\det \mathcal{R} = -1$.

qu'il suffit de considérer trois sous-groupes abéliens correspondant aux rotations autour de Ox , Oy et Oz : le nombre de ces sous-groupes est égal au nombre de paramètres indépendants. Les rotations de ces sous-groupes sont paramétrées par un angle θ , et selon (8.7), ce paramètre est un paramètre *additif* : le produit de deux rotations d'angles θ_1 et θ_2 est la rotation d'angle $\theta = \theta_1 + \theta_2$. De façon générale, si un groupe de Lie \mathcal{G} est paramétré par n paramètres indépendants, on dira que la dimension du groupe est n , et on pourra se ramener à l'étude de n sous-groupes abéliens (exercice 8.5.4). Soit un sous-groupe abélien de \mathcal{G} , dont les éléments h sont paramétrés à l'aide d'un paramètre additif α

$$h(\alpha_1 + \alpha_2) = h(\alpha_2)h(\alpha_1) \quad (8.14)$$

D'après (8.12) on doit avoir pour les opérateurs $U_h(\alpha)$ qui transforment les vecteurs d'état de \mathcal{H}

$$U_h(\alpha_1 + \alpha_2) = U_h(\alpha_2)U_h(\alpha_1) \quad (8.15)$$

Le théorème de Stone (§ 7.3.2) implique qu'il existe alors un opérateur hermitien $T_h = T_h^\dagger$ tel que

$$U_h(\alpha) = e^{-i\alpha T_h} \quad (8.16)$$

L'opérateur T_h est appelé *générateur infinitésimal* de la transformation considérée. Comme T_h est hermitien, c'est un bon candidat pour une propriété physique, et de fait à toutes les transformations dont la liste figure dans l'introduction de ce chapitre correspondent des propriétés physiques fondamentales. En effet on établit la correspondance suivante entre générateurs infinitésimaux et propriétés physiques pour ces diverses transformations, que nous allons revoir en détail dans la suite de ce chapitre.

- Translations de temps de t : $U(t) = \exp(-itH/\hbar)$: $T_h = H =$ hamiltonien : voir le chapitre 4.
- Translations d'espace de $\vec{a} = a\hat{a}$: $U(\vec{a}) = \exp(-ia(\vec{P} \cdot \hat{a})/\hbar)$: $T_h = \vec{P} \cdot \hat{a} =$ composante suivant \hat{a} de l'impulsion \vec{P} .
- Rotations autour d'un axe \hat{n} : $U_{\hat{n}}(\theta) = \exp(-i\theta(\vec{J} \cdot \hat{n})/\hbar)$: $T_h = \vec{J} \cdot \hat{n} =$ composante suivant \hat{n} du moment angulaire \vec{J} .
- Transformation de Galilée de vitesse \vec{v} : $U(\vec{v}) = \exp(-i(\vec{v} \cdot \vec{G})/\hbar)$: $\vec{G} = -m\vec{R}$, $\vec{R} =$ position, m étant la masse.

Dans chaque cas la présence de \hbar dans l'exponentielle assure que l'exposant est une quantité sans dimensions. Si l'on choisit précisément \hbar , et non \hbar que multiplie une constante numérique, alors les expressions précédentes *définissent* les opérateurs représentant les propriétés physiques énergie, impulsion, moment angulaire et position. En fait ces expressions donnent la définition *la plus générale* de ces opérateurs.

8.2.2 Lois de conservation

Nous allons montrer qu'aux lois de conservation de la physique classique en présence d'une symétrie correspondent en physique quantique des lois de conservation pour les valeurs moyennes de grandeurs physiques. Généralisons d'abord (4.26) au cas où l'opérateur A dépend explicitement du temps. Au membre de droite de (4.26) on doit ajouter

$$\langle \varphi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \varphi(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\varphi}$$

et cette équation donne la forme générale du *théorème d'Ehrenfest*

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_{\varphi} + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\varphi}} \quad (8.17)$$

Lorsque l'opérateur A est indépendant du temps, $(\partial A / \partial t) = 0$ et l'on retrouve (4.26)

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_{\varphi} \quad (8.18)$$

Comme cette égalité est valable quel que soit $|\varphi\rangle$, nous obtenons le théorème suivant (nous supposons H indépendant du temps).

Théorème de conservation de la valeur moyenne. Lorsque la propriété physique A est indépendante du temps, la condition $d\langle A \rangle / dt = 0$ implique $[H, A] = 0$ et réciproquement.

$$\text{Si } \frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi} = 0 \iff [H, A] = 0 \blacksquare \quad (8.19)$$

Comme application, supposons que les propriétés d'un système physique soient invariantes par toute translation d'espace. Ce sera le cas par exemple pour un système isolé de deux particules dont l'énergie potentielle dépend uniquement de la différence de leurs positions ($\vec{r}_1 - \vec{r}_2$). La valeur moyenne du hamiltonien doit être la même dans l'état $|\varphi\rangle$ et l'état $|\varphi_{\vec{a}}\rangle = \exp[-i(\vec{P} \cdot \vec{a})/\hbar]|\varphi\rangle$ obtenu par translation de \vec{a} , où \vec{a} est un vecteur arbitraire

$$\langle \varphi_{\vec{a}} | H | \varphi_{\vec{a}} \rangle = \langle \varphi | \exp\left(i \frac{\vec{P} \cdot \vec{a}}{\hbar}\right) H \exp\left(-i \frac{\vec{P} \cdot \vec{a}}{\hbar}\right) | \varphi \rangle = \langle \varphi | H | \varphi \rangle$$

Faisant tendre \vec{a} vers zéro on en déduit

$$\boxed{\text{Invariance par translation d'espace} \iff [H, \vec{P}] = 0} \quad (8.20)$$

La notation $[H, \vec{P}] = 0$ indique que les trois composantes de l'impulsion commutent avec H . D'après (8.18), cette équation implique que la valeur moyenne $\langle \vec{P} \rangle$ de \vec{P} est indépendante du temps : l'invariance par translation entraîne la

conservation de l'impulsion (en valeur moyenne). Un raisonnement identique montre que

$$\boxed{\text{Invariance par rotation} \iff [H, \vec{J}] = 0} \quad (8.21)$$

La valeur moyenne $\langle \vec{J} \rangle$ de \vec{J} est indépendante du temps : l'invariance par rotation entraîne la conservation du moment angulaire (en valeur moyenne).

Il est également utile de faire les deux remarques suivantes.

- Si $[H, A] = 0$, A et H peuvent être diagonalisés simultanément, et en particulier on peut choisir les états stationnaires comme vecteurs propres de A .
- La condition $[H, A] = 0$ implique que A commute avec l'opérateur d'évolution $U(t - t_0)$ (4.20). Si $|\varphi(t_0)\rangle$ est vecteur propre de A au temps t_0

$$A|\varphi(t_0)\rangle = a|\varphi(t_0)\rangle$$

alors $|\varphi(t)\rangle$ est vecteur propre de A avec la même valeur propre

$$A|\varphi(t)\rangle = AU(t - t_0)|\varphi(t_0)\rangle = U(t - t_0)A|\varphi(t_0)\rangle = a|\varphi(t)\rangle$$

La valeur propre a est conservée : c'est une constante du mouvement. On aurait pu déduire ce résultat directement de (8.19), puisque dans ce cas $\langle A \rangle = a$.

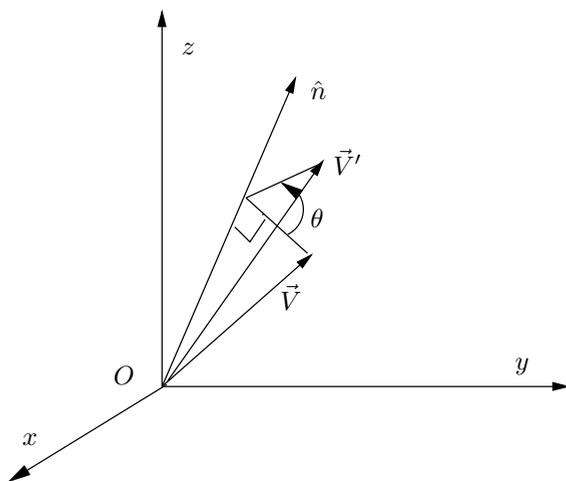
8.2.3 Relations de commutation des générateurs infinitésimaux

On peut déterminer la plupart des propriétés d'un groupe de Lie en examinant le voisinage de l'identité, plus précisément en étudiant les relations de commutation de ses générateurs infinitésimaux : l'ensemble de ces relations de commutation constitue l'*algèbre de Lie* du groupe (exercice 8.5.4). Cependant deux groupes de Lie isomorphes dans le voisinage de l'identité peuvent différer par des propriétés topologiques globales : nous en verrons bientôt un exemple. Examinons plus en détail le cas du groupe des rotations⁸. L'opérateur de rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ d'un angle θ autour d'un axe \hat{n} est un opérateur orthogonal de l'espace à trois dimensions : $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{R}^T = I$. Les rotations $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ forment un sous-groupe abélien du groupe des rotations, et toujours d'après le théorème de Stone on peut écrire

$$\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta) = \exp\left(-i\theta(\vec{T} \cdot \hat{n})\right) \quad (8.22)$$

où $\vec{T} \cdot \hat{n}$ est un opérateur hermitien : \mathcal{R} étant orthogonal et réel est aussi unitaire. Dans une telle rotation, un vecteur \vec{V} se transforme en \vec{V}' (figure 8.3)

$$\vec{V}' = (1 - \cos \theta)(\hat{n} \cdot \vec{V})\hat{n} + \cos \theta \vec{V} + \sin \theta (\hat{n} \times \vec{V}) \quad (8.23)$$

FIG. 8.3 – Rotation de θ d'un vecteur \vec{V} autour d'un axe \hat{n} .

On peut écrire cette loi de transformation sous forme matricielle

$$V'_i = \sum_{j=1}^3 [\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij} V_j \quad (8.24)$$

La détermination explicite de la matrice $[\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij}$ est proposée à l'exercice 8.5.1. Nous n'aurons pas à nous en servir, car nous allons prendre la limite $\theta \rightarrow 0$, c'est-à-dire la limite des rotations infinitésimales

$$\vec{V}' = \vec{V} + \theta(\hat{n} \times \vec{V}) + O(\theta)^2 \quad (8.25)$$

Le développement de l'exponentielle dans (8.22) et la comparaison avec (8.25) donnent

$$(\vec{T} \cdot \hat{n})\vec{V} = i \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

et par identification les opérateurs hermitiens T_x , T_y et T_z

$$T_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad T_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.26)$$

Lorsque θ est fini, on peut aisément calculer l'exponentielle dans (8.22) en remarquant que $(\vec{T} \cdot \hat{n})^3 = \vec{T} \cdot \hat{n}$ (exercice 8.5.1) et vérifier que l'on retrouve

8. Sauf mention explicite du contraire, il s'agira toujours du groupe $SO(3)$ des rotations dans l'espace euclidien à trois dimensions.

bien (8.23). Un calcul direct (exercice 8.5.1) permet de montrer les relations de commutation⁹ suivantes, qui constituent l'algèbre de Lie de $SO(3)$

$$[T_x, T_y] = iT_z \quad [T_y, T_z] = iT_x \quad [T_z, T_x] = iT_y \quad (8.27)$$

ou en reprenant les notations de (3.52)

$$\boxed{[T_i, T_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} T_k} \quad (8.28)$$

Nous allons donner une démonstration plus rapide et surtout plus instructive de (8.27) en utilisant l'expression suivante pour une rotation d'angle θ autour d'un axe $\hat{n}(\phi)$ du plan yOz , obtenu à partir de l'axe Oy par une rotation d'angle ϕ autour de Ox (figure 8.4)

$$\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta) = \mathcal{R}_x(\phi)\mathcal{R}_y(\theta)\mathcal{R}_x(-\phi) \quad (8.29)$$

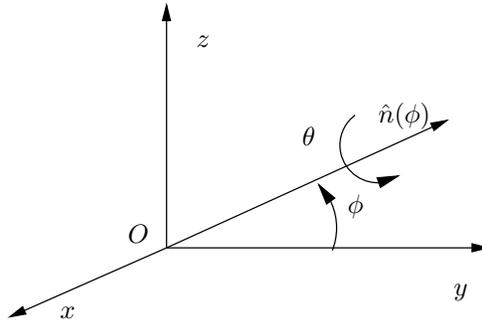


FIG. 8.4 – Rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta)$.

En effet la rotation $\mathcal{R}_x(-\phi)$ amène d'abord l'axe $\hat{n}(\phi)$ sur Oy ; on effectue ensuite la rotation d'angle θ autour de Oy et on revient enfin à la position initiale de l'axe par la rotation $\mathcal{R}_x(\phi)$. Exprimons $\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta)$ et $\mathcal{R}_y(\theta)$ sous forme exponentielle (8.22) et développons au premier ordre en θ

$$\vec{T} \cdot \hat{n}(\phi) = \cos \phi T_y + \sin \phi T_z = e^{-i\phi T_x} T_y e^{i\phi T_x}$$

En développant au premier ordre en ϕ on obtient

$$[T_x, T_y] = iT_z$$

et les deux autres relations de commutation (8.27) s'en déduisent par permutation circulaire.

⁹ Il suffit bien sûr de montrer la première relation, les deux autres s'en déduisant par permutation circulaire.

Considérons maintenant les opérateurs qui effectuent des rotations sur les états physiques dans \mathcal{H} . Nous avons vu que l'opérateur qui effectue une rotation d'angle θ autour d'un axe \hat{n} est

$$\boxed{U_{\hat{n}}(\theta) = \exp\left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right)} \quad (8.30)$$

Comme ces opérateurs forment une représentation du groupe des rotations, on déduit de (8.12) et de (8.29)

$$U_{\hat{n}(\phi)}(\theta) = U_x(\phi)U_y(\theta)U_x(-\phi)$$

En développant comme précédemment les exponentielles au premier ordre en θ puis en ϕ on obtient les relations de commutation du moment angulaire

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (8.31)$$

ou

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k} \quad (8.32)$$

Les relations de commutation des J_i sont donc, au facteur \hbar près, identiques à celles des T_i . *Les générateurs infinitésimaux des rotations dans \mathcal{H} ont des relations de commutation identiques à celles des générateurs infinitésimaux du groupe des rotations dans l'espace ordinaire.* Notre démonstration des relations (8.31) ou (8.32) souligne leur origine géométrique.

Les relations de commutation des opérateurs scalaires et vectoriels avec \vec{J} sont d'une grande importance pratique. Un *opérateur scalaire* \mathcal{S} est un opérateur dont la valeur moyenne est invariante dans une rotation. Si $U(\mathcal{R})$ est l'opérateur qui effectue la rotation \mathcal{R} dans l'espace des états

$$|\varphi_{\mathcal{R}}\rangle = U(\mathcal{R})|\varphi\rangle$$

nous devons avoir

$$\langle \varphi_{\mathcal{R}} | \mathcal{S} | \varphi_{\mathcal{R}} \rangle = \langle \varphi | U^\dagger(\mathcal{R}) \mathcal{S} U(\mathcal{R}) | \varphi \rangle = \langle \varphi | \mathcal{S} | \varphi \rangle$$

et par conséquent pour une rotation $R_{\hat{n}}(\theta)$

$$\exp\left(i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) \mathcal{S} \exp\left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) = \mathcal{S}$$

Prenant θ infinitésimal nous constatons que \mathcal{S} commute avec \vec{J}

$$\boxed{[\vec{J}, \mathcal{S}] = 0} \quad (8.33)$$

Un opérateur scalaire commute avec le moment angulaire.

Un raisonnement analogue permet d'établir les relations de commutation de \vec{J} avec \vec{R} ou \vec{P} , et plus généralement avec tous les *opérateurs vectoriels*. Par définition, un opérateur vectoriel \vec{V} est un opérateur dont la valeur moyenne se transforme par rotation suivant la loi (8.24). Nous devons donc avoir

$$\langle \varphi_{\mathcal{R}} | V_i | \varphi_{\mathcal{R}} \rangle = \langle \varphi | U^\dagger(\mathcal{R}) V_i U(\mathcal{R}) | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^3 \mathcal{R}_{ij} \langle \varphi | V_j | \varphi \rangle$$

et par conséquent pour une rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$

$$\exp\left(i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) V_i \exp\left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) = \sum_{j=1}^3 [\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij} V_j \quad (8.34)$$

Prenons $\hat{n} = \hat{x}$ et θ infinitésimal ; d'après (8.25) \vec{V}' a pour composantes

$$(V_x, V_y - \theta V_z, V_z + \theta V_y)$$

et nous avons donc, par exemple pour la composante $i = y$ de (8.33)

$$\left(I + \frac{i}{\hbar} \theta J_x\right) V_y \left(I - \frac{i}{\hbar} \theta J_x\right) = V_y - \theta V_z$$

soit $i[J_x, V_y] = -\hbar V_z$ et en examinant les autres composantes

$$[J_x, V_x] = 0 \quad [J_x, V_y] = i\hbar V_z \quad [J_x, V_z] = -i\hbar V_y$$

ou sous forme générale

$$\boxed{[J_i, V_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k} \quad (8.35)$$

Ces relations sont valables en particulier pour l'opérateur position \vec{R} et l'opérateur impulsion \vec{P} , qui sont des opérateurs vectoriels.

Le lecteur attentif aura remarqué que les relations de commutation (3.53) du spin $1/2$, $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$, sont identiques à (8.31), et que le spin $1/2$ est donc un moment angulaire. Donnons quelques indications permettant de comprendre cette identification, sans toutefois entrer dans des détails mathématiques qui nous entraîneraient trop loin. L'algèbre de Lie (3.52) des matrices de Pauli est celle du groupe $SU(2)$ des matrices 2×2 unitaires et de déterminant $+1$ (exercice 8.5.2). L'algèbre de Lie de $SU(2)$ et celle de $SO(3)$ sont identiques : les deux groupes coïncident dans le voisinage de l'identité. Cependant les deux groupes ne sont pas *globalement* identiques : on le voit en considérant une rotation de 2π autour d'un axe \hat{n} . Compte tenu de (3.59)

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right) = -I \quad \text{pour } \theta = 2\pi$$

On retrouve l'identité seulement pour $\theta = 4\pi$! À la rotation identité de $SO(3)$ correspondent donc deux éléments de $SU(2)$, $+I$ et $-I$. La correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$ est un homomorphisme, qui à deux éléments de $SU(2)$ fait correspondre un élément de $SO(3)$, et on a donc pour un spin 1/2 une représentation projective (8.13) du groupe des rotations. Cette propriété découle de ce que le groupe $SO(3)$ est connexe mais non simplement connexe¹⁰ : une courbe continue fermée dans l'espace des paramètres du groupe ne peut pas toujours être déformée continûment en un point. Cette propriété est visible dans les rotations de l'espace ordinaire¹¹ ; elle n'est pas propre à la mécanique quantique comme on a parfois tendance à l'affirmer¹² : la véritable rotation identité pour un objet *en relation avec son environnement* n'est pas la rotation de 2π mais la rotation de 4π !

8.3 Relations de commutation canoniques

8.3.1 Cas de la dimension $d = 1$

Plaçons-nous d'abord à une dimension, sur l'axe des x , et soit X l'opérateur position. Considérons une particule dans un état $|\varphi\rangle$ où cette particule est localisée au voisinage d'une position moyenne x_0 , avec une dispersion Δx

$$\langle\varphi|X|\varphi\rangle = \langle X\rangle = x_0 \quad \langle\varphi|(X - x_0)^2|\varphi\rangle = (\Delta x)^2 \quad (8.36)$$

Elle est par exemple localisée dans l'intervalle $[x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x]$ (figure 8.5). Si nous appliquons à cet état une translation a

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi_a\rangle = \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|\varphi\rangle = U(a)|\varphi\rangle$$

10. Un disque dans le plan est simplement connexe. Perçons un trou dans ce disque : alors la région du plan ainsi obtenue n'est plus simplement connexe, car une courbe encerclant le trou ne peut plus être déformée en un point.

11. cf. Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 3.D ; l'argument est dû à Dirac.

12. Un mot sur les conditions où les représentations projectives sont nécessaires. Deux cas peuvent se présenter. (i) Comme pour la correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$, la nécessité d'une représentation projective vient de propriétés topologiques globales. Le facteur de phase dans (8.11) prend alors des valeurs discrètes, comme dans (8.13). (ii) Si

$$[T_i, T_j] = i \sum_k C_{ijk} T_k$$

est l'algèbre de Lie du groupe (dont (8.28) pour $SO(3)$ est un exemple, voir aussi l'exercice 8.5.4), il se peut que l'on puisse construire une autre algèbre de Lie dont le second membre diffère par un multiple de l'identité :

$$[T'_i, T'_j] = i \sum_k C_{ijk} T'_k + i D_{ij} I \quad D_{ij} = -D_{ji}$$

C'est ce que l'on appelle une extension centrale de l'algèbre de Lie initiale. Si le terme $D_{ij} I$ peut être éliminé par une redéfinition des générateurs infinitésimaux T'_i , alors il n'existe que des représentations vectorielles (avec éventuellement des facteurs de phase discrets dus aux propriétés topologiques globales comme dans (i)). Dans le cas contraire, par exemple celui du groupe de Galilée (exercice 8.5.7), il existe des représentations projectives où le facteur de phase varie de façon continue : cf. par exemple Weinberg [1995], chapitre 2.

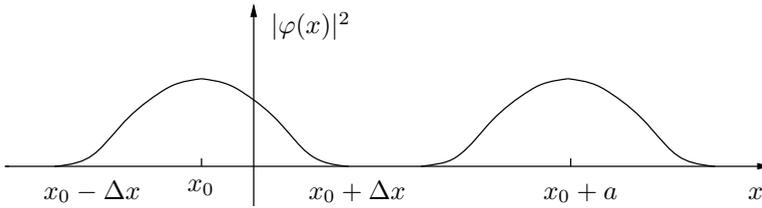


FIG. 8.5 – Particules localisées au voisinage de $x = x_0$ et de $x = x_0 + a$.

où P est l'opérateur impulsion et $U(a)$ l'opérateur de translation

$$\boxed{U(a) = \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) \quad U^{-1}(a) = U^\dagger(a) = \exp\left(i\frac{Pa}{\hbar}\right)} \quad (8.37)$$

alors la particule sera après translation localisée dans l'intervalle $[x_0 + a - \Delta x, x_0 + a + \Delta x]$

$$\langle X \rangle_a = \langle \varphi_a | X | \varphi_a \rangle = \langle \varphi | U^{-1}(a) X U(a) | \varphi \rangle = x_0 + a = \langle X \rangle + a$$

Comme l'état $|\varphi\rangle$ est arbitraire, l'égalité des valeurs moyennes entraîne celle des opérateurs

$$U^{-1}(a) X U(a) = X + aI \quad (8.38)$$

et en faisant tendre a vers zéro nous obtenons la *relation de commutation canonique* (RCC) entre X et P

$$\boxed{[X, P] = i\hbar I} \quad (8.39)$$

Comme application, calculons le commutateur entre P et une fonction quelconque $f(X)$. Développons $f(X)$ en série de Taylor

$$f(X) = c_0 + c_1 X^2 + \dots + c_n X^n + \dots$$

D'après (8.38)

$$U^{-1}(a) X^2 U(a) = U^{-1}(a) X U(a) U^{-1}(a) X U(a) = (X + aI)^2$$

et ceci se généralise immédiatement à X^n

$$U^{-1}(a) X^n U(a) = (X + aI)^n$$

Nous obtenons donc

$$\boxed{U^{-1}(a) f(X) U(a) = f(X + aI)} \quad (8.40)$$

Selon une technique maintenant éprouvée nous faisons tendre a vers zéro

$$[P, f(X)] = -i\hbar \frac{\partial f(X)}{\partial X} \quad (8.41)$$

Comme cas particulier de (8.40) nous pouvons choisir $f(X) = \exp(i\beta X)$, β réel, et nous obtenons les relations de commutation canoniques sous la forme de Weyl

$$\exp\left(i\frac{Pa}{\hbar}\right) \exp(i\beta X) \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) = \exp(i\beta X) \exp(i\beta a) \quad (8.42)$$

La forme de Weyl est plus intéressante mathématiquement que (8.39), car les opérateurs unitaires qui interviennent dans (8.42) sont bornés (§ 7.2.1), contrairement aux opérateurs X et P .

On déduit immédiatement de (8.39) l'inégalité de Heisenberg sur les dispersions en position et impulsion ; en effet, d'après (4.10)

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\langle (X - x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (P - p)^2 \rangle} \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (8.43)$$

8.3.2 Réalisation explicite et commentaires

Une réalisation explicite, ou *représentation* des relations de commutation canoniques (8.39) peut être donnée dans l'espace $L^{(2)}(\mathbb{R})$ des fonctions $\varphi(x)$ différentiables de carré sommable sur la droite dans l'intervalle $[-\infty, +\infty]$. Cette représentation est

$$\boxed{(X\varphi)(x) = x\varphi(x) \quad (P\varphi)(x) = -i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}} \quad (8.44)$$

Dans ces équations, $(X\varphi)$ et $(P\varphi)$ sont des symboles de fonctions, par exemple $(X\varphi)(x) = g(x)$ et $(P\varphi)(x) = h(x)$. Vérifions (8.44)

$$([XP - PX]\varphi)(x) = -i\hbar x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi(x)) = i\hbar \varphi(x)$$

ou

$$([X, P]\varphi)(x) = i\hbar \varphi(x)$$

Il est légitime de se poser la question de l'unicité de la représentation (8.44) des relations de commutation canoniques : l'équation (8.44) est-elle une solution unique de (8.39) ? Évidemment deux représentations ne doivent pas être considérées comme distinctes si elles sont reliées par une transformation unitaire, qui est un simple changement de base orthonormée dans \mathcal{H} . Soit U un opérateur unitaire. Les opérateurs P' et X' obtenus par transformation unitaire

$$P' = U^\dagger P U \quad X' = U^\dagger X U$$

obéissent aussi aux relations de commutation canoniques

$$[X', P'] = U^\dagger X U U^\dagger P U - U^\dagger P U U^\dagger X U = U^\dagger [X, P] U = i\hbar I$$

La représentation (X', P') des relations de commutation canoniques est dite unitairement équivalente à la représentation (X, P) . La grande importance de (8.44) vient du théorème suivant, que nous énonçons sans démonstration.

Théorème d'équivalence unitaire de von Neumann. Toutes les représentations des relations de commutation canoniques sous la forme de Weyl¹³ (8.42) sont *unitairement équivalentes* à la représentation (8.44) sur $L^{(2)}(\mathbb{R})$. De plus cette représentation est irréductible, c'est-à-dire que tout opérateur sur \mathcal{H} peut s'écrire comme une fonction de X et de P . Tout opérateur commutant avec X (resp. P) est une fonction de X (resp. P). Tout opérateur commutant avec X et P est multiple de l'identité I . ■

Ce théorème implique que nous n'avons pas à nous préoccuper du choix de la représentation de (8.39), puisque deux choix différents seront reliés par une transformation unitaire.

À trois dimensions, les opérateurs position \vec{R} et impulsion \vec{P} sont des opérateurs vectoriels de composantes X, Y, Z et P_x, P_y, P_z , que l'on note collectivement X_i et P_i , $i = x, y, z$. Les composantes différentes de \vec{R} et \vec{P} commutent, et seules les composantes identiques ont des relations de commutation non nulles

$$\boxed{[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} I} \quad (8.45)$$

8.3.3 L'opération parité

L'opération parité consiste à inverser le signe des coordonnées : $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. On peut aussi la voir comme la combinaison d'une réflexion par rapport à un plan suivie d'une rotation de π autour d'un axe perpendiculaire à ce plan. Prenons par exemple le plan xOy et appelons M la réflexion par rapport à ce plan, $\mathcal{R}_z(\pi)$ la rotation autour de Oz

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \xrightarrow{M} \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{R}_z(\pi)} \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

Comme l'invariance par rotation est en général valable, on exprime de façon imagée l'invariance par parité en disant que *l'image dans un miroir d'une expérience de physique doit apparaître comme physiquement possible*. L'opération parité agit différemment sur les vecteurs proprement dits, ou *vecteurs polaires* comme la position \vec{r} , l'impulsion \vec{p} ou le champ électrique \vec{E}

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \quad \vec{p} \rightarrow -\vec{p} \quad \vec{E} \rightarrow -\vec{E} \quad (8.47)$$

13. Cette précision est importante : sinon les opérateurs A_C du § 7.2.2 permettraient de construire un contre-exemple au théorème !

et sur les *pseudovecteurs*, ou *vecteurs axiaux*, comme le moment angulaire \vec{j} ou le champ magnétique \vec{B} , qui sont associés à un sens de rotation, et non à une direction

$$\vec{j} \rightarrow \vec{j} \quad \vec{B} \rightarrow \vec{B} \quad (8.48)$$

Rappelons que le produit vectoriel de deux vecteurs polaires est un vecteur axial¹⁴ : $\vec{j} = \vec{r} \times \vec{p}$ est un vecteur axial.

Les interactions faibles (cf. § 1.1.4) ne respectent pas l'invariance par parité : ceci a été montré pour la première fois par C.S. Wu, en utilisant la désintégration β (1.4) de noyaux de cobalt⁶⁰ polarisés en un état excité du nickel⁶⁰



La valeur moyenne du moment angulaire $\langle \vec{J} \rangle$ du ${}^{60}\text{Co}$ a une orientation fixée (figure 8.6). On constate que les électrons de la désintégration sont émis de façon préférentielle dans la direction opposée à celle du moment angulaire : si \vec{P} est l'impulsion des électrons, $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle < 0$. Mais $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle$, valeur moyenne du produit scalaire d'un vecteur polaire et d'un vecteur axial, est un pseudoscalaire, qui change de signe dans une opération parité. L'image de l'expérience dans un miroir (figure 8.6) n'apparaît pas comme pas physiquement possible : dans le miroir les sens de rotation sont inversés, et les électrons partent préférentiellement dans la direction de \vec{J} .

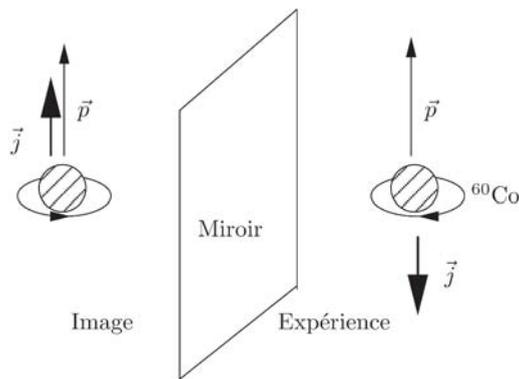


FIG. 8.6 – L'expérience de désintégration du cobalt polarisé.

Le groupe \mathcal{G} correspondant à l'opération parité est le groupe multiplicatif à deux éléments $\{+1, -1\}$, ou groupe Z_2 . Comme on ne peut pas relier

14. L'existence de vecteurs axiaux est une particularité de l'espace à trois dimensions, $d = 3$. Un vecteur axial est en fait un tenseur antisymétrique de rang 2, qui a $d(d-1)/2$ composantes en général. Pour $d = 3$, ce nombre de composantes est 3, ce qui permet de lui faire correspondre un (pseudo)vecteur. À 4 dimensions une telle identification n'est plus possible : un tenseur antisymétrique de rang 2 comme le champ électromagnétique a 6 composantes.

continûment -1 à l'identité, il nous faut trouver un argument pour décider si l'opérateur Π qui représente l'opération parité dans l'espace des états est unitaire ou antiunitaire. Soit χ et φ deux vecteurs arbitraires et (χ, φ) leur produit scalaire (nous revenons provisoirement aux notations des mathématiciens). Si la parité est une symétrie

$$|(\Pi\chi, \Pi\varphi)| = |(\chi, \varphi)|$$

Comme dans l'opération parité les opérateurs position et impulsion doivent se transformer tous deux comme des vecteurs :

$$\vec{R} \rightarrow \Pi^{-1}\vec{R}\Pi = -\vec{R} \quad \vec{P} \rightarrow \Pi^{-1}\vec{P}\Pi = -\vec{P} \quad (8.49)$$

leur commutateur est inchangé

$$\Pi[X_i, P_j]\Pi^{-1} = i\hbar\delta_{ij}I$$

Examinons l'élément de matrice

$$\begin{aligned} (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\varphi) &= (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\Pi^{-1}\Pi\varphi) \\ &= (\Pi\chi, i\hbar\delta_{ij}\Pi\varphi) = i\hbar\delta_{ij}(\Pi\chi, \Pi\varphi) \end{aligned} \quad (8.50)$$

Mais on a également

$$\begin{aligned} (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\varphi) &= (\Pi\chi, \Pi i\hbar\delta_{ij}\varphi) \\ &= i\hbar\delta_{ij}(\Pi\chi, \Pi\varphi) \end{aligned} \quad (8.51)$$

si l'on suppose que Π est unitaire. En effet, pour un opérateur unitaire

$$(U\chi, U\varphi) = (\chi, \varphi) = i(\chi, \varphi)$$

tandis que pour un opérateur antiunitaire

$$(U\chi, U\varphi) = (i\varphi, \chi) = -i(\varphi, \chi)$$

Les équations (8.50) et (8.51) sont compatibles uniquement si Π est unitaire. En revanche, si au lieu de la parité Π on considère le renversement du sens du temps $\Theta : \vec{R} \rightarrow \vec{R}$ et $\vec{P} \rightarrow -\vec{P}$ (cf. annexe A.2), alors

$$\Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1} = -[X_i, P_j] = -i\hbar\delta_{ij}$$

et ce changement de signe entraîne que Θ est antiunitaire.

Si la parité est une symétrie, ce qui dans l'état actuel de nos connaissances est le cas pour les interactions fortes et les interactions électromagnétiques, alors Π doit commuter avec le hamiltonien : $[\Pi, H] = 0$. Comme $\Pi^2 = I$, puisque deux opérations parité successives ramènent le système d'axes à sa position initiale, les valeurs propres de Π sont ± 1 . Comme Π et H commutent, on peut trouver un système de vecteurs propres communs $|\varphi_{\pm}\rangle$ à H et à Π

$$H|\varphi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\varphi_{\pm}\rangle \quad \Pi|\varphi_{\pm}\rangle = \pm|\varphi_{\pm}\rangle \quad (8.52)$$

Les états $|\varphi_{+}\rangle$ sont dits de *parité paire* et les états $|\varphi_{-}\rangle$ de *parité impaire*.

8.4 Invariance galiléenne

8.4.1 Hamiltonien en dimension $d = 1$

Nous allons maintenant examiner les conséquences de la dernière invariance que nous n'avons pas encore exploitée, l'invariance par changement de référentiel d'inertie. Nous nous limitons d'abord à une dimension, une particule sur l'axe des x . Les équations de la physique non relativiste doivent garder la même forme dans la transformation de Galilée

$$x' = x - vt \tag{8.53}$$

qui fait passer d'un référentiel d'inertie à un autre référentiel d'inertie se déplaçant à la vitesse v par rapport au premier. La loi de transformation (8.53) correspond au point de vue passif du changement d'axes. Afin de garder la cohérence avec les sections précédentes, nous allons choisir le point de vue actif, qui consiste à modifier la vitesse de toutes les particules de v ; en bon français¹⁵, on « booste » toutes les particules de v . Si la position, la vitesse, l'impulsion p et l'énergie cinétique K initiales d'une particule classique de masse m sont

$$x, \quad \dot{x}, \quad p = m\dot{x}, \quad K = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

ces mêmes variables deviendront après le « boost » v

$$x' = x + vt, \quad \dot{x}' = \dot{x} + v, \quad p' = m\dot{x}', \quad K' = \frac{1}{2}m(\dot{x}')^2 \tag{8.54}$$

Contrairement au cas des translations et des rotations, l'énergie n'est pas invariante dans une transformation de Galilée. On doit seulement exiger que la forme des équations de la physique reste invariante, ce que l'on appelle aussi la *covariance* de ces équations par rapport à cette transformation.

Venons-en maintenant au cas quantique, en nous plaçant au temps $t = 0$, ce qui correspond à une transformation de Galilée instantanée. La loi de transformation des vecteurs d'état dans une transformation de Galilée sera une transformation unitaire $U(v)$

$$U(v) = \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) \tag{8.55}$$

où $G = G^\dagger$ est le générateur infinitésimal des transformations de Galilée. Les transformations de Galilée à une dimension forment un groupe additif, puisque la composition de deux transformations de vitesses v et v' est une transformation de vitesse $v'' = v + v'$. Une fois de plus, le théorème de Stone nous garantit l'existence d'un générateur infinitésimal hermitien G . Si $\langle A \rangle$ est

15. Il n'existe pas de bonne traduction de ce terme dont l'origine est le « booster » d'une fusée.

la valeur moyenne d'une propriété physique dans l'état $|\varphi\rangle$, sa valeur moyenne $\langle A \rangle_v$ dans l'état transformé $|\varphi_v\rangle = U(v)|\varphi\rangle$ sera

$$\langle \varphi_v | A | \varphi_v \rangle = \langle A \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) A U(v) | \varphi \rangle \quad (8.56)$$

Nous nous attendons d'après (8.54) (pour $t = 0$) à ce que les valeurs moyennes des opérateurs position X , impulsion P et vitesse \dot{X} se transforment selon

$$\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) X U(v) | \varphi \rangle = \langle X \rangle \quad (8.57)$$

$$\langle \dot{X} \rangle \rightarrow \langle \dot{X} \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) \dot{X} U(v) | \varphi \rangle = \langle \dot{X} \rangle + v \quad (8.58)$$

$$\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) P U(v) | \varphi \rangle = \langle P \rangle + mv \quad (8.59)$$

L'hypothèse forte¹⁶, même si elle semble naturelle, est en fait (8.58), car \dot{X} est défini comme $(i/\hbar)[H, X]$ (cf. (8.18), et (8.58) conduit à restreindre les hamiltoniens possibles. Comme (8.59) est valable quel que soit $|\varphi\rangle$ on déduit

$$\exp\left(i \frac{vG}{\hbar}\right) P \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) = P + mvI \quad (8.60)$$

et en faisant tendre v vers zéro

$$[G, P] = -i\hbar mI$$

Il est donc possible de choisir $G = -mX$. D'après le théorème de von Neumann, tout autre choix serait unitairement équivalent.

Considérons maintenant l'opérateur \dot{X} décrivant la vitesse, qui, suivant (8.18) pour $A = X$, est défini par

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] \quad (8.61)$$

D'après (8.58)

$$\exp\left(i \frac{vG}{\hbar}\right) \dot{X} \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) = \dot{X} + vI \quad (8.62)$$

et en retranchant (8.60) (divisé par m) de (8.62)

$$\exp\left(i \frac{vG}{\hbar}\right) \left[\dot{X} - \frac{1}{m}P\right] \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) = \dot{X} - \frac{1}{m}P \quad (8.63)$$

ce qui implique que l'opérateur $[\dot{X} - P/m]$ commute avec G , et donc avec X . Toujours d'après le théorème de von Neumann, $[\dot{X} - P/m]$ doit être une fonction de X

$$\dot{X} - P/m = \frac{1}{m} f(X) \quad (8.64)$$

Dans le cas à une dimension, et en général seulement dans ce cas, on peut éliminer la fonction f par une transformation unitaire. En effet soit $F(x)$ une

16. Voir Brown et Holland [1999] pour une évaluation critique de cette hypothèse.

primitive de $f(x)$, $F'(x) = f(x)$; considérons la transformation unitaire, qui est une transformation de jauge locale (cf. § 11.5.1)

$$S = \exp\left(\frac{i}{\hbar} F(X)\right) \quad (8.65)$$

Dans la transformation unitaire $X' = S^{-1}XS$, X reste évidemment inchangé : $X' = X$. Calculons P' . En utilisant (8.41)

$$[P, S] = -i\hbar \frac{\partial S}{\partial X} = (-i\hbar) \left(\frac{i}{\hbar}\right) f(X)S = f(X)S$$

d'où l'on déduit

$$S^{-1}PS - P = S^{-1}(PS - SP) = S^{-1}[P, S] = S^{-1}f(X)S = f(X)$$

d'où $P' = S^{-1}PS = P + f(X)$ et d'après (8.64)

$$\dot{X} = \frac{1}{m} P'$$

On peut donc toujours choisir comme opérateur impulsion $P = m\dot{X}$: ce choix est unitairement équivalent à tous les autres. Nous allons utiliser ces résultats pour déterminer la forme la plus générale du hamiltonien compatible avec les lois de transformation galiléennes. Définissons l'opérateur K , qui sera bien sûr la version quantique de l'énergie cinétique, par

$$K = \frac{1}{2} m \dot{X}^2 = \frac{P^2}{2m} \quad (8.66)$$

et calculons son commutateur avec X

$$[K, X] = \frac{1}{2m} [P^2, X] = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial P^2}{\partial P} = -i\hbar \frac{P}{m} \quad (8.67)$$

En effet (8.41) implique, en échangeant les rôles de P et de X

$$[X, f(P)] = i\hbar \frac{\partial f(P)}{\partial P}$$

Mais

$$\frac{1}{m} P = \dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X]$$

et en retranchant cette équation de (8.67) on obtient

$$[H - K, X] = 0$$

L'opérateur $(H - K)$ est une fonction de X uniquement, que nous désignerons par $V(X)$, ce qui donne pour la forme la plus générale du hamiltonien compatible avec l'invariance galiléenne

$$H = K + V(X) = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (8.68)$$

On justifie ainsi ce que l'on aurait obtenu par le principe de correspondance à partir de l'analogie classique de l'énergie, somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

L'invariance galiléenne est assurée par le fait que le hamiltonien garde la même *forme* après transformation. Si le hamiltonien initial est une fonction de X et P , le hamiltonien transformé est *la même* fonction de $X_v = X$ et $P_v = P + mv$.

- État initial :

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

- État transformé :

$$H_v = \frac{P_v^2}{2m} + V(X_v) = H + Pv + \frac{1}{2}mv^2 + V(X) \quad (8.69)$$

8.4.2 Hamiltonien en dimension $d = 3$

En répétant l'argument de la sous-section précédente dans le cas de trois dimensions d'espace, on arrive sans difficulté à la généralisation de (8.64)

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = \frac{1}{m}\vec{P} - \frac{1}{m}\vec{f}(\vec{R}) \quad (8.70)$$

mais on ne peut pas en général éliminer $f(\vec{R})$. En effet il faudrait trouver une transformation unitaire

$$S = \exp\left(\frac{i}{\hbar}F(\vec{R})\right)$$

telle que

$$\vec{f}(\vec{R}) = \vec{\nabla}F(\vec{R})$$

ce qui n'est possible que si $\vec{\nabla} \times \vec{f} = 0$ ¹⁷. L'équation (8.70) implique la relation de commutation

$$[\dot{X}_i, X_j] = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{ij} \quad (8.71)$$

L'énergie cinétique K est définie par

$$K = \frac{1}{2}m\left(\frac{d\vec{R}}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2m}(\vec{P} - \vec{f}(\vec{R}))^2 \quad (8.72)$$

On calcule aisément le commutateur de K et de X_i . En effet

$$[K, X_i] = \frac{1}{2}m \sum_j [\dot{X}_j^2, X_i] = \frac{1}{2}m \sum_j (\dot{X}_j [\dot{X}_j, X_i] + [\dot{X}_j, X_i] \dot{X}_j) = -i\hbar \dot{X}_i$$

17. Cette condition est nécessaire mais non suffisante dans un domaine qui n'est pas simplement connexe.

En comparant les commutateurs

$$[K, X_i] = -i\hbar \dot{X}_i \quad \text{et} \quad [H, X_i] = -i\hbar \dot{X}_i$$

on déduit

$$[H - K, X_i] = 0$$

$(H - K)$ est donc une fonction de \vec{R} uniquement : $H = K + V(\vec{R})$. Le hamiltonien le plus général compatible avec l'invariance galiléenne est donc de la forme

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \vec{f}(\vec{R}) \right)^2 + V(\vec{R}) \quad (8.73)$$

Il est important de souligner la différence entre \vec{P}/m et $d\vec{R}/dt$: c'est cette dernière quantité qui donne l'énergie cinétique K

$$K = \frac{1}{2m} \left(\frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \neq \frac{\vec{P}^2}{2m}$$

On peut maintenant faire le lien avec la physique classique. En mécanique classique, le hamiltonien d'une particule de charge q dans un champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t)$ et dans un champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t) = -\partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) - \vec{\nabla} V(\vec{r}, t)$ (qui peuvent dépendre du temps) est¹⁸

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + qV(\vec{r}, t) \quad (8.74)$$

On obtient donc (8.73) en utilisant le principe de correspondance et en identifiant $q\vec{A} = \vec{f}$ et $qV = V$. La signification de ce hamiltonien sera examinée de façon plus approfondie au § 11.5.1, quand nous discuterons l'invariance de jauge locale ; la transformation (8.65) et sa généralisation à trois dimensions sont des transformations de jauge locales. Si $\vec{f}(\vec{R})$ peut être éliminé par une telle transformation, cela implique que $\vec{B} = 0$. Cependant, il ne faudrait pas en conclure que \vec{f} et \vec{V} doivent nécessairement être identifiés à des potentiels vecteur et scalaire, car \vec{f} et \vec{V} sont des fonctions arbitraires, qui n'ont aucune raison d'obéir aux équations de Maxwell, et la particule n'est pas obligatoirement chargée. Tout ce que nous avons montré est que le hamiltonien classique (8.74) peut être quantifié de façon compatible avec l'invariance de Galilée.

Pour conclure ce chapitre, montrons comment on peut trouver le facteur gyromagnétique pour une particule de spin 1/2 galiléenne (Lévy-Leblond [1967]). Dans l'exercice 9.6.14, on construit explicitement la fonction d'onde transformée dans une transformation de Galilée pour une particule de spin zéro. Le hamiltonien suivant d'une particule libre de spin 1/2

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{P})^2 = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 \quad (8.75)$$

18. cf. Jackson[2001], chapitre 12 et exercice 8.5.8.

agissant dans l'espace de Hilbert produit tensoriel $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{H}_2$, où \mathcal{H}_2 est l'espace des états de spin, possède manifestement les mêmes propriétés de covariance par transformation de Galilée que celui d'une particule de spin zéro. Le couplage à un champ magnétique $\vec{P} \rightarrow \vec{P} - q\vec{A}$ donne, en utilisant (3.50) et en observant que \vec{P} et \vec{A} ne commutent pas,

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A}) \right]^2 = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 - \frac{q\hbar}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \quad (8.76)$$

avec $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Le deuxième terme de (8.76) correspond au couplage d'un moment magnétique $\vec{\mu}$ au champ \vec{B} , avec

$$\vec{\mu} = \frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} = \frac{q}{m} \vec{S} = \gamma \frac{q}{2m} \vec{S} \quad (8.77)$$

où $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ est le spin et γ le facteur gyromagnétique, qui est bien égal à 2. Les corrections de théorie quantique des champs invariante de Lorentz, et non de Galilée, font que ce facteur est en pratique différent de 2, mais il est très voisin de 2 pour un électron.

Résumons le résultat essentiel obtenu dans ce chapitre. En supposant que les valeurs moyennes des propriétés physiques se transforment comme les quantités classiques associées dans une symétrie, nous avons pu déduire les relations de commutation canoniques et la forme du hamiltonien. Nous n'avons jamais fait appel au principe de correspondance, mais vérifié la compatibilité de ce principe avec nos résultats.

8.5 Exercices

8.5.1 Rotations

1. Soit $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ la matrice 3×3 représentant une rotation d'angle θ autour de \hat{n} . Montrer que $\text{Tr } \mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta) = 1 + 2 \cos \theta$. Suggestion : utiliser (8.29).

2. Écrire explicitement la matrice $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ à partir de (8.23) en fonction des composantes de \hat{n}

$$\hat{n} = (\alpha, \beta, \gamma) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$$

3. Vérifier explicitement la relation de commutation $[T_x, T_y] = iT_z$ en utilisant les formes matricielles (8.26).

4. Vérifier que

$$(\vec{T} \cdot \hat{n})^3 = \vec{T} \cdot \hat{n}$$

et en déduire

$$e^{-i\theta(\vec{T} \cdot \hat{n})} = I - i \sin \theta (\vec{T} \cdot \hat{n}) - (1 - \cos \theta) (\vec{T} \cdot \hat{n})^2$$

Comparer avec (8.23).

8.5.2 Rotations et $SU(2)$

Le groupe $SU(2)$ est le groupe des matrices 2×2 unitaires et de déterminant un.

1. Montrer que si $U \in SU(2)$, alors U est de la forme

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

2. Montrer qu'au voisinage de l'identité on peut écrire

$$U = I - i\tau \quad \text{avec} \quad \tau = \tau^\dagger$$

et que τ s'exprime en fonction des matrices de Pauli

$$\tau = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \theta_i \sigma_i \quad \theta_i \rightarrow 0$$

3. On pose $\theta = (\sum_i \theta_i^2)^{1/2}$ et $\theta_i = \theta \hat{n}_i$, où \hat{n} est un vecteur unitaire. Supposant maintenant les θ_i finis, on définit $U_{\hat{n}}(\theta)$ par

$$U_{\hat{n}}(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[U_{\hat{n}} \left(\frac{\theta}{N} \right) \right]^N$$

Montrer que

$$U_{\hat{n}}(\theta) = e^{-i\theta \vec{\sigma} \cdot \hat{n} / 2}$$

Inversement toute matrice de $SU(2)$ est de cette forme (exercice 3.3.6).

4. Soit \vec{V} un vecteur de \mathbb{R}^3 et \mathcal{V} la matrice hermitienne de trace nulle

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} V_z & V_x - iV_y \\ V_x + iV_y & -V_z \end{pmatrix} = \vec{\sigma} \cdot \vec{V}$$

Quel est le déterminant de \mathcal{V} ? Soit \mathcal{W} la matrice

$$\mathcal{W} = U\mathcal{V}U^{-1}$$

Montrer que \mathcal{W} est de la forme $\vec{\sigma} \cdot \vec{W}$ et que \vec{W} se déduit de \vec{V} par une rotation. A-t-on entièrement prouvé cette propriété à ce stade?

5. On définit $\vec{V}(\theta)$ par

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta) = U_{\hat{n}}(\theta) [\vec{\sigma} \cdot \vec{V}] U_{\hat{n}}^{-1}(\theta) \quad \vec{V}(\theta = 0) = \vec{V}$$

Montrer que

$$\frac{d\vec{V}(\theta)}{d\theta} = \hat{n} \times \vec{V}(\theta)$$

En déduire que $\vec{V}(\theta)$ s'obtient à partir de \vec{V} par une rotation d'angle θ autour de \hat{n} . Ce résultat établit une correspondance entre les matrices $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ de $SO(3)$ et les matrices $U_{\hat{n}}(\theta)$ de $SU(2)$. Cette correspondance est-elle biunivoque?

8.5.3 Relations de commutation entre l'impulsion et le moment angulaire

Cet exercice donne une autre démonstration des relations de commutation (8.34) entre l'impulsion et le moment angulaire, si l'on choisit l'opérateur vectoriel $\vec{V} = \vec{P}$. Soit $\mathcal{T}_y(a)$ une translation de a parallèle à Oy

$$\mathcal{T}_y(a)\vec{r} = \vec{r} + a\hat{y}$$

Si $\mathcal{R}_x(\theta)$ est une rotation d'angle θ autour de Ox , montrer que

$$\mathcal{R}_x(\theta)\mathcal{T}_y(a)\mathcal{R}_x(-\theta)$$

est une translation le long d'un axe que l'on déterminera. En déduire la relation de commutation

$$[J_x, P_y] = i\hbar P_z$$

8.5.4 Algèbre de Lie d'un groupe continu

On considère un groupe \mathcal{G} dont les éléments g sont paramétrés par N coordonnées θ_a , $a = 1, \dots, N$, $g(\theta_a = 0)$ étant l'élément neutre du groupe. Les variables θ_a sont notées collectivement $\theta : \theta = \{\theta_a\}$. La loi de composition est donnée par une fonction f indéfiniment différentiable

$$g(\bar{\theta})g(\theta) = g(f(\bar{\theta}, \theta))$$

À nouveau f est une notation collective pour l'ensemble de N fonctions $f : f(\bar{\theta}, \theta) = \{f_a(\bar{\theta}_b, \theta_c)\}$. Soit un ensemble de matrices unitaires $U(\theta_a)$ dont la loi de multiplication est

$$U(\bar{\theta})U(\theta) = U(f(\bar{\theta}, \theta))$$

Les matrices $U(\theta)$ forment donc une représentation du groupe \mathcal{G} : voir (8.12).

1. Montrer que $f_a(\bar{\theta}, \theta = 0) = \bar{\theta}_a$ et que $f_a(\bar{\theta} = 0, \theta) = \theta_a$. Montrer que pour $\bar{\theta}, \theta \rightarrow 0$ $f_a(\bar{\theta}, \theta)$ est de la forme

$$f_a(\bar{\theta}, \theta) = \theta_a + \bar{\theta}_a + f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c + O(\theta^3, \theta^2\bar{\theta}, \theta\bar{\theta}^2, \bar{\theta}^3)$$

où nous avons utilisé la convention de sommation sur les indices répétés

$$f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c = \sum_{b,c} f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c$$

2. Dans le voisinage de $U(\theta) = I$ on écrit un développement de $U(\theta)$ pour $\theta \rightarrow 0$

$$U(\theta) = I - i\theta_a T_a - \frac{1}{2}\theta_b\theta_c T_{bc} + O(\theta)^3$$

Effectuer le produit $U(\bar{\theta})U(\theta)$ à l'ordre $(\bar{\theta}^2, \theta^2)$ et montrer que l'égalité

$$U(\bar{\theta})U(\theta) = U(f(\bar{\theta}, \theta))$$

pour les termes en $\bar{\theta}_a\theta_b$ implique que

$$T_{bc} = T_c T_b - i f_{abc} T_a$$

Utilisant la symétrie de T_{bc} , en déduire

$$[T_b, T_c] = i C_{abc} T_a$$

avec $C_{abc} = -C_{acb}$. Exprimer C_{abc} en fonction de f_{abc} . Les relations de commutation précédentes constituent l'algèbre de Lie du groupe défini par la loi de composition $f(\bar{\theta}, \theta)$.

8.5.5 Règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn

Soit une particule de masse m dans un potentiel $V(\vec{r})$. Le hamiltonien est

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Soit $|\varphi_n\rangle$ un ensemble complet de vecteurs propres de H

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$$

et $|\varphi_0\rangle$ un état lié, donc normalisable, d'énergie E_0 . On pose

$$\langle\varphi_n|X|\varphi_0\rangle = X_{n0}$$

1. Démontrer la relation de commutation

$$[[H, X], X] = -\frac{\hbar^2}{m}$$

2. En déduire

$$\sum_n \frac{2m|X_{n0}|^2}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1$$

8.5.6 Centre de masse et masse réduite

Soit deux particules de masses m_1 et m_2 se déplaçant sur une droite. On note X_1 et X_2 leurs opérateurs position, P_1 et P_2 leurs opérateurs impulsion. Les opérateurs impulsion et position de deux particules différentes commutent. On définit les opérateurs X et P

$$X = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2} \quad P = P_1 + P_2$$

et \tilde{X} et \tilde{P}

$$\tilde{X} = X_1 - X_2 \quad \tilde{P} = \frac{m_2 P_1 - m_1 P_2}{m_1 + m_2}$$

1. Calculer les commutateurs $[X, P]$ et $[\tilde{X}, \tilde{P}]$ et montrer que

$$[X, \tilde{P}] = [\tilde{X}, P] = 0$$

2. Écrire le hamiltonien

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(X_1 - X_2)$$

en fonction des opérateurs $X, P, \tilde{X}, \tilde{P}$. En conclure que, comme en mécanique classique, on peut séparer le mouvement du centre de masse et de la particule relative de masse $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Généraliser à trois dimensions.

3. L'exemple suivant d'état intriqué a été utilisé dans l'article original d'Einstein *et al.* [1935] (§ 6.3.1). La fonction d'onde de deux particules est écrite

$$\psi(x_1, x_2; p_1, p_2) = \delta(x_1 - x_2 - L) \delta(p_1 + p_2)$$

où L est une longueur constante. Pourquoi est-il possible d'écrire une telle fonction d'onde ? Quelle est son interprétation physique ? La mesure de x_1 détermine x_2 , celle de p_1 détermine p_2 . Développer l'analogie avec l'exemple du § 6.3.1.

8.5.7 Transformation de Galilée

1. Soit $W(a, v)$ le produit d'une transformation de Galilée et d'une translation à une dimension

$$W(a, v) = \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) \exp\left(i\frac{mvX}{\hbar}\right)$$

Montrer que

$$W(a_1, v_1)W(a_2, v_2) = \exp\left(-i\frac{mv_1a_2}{\hbar}\right)W(a_1 + a_2, v_1 + v_2)$$

2. Calculer

$$W(a, v)W(-a, -v)$$

et en déduire que l'on doit utiliser des représentations projectives pour le groupe de Galilée.

8.5.8 Hamiltonien dans un champ magnétique

1. On se donne un champ électromagnétique (\vec{E}, \vec{B}) dérivant du potentiel (\vec{V}, \vec{A})

$$E_i = -\partial_i\vec{V} - \partial_t A_i \quad B_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \partial_j B_k = (\vec{\nabla} \times \vec{A})_i$$

On se propose de montrer que les équations du mouvement provenant du lagrangien suivant d'une particule chargée de charge q

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - q\vec{V}(\vec{r}, t) + q\vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \frac{d\vec{r}}{dt}$$

sont identiques à celles données par la loi de Lorentz. Calculer $\partial\mathcal{L}/\partial x_i$, $\partial\mathcal{L}/\partial \dot{x}_i$ et montrer que

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = m\ddot{x}_i + q \sum_j (\partial_j A_i) \dot{x}_j$$

Montrer que les équations d'Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_i} = 0$$

conduisent à la loi de Lorentz non relativiste ($\vec{v} = d\vec{r}/dt$)

$$m\ddot{x}_i = q[E_i + (\vec{v} \times \vec{B})_i]$$

2. Partant du moment conjugué p_k de x_k

$$p_k = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \dot{x}_k} = m\dot{x}_k + qA_k$$

montrer le hamiltonien classique $H_{cl} = \sum_k p_k \dot{x}_k - L$ s'écrit

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\vec{V}$$

3. Retrouver la loi de Lorentz à partir des équations de Hamilton

$$\dot{x}_k = \frac{\partial H_{cl}}{\partial p_k} \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H_{cl}}{\partial x_k}$$

8.6 Bibliographie

On trouvera des compléments utiles sur les symétries en physique quantique dans Jauch [1968], chapitres 9 et 10 et dans Merzbacher [1970], chapitre 16. Le chapitre 2 de Weinberg [1995] contient également un excellent résumé de toutes les notions de base. Les relations de commutation canoniques et l'invariance galiléenne sont exposées dans Jauch [1968], chapitres 12 et 13. Il existe de nombreux livres consacrés à l'utilisation de la théorie des groupes en mécanique quantique, parmi lesquels on peut citer Tinkham [1964].

Chapitre 9

Mécanique ondulatoire

DANS CE CHAPITRE, nous allons étudier une réalisation particulière de la mécanique quantique d'une grande importance pratique : il s'agit de la *mécanique ondulatoire*, qui est adaptée à la description du mouvement d'une¹ particule quantique dans l'espace à trois dimensions \mathbb{R}^3 . C'est cette réalisation qui sert d'introduction aux fondements de la mécanique quantique dans la plupart des manuels. Elle consiste à prendre comme base de \mathcal{H} les « vecteurs propres² » $|\vec{r}\rangle$ de l'opérateur position \vec{R} : en d'autres termes, on choisit une base où l'opérateur position est diagonal. En mécanique ondulatoire, un vecteur d'état peut être identifié à un élément $\varphi(\vec{r})$ de l'espace de Hilbert $L^2_{\vec{r}}(\mathbb{R}^3)$ des fonctions de carré sommable sur l'espace à trois dimensions \mathbb{R}^3 . Ce vecteur d'état est appelé *fonction d'onde*, et nous verrons que cette fonction d'onde s'identifie à l'amplitude de probabilité $\langle \vec{r} | \varphi \rangle$ de trouver la particule dans l'état $|\varphi\rangle$ localisée à la position \vec{r} . Cette fonction d'onde est normalisée par la condition de sommabilité (7.10)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (9.1)$$

Étant donné le rôle symétrique joué par les opérateurs position et impulsion, on pourrait aussi bien utiliser les vecteurs propres de \vec{P} et les « fonctions d'onde de l'espace des impulsions » $\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \varphi \rangle$, dont nous verrons que ce sont les transformées de Fourier des $\varphi(\vec{r})$. Après avoir examiné les principales propriétés des fonctions d'onde, nous étudierons plusieurs applications : états liés, diffusion, potentiel périodique. Ces applications seront d'abord traitées dans le cas plus simple à une dimension. La généralisation à trois dimensions nous permettra de discuter la notion importante de densité d'états et son utilisation dans la « règle d'or de Fermi ».

1. Ou de plusieurs particules : voir la généralisation au chapitre 14.

2. Ainsi que nous l'avons vu au § 7.3.1, ces objets ne sont pas des vecteurs de l'espace de Hilbert, ce que nous avons souligné par des guillemets. Cependant, comme nous allons faire par la suite un usage intensif de ces « vecteurs », nous supprimerons ces guillemets afin d'alléger l'écriture.

9.1 Diagonalisation de X et de P ; fonctions d'onde

9.1.1 Diagonalisation de X

Nous nous proposons d'étudier le mouvement d'une particule quantique en nous restreignant pour le moment au mouvement sur la droite réelle \mathbb{R} : la particule se déplace sur cette droite entre $-\infty$ et $+\infty$. Les grandeurs physiques pertinentes sont *a priori* la position et l'impulsion de cette particule, représentées mathématiquement par des opérateurs X et P dont nous avons établi les propriétés dans la section 8.3. Nous allons d'abord examiner les vecteurs propres de X en partant de la relation de commutation canonique entre X et P sous la forme (8.40)

$$\exp\left(i\frac{Pa}{\hbar}\right) X \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) = X + aI \quad (9.2)$$

Montrons d'abord que le spectre de X est continu : soit $|x\rangle$ un vecteur propre de X

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad (9.3)$$

et examinons l'action de X sur le vecteur $\exp(-iPa/\hbar)|x\rangle$

$$\begin{aligned} X\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle\right] &= \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)(X + aI)|x\rangle \\ &= (x + a)\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle\right] \end{aligned} \quad (9.4)$$

Nous avons utilisé la relation de commutation (9.2) et la définition (9.3) du vecteur propre $|x\rangle$. Le vecteur $\exp(-iPa/\hbar)|x\rangle$ est vecteur propre de X avec la valeur propre $(x + a)$, et comme a est arbitraire, cela montre que toutes les valeurs réelles de x entre $-\infty$ et $+\infty$ sont valeurs propres de X . On prouve ainsi que le spectre de x est continu, et que par conséquent la normalisation doit s'écrire suivant (7.34) avec des fonctions delta de Dirac

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x') \quad (9.5)$$

Compte tenu de la discussion du § 8.3.1, le résultat (9.4) qui peut s'écrire

$$\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle = |x + a\rangle$$

ne doit pas surprendre, car $\exp(-iPa/\hbar)$ est l'opérateur de translation de a qui transforme l'état localisé en x , $|x\rangle$, en l'état $|x + a\rangle$ localisé en $(x + a)$. Le vecteur $|x + a\rangle$ vérifie une condition de normalisation analogue à (9.5) étant donné que l'opérateur $\exp(-iPa/\hbar)$ est unitaire. On peut, si on le souhaite, fixer la phase des vecteurs de base $|x\rangle$ par la condition

$$|x\rangle = \exp\left(-i\frac{Px}{\hbar}\right)|x = 0\rangle \quad (9.6)$$

Revenons sur l'interprétation physique : que représente exactement le vecteur $|x\rangle$? D'après les postulats du chapitre 4, $|x\rangle$ représente un état où la position de la particule est connue avec une précision absolue : la particule est localisée *exactement* au point x sur la droite réelle. Mais en mécanique quantique un tel état est impossible à réaliser physiquement : comme nous allons bientôt le voir, un tel état a toutes les impulsions possibles avec la même probabilité entre $p = -\infty$ et $p = +\infty$. À la propriété mathématique : « $|x\rangle$ n'est pas un élément de l'espace de Hilbert » correspond la propriété physique : « $|x\rangle$ n'est pas un état physiquement réalisable ». Les états physiquement réalisables sont toujours représentés par des « vrais » vecteurs de \mathcal{H} , c'est-à-dire des vecteurs normalisables.

Nous avons admis implicitement que les valeurs propres x de X étaient non dégénérées. Bien sûr ce n'est pas nécessairement le cas : par exemple la particule pourrait avoir un spin $1/2$, auquel cas il faudrait préciser si la particule se trouve dans un état de spin up $|+\rangle$ ou de spin down $|-\rangle$: chaque valeur propre de X serait alors doublement dégénérée. Dans ces conditions, l'espace de Hilbert des états serait le produit tensoriel $L_x^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{H}_2$ de l'espace des états de position $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ et de l'espace à deux dimensions des états de spin \mathcal{H}_2 : une base de cet espace serait par exemple formée des états $|x \otimes +\rangle$ et $|x \otimes -\rangle$ avec

$$(X \otimes \sigma_z)|x \otimes \pm\rangle = \pm x|x \otimes \pm\rangle$$

Bien que l'utilisation de vecteurs propres qui ne soient pas des véritables éléments de \mathcal{H} soit mathématiquement contestable, elle est extrêmement commode et nous nous servons par la suite de ces vecteurs sans précautions particulières. Nous généraliserons aussi la notion d'élément de matrice : comme l'opérateur X est diagonal dans la base $|x\rangle$, nous pourrions écrire les « éléments de matrice » de X

$$\langle x'|X|x\rangle = x\langle x'|x\rangle = x\delta(x-x') \quad (9.7)$$

et plus généralement ceux d'une fonction $F(X)$

$$\langle x'|F(X)|x\rangle = F(x)\langle x'|x\rangle = F(x)\delta(x-x') \quad (9.8)$$

La relation de fermeture (7.36) s'écrit

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x| = I \quad (9.9)$$

Le projecteur $\mathcal{P}[a, b]$ sur le sous-espace des valeurs propres de X dans l'intervalle $[a, b]$ s'obtient en restreignant l'intégration sur x à cet intervalle

$$\mathcal{P}[a, b] = \int_a^b |x\rangle dx \langle x| \quad (9.10)$$

Cette expression généralise celle que l'on écrirait dans un espace de dimension finie : si Δ est le sous-espace d'un ensemble de valeurs propres d'un opérateur hermitien A , le projecteur $\mathcal{P}(\Delta)$ sur ce sous-espace est

$$\mathcal{P}(\Delta) = \sum_{n \in \Delta} |n\rangle\langle n|$$

9.1.2 Réalisation dans $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$

Nous allons maintenant faire le lien entre le formalisme de Dirac que nous venons d'expliquer dans la base où X est diagonal et la réalisation donnée au § 8.3.2 des opérateurs X et P comme opérateurs agissant dans l'espace $L^{(2)}(\mathbb{R})$ des fonctions de carré sommable sur \mathbb{R} . Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur unitaire de \mathcal{H} représentant un état physique. En utilisant la relation de fermeture (9.9), nous pouvons décomposer $|\varphi\rangle$ dans la base $|x\rangle$

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x|\varphi\rangle \quad (9.11)$$

où $\langle x|\varphi\rangle$ est donc une composante de $|\varphi\rangle$ dans la base $|x\rangle$, ou en termes physiques, l'amplitude de probabilité de trouver la particule localisée au point x . Examinons les éléments de matrice des opérateurs X et $\exp(-iPa/\hbar)$

$$\langle x|[X|\varphi\rangle] = \langle Xx|\varphi\rangle = x \langle x|\varphi\rangle = x \varphi(x) \quad (9.12)$$

$$\langle x|\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|\varphi\rangle\right] = \langle x-a|\varphi\rangle = \varphi(x-a) \quad (9.13)$$

Ces équations montrent que $\langle x|\varphi\rangle$ peut être identifié à une fonction $\varphi(x)$ de $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ telle que l'action des opérateurs X et P soit donnée par (8.44). En effet l'équation (9.12) est

$$\boxed{[X\varphi](x) = x\varphi(x)} \quad (9.14)$$

tandis que (9.13) s'écrit

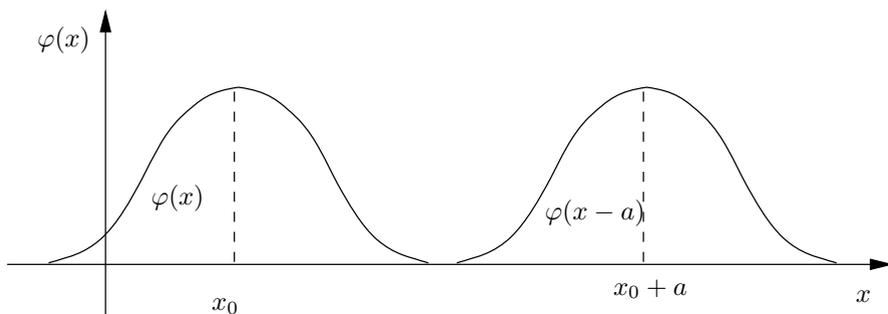
$$\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)\varphi\right](x) = \varphi(x-a) \quad (9.15)$$

et en développant au premier ordre en a

$$\boxed{[P\varphi](x) = -i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial x}} \quad (9.16)$$

Nous retrouvons l'action des opérateurs X et P telle qu'elle avait été définie au § 8.3.2. Vérifions que le produit scalaire est correctement donné par (7.11) en utilisant la relation de fermeture (9.9)

$$\langle \chi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \chi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi^*(x)\varphi(x) \quad (9.17)$$

FIG. 9.1 – Translation de a d'une particule localisée en x_0 .

La fonction $\varphi(x - a)$ dans (9.15) est bien la fonction $\varphi(x)$ translatée de $+a$, et non de $-a$! Si par exemple $\varphi(x)$ a un maximum à $x = x_0$, $\varphi(x - a)$ a un maximum à $x - a = x_0$ c'est-à-dire à $x = x_0 + a$ (figure 9.1). Soulignons que le choix $\varphi_a(x) = \varphi(x - a)$ pour la fonction d'onde translatée n'est bien sûr pas unique. La fonction

$$\varphi'_a(x) = e^{i\theta(x)}\varphi(x - a)$$

se déduit de $\varphi(x - a)$ par une transformation de jauge locale (8.65). Le choix $\varphi(x - a)$ est lié à celui du générateur infinitésimal des translations, et le changement de phase $\varphi_a(x) \rightarrow \varphi'_a(x)$ serait obtenu en utilisant un générateur infinitésimal déduit de (9.16) par la transformation de jauge locale

$$P' = e^{i\theta(x)} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-i\theta(x)}$$

En résumé, l'état physique d'une particule se déplaçant sur l'axe des x est décrit par une fonction d'onde normalisée $\varphi(x)$ appartenant à $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1 \quad (9.18)$$

qui s'interprète physiquement comme l'amplitude de probabilité $\langle x|\varphi\rangle$ de trouver la particule localisée au point x . L'action des opérateurs position X et impulsion P sur $\varphi(x)$ est donnée par (9.14) et (9.16). Le module carré

$$|\varphi(x)|^2 = |\langle x|\varphi\rangle|^2$$

est appelé *probabilité de présence* de la particule au point x : en fait il s'agit d'une *densité de probabilité*, dans ce cas une probabilité par unité de longueur. La probabilité $\mathfrak{p}([a, b])$ de trouver la particule localisée dans l'intervalle $[a, b]$ est d'après (9.10)

$$\mathfrak{p}([a, b]) = \langle \varphi | \mathcal{P}[a, b] | \varphi \rangle = \int_a^b dx |\varphi(x)|^2 \quad (9.19)$$

Cette probabilité est normalisée à un par construction, puisque $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$, ce que l'on vérifie également sur (9.18). Si l'on considère un intervalle $[x, x + dx]$ infinitésimal, $|\varphi(x)|^2 dx$ est la probabilité de trouver la particule dans cet intervalle.

Lorsque la particule possède des degrés de liberté supplémentaires, par exemple un spin $1/2$, on pourra décrire son état quantique en utilisant les fonctions d'onde $\varphi_{\pm}(x)$

$$\varphi_+(x) = \langle x \otimes + | \varphi \rangle \quad \varphi_-(x) = \langle x \otimes - | \varphi \rangle$$

Nous venons de définir ce que l'on appelle habituellement « la mécanique ondulatoire en représentation x » : nous avons choisi de partir de la base $|x\rangle$ où l'opérateur position est diagonal. Étant donné le rôle symétrique de X et P , nous aurions aussi bien pu partir d'une base où P est diagonal, c'est-à-dire définir « la mécanique ondulatoire en représentation p ». La sous-section suivante est consacrée à cette représentation et à son lien avec la représentation x .

9.1.3 Réalisation dans $L_p^{(2)}(\mathbb{R})$

Soit $|p\rangle$ un vecteur propre de P

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad (9.20)$$

Nous allons d'abord déterminer les fonctions d'onde correspondantes $\chi_p(x) = \langle x | p \rangle$. Nous pouvons écrire en représentation x

$$\langle x | [P|p\rangle] = p \langle x | p \rangle = p \chi_p(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_p(x) \quad (9.21)$$

Nous avons utilisé (9.16) pour obtenir la dernière égalité de l'équation précédente. Quel que soit p dans l'intervalle $[-\infty, +\infty]$, l'équation différentielle

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_p(x) = p \chi_p(x)$$

a pour solution

$$\chi_p(x) = \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (9.22)$$

ce qui montre que le spectre de P est continu, tout comme celui de x . Le facteur de normalisation $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ dans (9.22) a été choisi de telle sorte que $\chi_p(x)$ soit normalisé par un delta de Dirac

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_{p'}^*(x) \chi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[i \frac{(p-p')x}{\hbar} \right] = \delta(p-p') \quad (9.23)$$

tandis que la relation de fermeture s'écrit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \chi_p(x) \chi_p^*(x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left[i \frac{p(x-x')}{\hbar} \right] = \delta(x-x') \quad (9.24)$$

On aurait également pu partir de la relation de fermeture sous la forme

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle dp \langle p| = I \quad (9.25)$$

pour écrire

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x'|p\rangle dp \langle p|x\rangle = \langle x'|I|x\rangle = \delta(x-x')$$

et démontrer ainsi (9.24).

Si $|\varphi\rangle$ est le vecteur d'état d'une particule, la « fonction d'onde en représentation p » sera $\tilde{\varphi}(p) = \langle p|\varphi\rangle$. Cette fonction d'onde en représentation p n'est autre que la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$ de la représentation x . En effet, en utilisant la relation de fermeture (9.9) et la définition (9.22), nous obtenons

$$\tilde{\varphi}(p) = \langle p|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle dx \langle x|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \varphi(x) \quad (9.26)$$

et inversement

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx/\hbar} \tilde{\varphi}(p) \quad (9.27)$$

L'action des opérateurs X et P en représentation p s'obtient sans difficulté

$$[X\tilde{\varphi}](p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\varphi}(p) \quad (9.28)$$

$$[P\tilde{\varphi}](p) = p \tilde{\varphi}(p) \quad (9.29)$$

Une formule analogue à (9.19) est valable dans l'espace des impulsions : la probabilité $\mathfrak{p}([k, q])$ pour que la particule ait son impulsion dans l'intervalle $[k, q]$ est

$$\mathfrak{p}([k, q]) = \int_k^q dp |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.30)$$

$|\tilde{\varphi}(p)|^2$ est une densité de probabilité dans l'espace des impulsions.

9.1.4 Inégalités de Heisenberg

Partons de la représentation de Fourier (9.27) de la fonction d'onde $\varphi(x)$ d'un état physique. La transformée de Fourier $\tilde{\varphi}(p)$ vérifie, tout comme $\varphi(x)$, la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |\tilde{\varphi}(p)|^2 = 1 \quad (9.31)$$

On appelle souvent un tel état physique un *paquet d'ondes*, car c'est d'après (9.27) une superposition d'ondes planes. La position moyenne $\langle X \rangle$ et l'impulsion moyenne $\langle P \rangle$ se calculent en introduisant deux fois les relations de fermeture (9.9) et (9.25)³

$$\langle X \rangle = \langle \varphi | X | \varphi \rangle = \int dx dx' \langle \varphi | x \rangle \langle x | X | x' \rangle \langle x' | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\varphi(x)|^2 \quad (9.32)$$

$$\langle P \rangle = \langle \varphi | P | \varphi \rangle = \int dp dp' \langle \varphi | p \rangle \langle p | P | p' \rangle \langle p' | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.33)$$

Nous avons aussi utilisé (9.7) et une équation analogue dans l'espace des impulsions. Les dispersions ΔX et ΔP sont données par un calcul similaire

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi | (X - \langle X \rangle)^2 | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle X \rangle)^2 |\varphi(x)|^2 \quad (9.34)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi | (P - \langle P \rangle)^2 | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp (p - \langle P \rangle)^2 |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.35)$$

D'après la démonstration générale du § 4.1.3, ces dispersions vérifient l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (9.36)$$

où nous avons utilisé la notation usuelle $\Delta x \Delta p$ au lieu de $\Delta X \Delta P$. Une démonstration directe de (9.36) est proposée à l'exercice 9.6.1.

Pour conclure cette sous-section, montrons l'intérêt de l'inégalité de Heisenberg (9.36) utilisée comme outil heuristique en estimant l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène (voir § 1.5.2). Si l'électron décrit une orbite circulaire de rayon r avec une impulsion $p = mv$, son énergie classique est

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (9.37)$$

En physique classique, le rayon de l'orbite de l'électron tend vers zéro (« l'électron tombe sur le noyau »), ce phénomène étant accompagné de l'émission de rayonnement électromagnétique : en effet, en physique classique, l'énergie de l'orbite circulaire $E = -e^2/(2r)$ n'est pas bornée inférieurement et rien ne s'oppose à ce que le rayon de l'orbite devienne arbitrairement petit. La décroissance de l'énergie de l'orbite est compensée par l'émission dans l'espace d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique, ce qui assure la conservation de l'énergie. Mais sur une orbite de rayon r , la dispersion Δx de la position suivant l'axe des x est de l'ordre de r , ce qui fait que la dispersion sur l'impulsion est au moins de $\sim \hbar/\Delta x = \hbar/r$. Nous pouvons en déduire

3. Les notations explicites seraient $\langle X \rangle_\varphi$ et $\langle P \rangle_\varphi$; nous avons supprimé l'indice φ pour alléger l'écriture.

$rp \sim \hbar$ et l'expression de l'énergie (9.37) devient

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

Cherchons le minimum de E

$$\frac{dE}{dr} \sim -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0$$

ce qui donne un minimum pour

$$r = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (9.38)$$

soit précisément le rayon de Bohr (1.41) de l'atome d'hydrogène! Naturellement le fait que l'on obtienne exactement a_0 dans ce calcul d'ordre de grandeur est un hasard heureux, qui nous permet de retrouver l'énergie de l'état fondamental (1.42)

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (9.39)$$

S'il est bien entendu que ce calcul ne peut donner qu'un ordre de grandeur, la physique sous-jacente explique la raison profonde de la stabilité de l'atome : en raison des inégalités de Heisenberg, l'électron ne peut pas se trouver sur une orbite de rayon trop petit, sous peine d'acquérir une impulsion importante, qui fait croître son énergie cinétique. L'énergie de l'état fondamental est obtenue en recherchant le meilleur compromis possible entre énergie cinétique et énergie potentielle, de façon à obtenir le minimum de l'énergie totale.

9.1.5 Évolution du paquet d'ondes libre

Introduisons la dépendance du vecteur d'état par rapport au temps : le vecteur d'état est $|\varphi(0)\rangle \equiv |\varphi\rangle$ au temps $t = 0$ et $|\varphi(t)\rangle$ au temps t . La fonction d'onde $\varphi(x, t)$ au temps t est donc $\varphi(x, t) = \langle x|\varphi(t)\rangle$. Pour obtenir $|\varphi(t)\rangle$ en fonction de $|\varphi(0)\rangle$, nous avons besoin de l'équation d'évolution (4.11) et donc du hamiltonien H . Nous allons nous restreindre pour l'instant au cas où l'énergie potentielle est nulle, et où le hamiltonien se réduit à sa partie énergie cinétique K (8.66)

$$H = K = \frac{P^2}{2m} \quad (9.40)$$

Comme K et P commutent, les états propres de H peuvent être choisis parmi ceux de P

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad H|p\rangle = \frac{P^2}{2m}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle = E(p)|p\rangle \quad (9.41)$$

et par conséquent

$$\exp\left[-i\frac{Ht}{\hbar}\right]|p\rangle = \exp\left[-i\frac{E(p)t}{\hbar}\right]|p\rangle \quad (9.42)$$

Il est donc naturel d'exprimer $\langle x|\varphi(t)\rangle$ en fonction des composantes de $|\varphi(t)\rangle$ dans la base $|p\rangle$

$$\begin{aligned}\langle x|\varphi(t)\rangle &= \langle x|\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)|\varphi(0)\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)|\varphi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(i\frac{px}{\hbar} - i\frac{E(p)t}{\hbar}\right)\tilde{\varphi}(p)\end{aligned}\quad (9.43)$$

Afin d'éliminer les facteurs \hbar on introduit le vecteur d'onde $k = p/\hbar$ et la fréquence $\omega(k)$

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \omega(k) = \frac{E(\hbar k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad A(k) = \sqrt{\hbar}\tilde{\varphi}(\hbar k)$$

pour écrire $\varphi(x, t)$ sous la forme

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left(ikx - i\omega(k)t\right) \quad (9.44)$$

L'allure qualitative de $|A(k)|^2$ et celle de $|\varphi(x, 0)|^2$ sont représentées sur la figure 9.2. La fonction $|A(k)|^2$ est centrée à $k \simeq \bar{k}$ avec une largeur Δk . L'inégalité de Heisenberg (9.36) se traduit par

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (9.45)$$

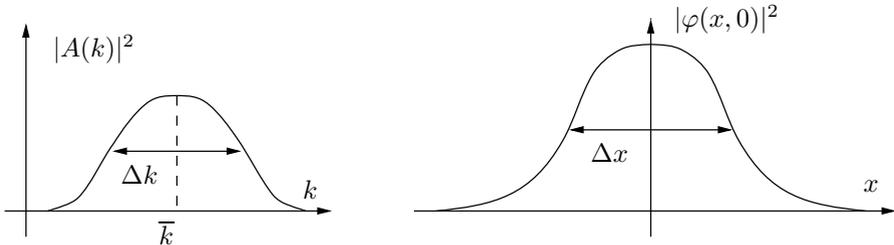


FIG. 9.2 – Dispersions du paquet d'ondes en k et en x .

Les cas limites sont :

- Particule de vecteur d'onde (ou d'impulsion) parfaitement défini = onde plane

$$A(k) = \delta(k - \bar{k}) \quad \varphi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\bar{k}x} \quad (9.46)$$

- Particule localisée en $x = x_0$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \quad \varphi(x, 0) = \delta(x - x_0) \quad (9.47)$$

Rappelons que ni l'onde plane (9.46), ni l'état parfaitement localisé (9.47) ne correspondent à des états physiquement réalisables. Dans le cas (9.47) de la particule localisée, $|A(k)|^2$, qui est la probabilité d'observer une impulsion $\hbar k$, est indépendant de k , ce qui fait que la distribution de probabilité en p ne peut pas être normalisée. De même dans le cas (9.46) de l'impulsion fixée, $|\varphi(x)|^2 = \text{cste}$ et la probabilité de présence est uniforme sur l'axe des x : à nouveau la distribution de probabilité en x ne peut pas être normalisée. Pour un état physiquement réalisable on doit avoir d'après (9.31)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |A(k)|^2 < \infty$$

Examinons maintenant l'évolution du paquet d'ondes au cours du temps. Pour évaluer (9.44), nous utilisons l'approximation de la phase stationnaire. Définissant $A(k) = |A(k)| \exp(i\phi(k))$, la phase $\theta(k)$ de l'exponentielle dans (9.44) vaut

$$\theta(k) = kx - \omega(k)t + \phi(k)$$

Nous obtiendrons la contribution principale à l'intégrale (9.44) si la phase $\theta(k)$ est stationnaire dans la région $k \simeq \bar{k}$ où $|A(k)|$ est maximum : en effet, si $\theta(k)$ n'est pas stationnaire, l'exponentielle oscille rapidement et la contribution moyenne à l'intégrale (9.44) est nulle. Nous devons donc avoir

$$\left. \frac{d\theta}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = x - t \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} + \left. \frac{d\phi}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = 0$$

Le centre du paquet d'ondes va se déplacer selon la loi

$$x = v_g(t - \tau) \tag{9.48}$$

où v_g est la vitesse de groupe, qui n'est autre que la vitesse moyenne \bar{v} de la particule

$$v_g = \bar{v} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = \left. \frac{d}{dk} \frac{\hbar k^2}{2m} \right|_{k=\bar{k}} = \frac{\hbar \bar{k}}{m} = \frac{\bar{p}}{m} \tag{9.49}$$

Le temps τ qui détermine la position initiale $x_0 = -v_g \tau$ du centre du paquet d'ondes est

$$\tau = \frac{1}{v_g} \left. \frac{d\phi}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = \hbar \left. \frac{d\phi}{dE} \right|_{k=\bar{k}} \tag{9.50}$$

Pour obtenir un résultat plus précis, nous pouvons récrire la phase en développant $\omega(k)$ au voisinage de $k = \bar{k}$

$$\begin{aligned} \theta(k) &= kx - \omega(\bar{k})t - (k - \bar{k})v_g t - \frac{1}{2}(k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t + \phi(k) \\ &= \omega(\bar{k})t + k(x - v_g t) - \frac{1}{2}(k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t + \phi(k) \end{aligned}$$

On obtient une forme très simple pour $\varphi(x, t)$ s'il est possible de négliger le terme quadratique en $(k - \bar{k})^2$

$$\begin{aligned}\varphi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[i\omega(\bar{k})t] \int dk A(k) \exp[ik(x - v_g t)] \\ &= \exp[i\omega(\bar{k})t] \varphi(x - v_g t, 0)\end{aligned}\quad (9.51)$$

Cette équation montre que, mis à part le facteur de phase $\exp[i\omega(\bar{k})t]$, la fonction d'onde au temps t se déduit de celle au temps $t = 0$ par la substitution $x \rightarrow x - v_g t$, c'est-à-dire que le paquet d'ondes se propage sans déformation dans la direction des x positifs – si $v_g > 0$ – à la vitesse v_g . Cependant ce résultat est seulement approximatif puisque nous avons négligé le terme quadratique en $(k - \bar{k})^2$. Ce terme donne une contribution à la phase

$$-\frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t$$

qui doit rester $\ll 1$ dans le domaine où $|A(k)|$ est appréciable, si l'on veut se contenter de l'approximation linéaire. La contribution de ce terme pourra être négligée si

$$\frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar t}{m} \ll 1$$

dans une région d'extension Δk autour de \bar{k} ; pour que la déformation du paquet d'ondes soit faible, on doit avoir

$$t \ll \frac{2m}{\hbar(\Delta k)^2} = \frac{2m\hbar}{(\Delta p)^2}\quad (9.52)$$

Si cette condition n'est pas satisfaite, le paquet d'ondes se déforme en s'élargissant, tandis que son centre continue à se déplacer à la vitesse v_g : c'est le phénomène *d'étalement du paquet d'ondes*.

9.2 Équation de Schrödinger

9.2.1 Hamiltonien de l'équation de Schrödinger

Nous avons vu au § 8.4.1 que le hamiltonien indépendant du temps le plus général compatible avec l'invariance galiléenne en dimension $d = 1$ était donné par (8.68)

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)\quad (9.53)$$

où $K = P^2/(2m)$ est l'opérateur énergie cinétique et $V(X)$ l'opérateur énergie potentielle, ou plus brièvement le *potentiel*. Rappelons aussi l'équation d'évolution (4.11)

$$i\hbar \frac{d|\varphi(t)\rangle}{dt} = H|\varphi(t)\rangle\quad (9.54)$$

Multiplions à gauche les deux membres de cette équation par le bra $\langle x|$ en utilisant (9.53) comme hamiltonien

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle x|\varphi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) \\ \langle x|P^2|\varphi(t)\rangle &= (P^2\varphi)(x, t) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \varphi(x, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} \\ \langle x|V(X)|\varphi(t)\rangle &= V(x)\varphi(x, t) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé (9.8) et (9.16). Nous obtenons donc l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x, t)} \quad (9.55)$$

L'équation de Schrödinger est une équation d'onde pour la fonction d'onde $\varphi(x, t)$.

Comme le potentiel $V(X)$ est indépendant du temps, nous savons qu'il existe des solutions stationnaires de (9.54)

$$|\varphi(t)\rangle = \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) |\varphi(0)\rangle \quad H|\varphi(0)\rangle = E|\varphi(0)\rangle \quad (9.56)$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle x|$, l'équation $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ devient l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \varphi(x) = E\varphi(x)} \quad (9.57)$$

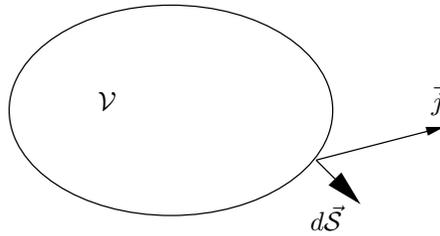
On peut généraliser (9.55) dans deux directions. Tout en restant compatible avec l'invariance galiléenne, il est possible de rajouter une dépendance temporelle au potentiel : $V(x) \rightarrow V(x, t)$. On peut aussi utiliser des potentiels dépendant de la vitesse, par exemple comme approximation d'effets relativistes. Dans ce cas l'invariance galiléenne est perdue, et de plus il peut s'introduire des ambiguïtés lorsque l'on doit faire un choix pour l'ordre d'un produit d'opérateurs position et impulsion.

9.2.2 Probabilité de présence et vecteur courant

À la probabilité de présence $|\varphi(x, t)|^2$ on peut associer un vecteur courant $j(x, t)$, par analogie avec l'hydrodynamique ou l'électrodynamique. Rappelons l'exemple de l'hydrodynamique pour fixer les idées : soit⁴ $\rho(\vec{r}, t)$ la masse volumique d'un fluide compressible de masse totale M s'écoulant avec une vitesse locale $\vec{v}(\vec{r}, t)$; le *courant* $\vec{j}(\vec{r}, t)$ est défini par

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) \quad (9.58)$$

4. Nous nous plaçons provisoirement en dimension $d = 3$.

FIG. 9.3 – Courant et flux sortant d'un volume \mathcal{V} .

Considérons une surface \mathcal{S} limitant un volume \mathcal{V} , qui contient une masse $M(\mathcal{V})$ de fluide (figure 9.3). La masse $dM(\mathcal{V})/dt$ de fluide s'écoulant par unité de temps hors de \mathcal{V} est égale au flux du courant à travers \mathcal{S}

$$\frac{dM(\mathcal{V})}{dt} = \int_{\mathcal{S}} \vec{j} \cdot d\vec{\mathcal{S}} = \int_{\mathcal{V}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}) d^3r$$

où nous avons utilisé le théorème de la divergence. Cette masse de fluide est aussi égale à moins la dérivée par rapport au temps de l'intégrale de la densité sur \mathcal{V}

$$\frac{dM(\mathcal{V})}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} d^3r \rho(\vec{r}, t) = -\int_{\mathcal{V}} d^3r \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Les deux expressions de $dM(\mathcal{V})/dt$ doivent être égales quel que soit le volume \mathcal{V} , ce qui implique que les intégrands doivent être égaux, d'où l'équation de continuité

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad (9.59)$$

et en revenant à la dimension $d = 1$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (9.60)$$

En électrodynamique, ρ est la densité de charge et \vec{j} la densité de courant, qui vérifient aussi une équation de continuité du type (9.59) traduisant la conservation locale de la charge électrique.

En mécanique quantique, on s'attend à trouver une équation de continuité du type (9.59), ou (9.60) à une dimension. En effet, si

$$\int_a^b dx |\varphi(x, t)|^2$$

est la probabilité de trouver la particule au temps t dans l'intervalle $[a, b]$, cette probabilité va en général dépendre du temps. Si par exemple cette probabilité diminue, cela veut dire que la probabilité de trouver la particule dans

l'ensemble des deux intervalles complémentaires $[-\infty, a]$ et $[b, +\infty]$ doit augmenter, car quel que soit t l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x, t)|^2$$

est constante et égale à un. De la même façon, l'intégrale sur tout l'espace de la densité de fluide reste constante et égale à la masse totale M , ou, en électrodynamique, l'intégrale sur tout l'espace de la densité de charge reste constante et égale à la charge totale Q . L'analogue de la densité en mécanique quantique est $\rho(x, t) = |\varphi(x, t)|^2$; cependant il s'agit d'une densité de probabilité, et non d'une véritable densité. Nous recherchons un courant $j(x, t)$ vérifiant (9.60), qui sera aussi un courant de probabilité et non un courant véritable. La forme de ce courant est suggérée par le raisonnement suivant : en hydrodynamique, la vitesse moyenne $\langle v(t) \rangle$ du fluide (ou vitesse du centre de masse) est donnée par

$$\langle v(t) \rangle = \frac{1}{M} \int \rho(x, t) v(x, t) dx = \frac{1}{M} \int j(x, t) dx \quad (9.61)$$

En mécanique quantique, l'opérateur vitesse est d'après (8.61)

$$\hat{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] = \frac{P}{m}$$

et sa valeur moyenne est

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \langle \varphi(t) | \frac{P}{m} | \varphi(t) \rangle = \int dx \varphi^*(x, t) \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x}$$

où nous avons utilisé (9.9) et (9.16). L'intégrand dans cette équation est en général complexe et ne convient pas pour le courant. Une intégration par parties permet de construire un courant réel

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \frac{\hbar}{2im} \int dx \left(\varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} - \varphi(x, t) \frac{\partial \varphi^*(x, t)}{\partial x} \right) \quad (9.62)$$

La comparaison de (9.61) pour $M = 1$ avec (9.62) suggère la forme suivante pour le courant $j(x, t)$

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} - \varphi(x, t) \frac{\partial \varphi^*(x, t)}{\partial x} \right) = \text{Re} \left(\frac{\hbar}{im} \varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} \right) \quad (9.63)$$

Afin de nous familiariser avec cette expression peu intuitive, examinons le cas d'une onde plane

$$\varphi(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

La densité est $\rho(x) = |A|^2$. Le courant vaut

$$j(x) = \text{Re} \left(\frac{\hbar}{im} A^* e^{-ipx/\hbar} \left[\frac{ip}{\hbar} \right] A e^{ipx/\hbar} \right) = |A|^2 \frac{p}{m} \quad (9.64)$$

et s'interprète donc comme : courant = densité \times vitesse. Le courant est dirigé vers la droite si $p > 0$ et vers la gauche si $p < 0$. Lorsque la fonction d'onde est indépendante du temps, comme dans le cas de l'onde plane, le courant est nécessairement indépendant de x puisque $\partial\rho/\partial t = 0 \implies \partial j/\partial x = 0$. Il reste à s'assurer que le courant (9.63) est bien le courant qui vérifie l'équation de continuité (9.60). D'une part

$$\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\hbar}{2im} \left[\varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \varphi \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial x^2} \right] = \frac{i}{\hbar} [\varphi^*(H\varphi) - \varphi(H\varphi)^*]$$

où nous avons utilisé

$$\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} [(H - V)\varphi]$$

et le fait que V est une fonction réelle de x et t . D'autre part

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(x, t)|^2 = \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\varphi^*(H\varphi) - (H\varphi)\varphi^*]$$

ce qui montre que

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(x, t)|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (9.65)$$

9.3 Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

9.3.1 Généralités

Nous nous proposons de chercher les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.57), c'est-à-dire déterminer les valeurs propres E et les fonctions propres correspondantes $\varphi(x)$. Commençons par le cas le plus simple où le potentiel $V(x) = 0$. L'équation (9.57) devient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0 \quad (9.66)$$

La solution générale de cette équation est bien sûr une combinaison d'ondes planes, avec $p = \sqrt{2mE} > 0$

$$\varphi(x) = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar} \quad (9.67)$$

se propageant dans la direction des x positifs avec une amplitude A et des x négatifs avec une amplitude B . Bien que la solution (9.67) soit indépendante

du temps, elle génère un courant stationnaire⁵ composé d'après (9.64) d'un terme $|A|^2 p/m$ dirigé vers les x positifs et d'un terme $-|B|^2 p/m$ dirigé vers les x négatifs. Aux solutions indépendantes du temps $\exp(\pm ipx/\hbar)$ correspondent des solutions de (9.55) dépendant du temps $\exp[i(\pm px - E(p)t)/\hbar]$ qui sont des ondes progressives se propageant dans les directions des x positifs ou des x négatifs. Avec les ondes progressives $\exp[i(+px - E(p)t)/\hbar]$ on forme des paquets d'ondes se propageant dans la direction des x positifs : on dira que ces paquets d'ondes proviennent d'une *source* de particules à $x = -\infty$. Avec les ondes progressives $\exp[i(-px - E(p)t)/\hbar]$ on forme des paquets d'ondes se propageant dans la direction des x négatifs : on dira qu'il y a une source de particules à $x = +\infty$.

Passons au cas où $V(x) \neq 0$ et, pour fixer les idées, supposons que $V(x)$ a la forme de la figure 9.4 : $V(x)$ est un « puits de potentiel » et $V(x) \rightarrow 0$ si $x \rightarrow \pm\infty$. En mécanique classique, suivant la discussion du § 1.5.1, ce potentiel a des états liés si $E < 0$ et des états de diffusion si $E > 0$. Pour $E < 0$ la particule classique reste confinée sur un intervalle fini de l'axe des x , pour $E > 0$ elle part à l'infini. La région de l'axe des x qui est permise à la particule classique est celle où $E > V(x)$, et où son impulsion $p(x)$ est réelle

$$p(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \tag{9.68}$$

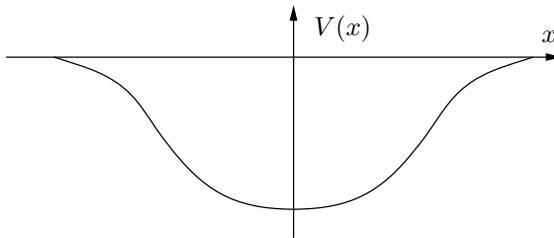


FIG. 9.4 – Puits de potentiel.

tandis que la région $E < V(x)$, où son impulsion est imaginaire

$$p(x) = \pm i\sqrt{2m(V(x) - E)} \tag{9.69}$$

lui est interdite. Nous allons voir que ce comportement classique se reflète dans le comportement quantique : la forme des solutions de (9.57) sera différente selon que $p(x)$ est réel ou imaginaire. Pour que $\varphi(x)$ soit une solution acceptable, il ne suffit pas que $\varphi(x)$ vérifie formellement (9.57), il faut aussi que $\varphi(x)$ soit normalisable

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 < \infty$$

5. Un exemple de courant stationnaire est le courant continu en électricité.

C'est cette condition que nous allons utiliser pour obtenir les états liés. Pour les états de diffusion, cette condition est trop forte : nous avons vu que pour $V(x) = 0$ les solutions de (9.57) sont des ondes planes, non normalisables. Pour $x \rightarrow \pm\infty$, nous nous attendons à un comportement d'onde plane pour les solutions de (9.57), puisque le potentiel s'annule à l'infini. Pour les états de diffusion $E > 0$ du potentiel de la figure 9.4, nous nous contenterons d'exiger un comportement d'onde plane à l'infini : il ne faut pas exiger davantage de la solution en présence de potentiel que de la solution en l'absence de potentiel !

9.3.2 Réflexion et transmission par une marche de potentiel

Dans la suite de cette section, nous allons nous intéresser au cas où le potentiel est constant par morceaux : $V(x)$ est constant dans un intervalle et saute brusquement à une autre constante en certains points. Ce type de potentiel représente une bonne approximation d'un potentiel réaliste dans certains cas, et il peut être utilisé pour approcher un potentiel variant continûment dans d'autres cas. Comme le potentiel présente des discontinuités, il est nécessaire d'examiner le comportement de la fonction d'onde au voisinage d'une telle discontinuité. Montrons que la fonction d'onde $\varphi(x)$ et sa dérivée $\varphi'(x)$ sont continues si le potentiel présente une discontinuité *finie* V_0 au point $x = x_0$ (figure 9.5). Comme $|\varphi(x)|^2$ doit être intégrable en x_0 , $|\varphi(x)|$ l'est également. Il sera commode de réécrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.57) sous la forme

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0 \quad (9.70)$$

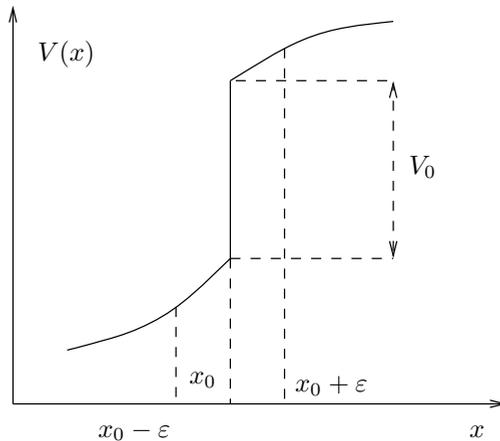


FIG. 9.5 – Discontinuité de potentiel.

Au voisinage de la discontinuité, nous pouvons déduire le comportement de $\varphi'(x)$ grâce à

$$\varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon) = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} dx = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \left[\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \right] \varphi(x) dx$$

La seconde intégrale est bien définie car $\varphi(x)$ est intégrable ; cette intégrale doit donc tendre vers zéro avec ε , ce qui montre que $\varphi'(x)$ et *a fortiori* $\varphi(x)$ sont continues tant que la discontinuité V_0 reste finie.

Au lieu d'écrire les conditions de continuité de $\varphi(x)$ et de $\varphi'(x)$, il est souvent commode d'écrire celles de $\varphi(x)$ et de sa dérivée logarithmique $\varphi'(x)/\varphi(x)$. Une conséquence immédiate de ces conditions est que le courant $j(x)$ est égal à la même constante de part et d'autre de x_0 , ce que l'on voit à partir de l'expression suivante de $j(x)$

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} |\varphi|^2 \left[\frac{\varphi'}{\varphi} - \left(\frac{\varphi'}{\varphi} \right)^* \right]$$

Comme application de ces conditions de continuité, prenons le cas d'une « marche de potentiel » (figure 9.6)

région I $V(x) = 0$ pour $x < 0$
 région II $V(x) = V_0$ pour $x > 0$

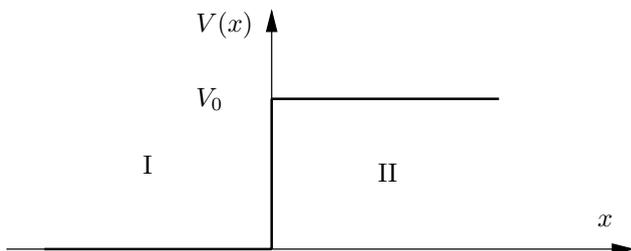


FIG. 9.6 – Marche de potentiel.

Pour fixer les idées, on choisit $0 < E < V_0$. Si l'on définit k et κ par

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{9.71}$$

les solutions de (9.70) s'écrivent dans les régions I et II

$$\text{I} \qquad \varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \tag{9.72}$$

$$\text{II} \qquad \varphi(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} \tag{9.73}$$

Si $V(x)$ reste égal à V_0 pour tout $x > 0$, le comportement (9.73) de la fonction d'onde reste valable quel que soit $x > 0$. Il est alors nécessaire que $D = 0$, car dans le cas contraire la fonction $|\varphi(x)|^2$ se comporterait comme $\exp(2\kappa x)$ pour $x \rightarrow \infty$: un comportement constant en module comme celui d'une onde plane est acceptable, mais pas un comportement aussi divergent. Dans ces conditions, la continuité à $x = 0$ de φ et celle de sa dérivée logarithmique s'écrivent

$$\varphi : C = A + B \quad \frac{\varphi'}{\varphi} : -\kappa = \frac{ik(A - B)}{A + B}$$

Les coefficients A et B sont *a priori* définis à une constante multiplicative près puisque l'on n'a fait aucune hypothèse sur la région $x > 0$. On peut fixer arbitrairement $A = 1$, et la solution pour les deux autres coefficients est alors

$$B = -\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \quad C = -\frac{2ik}{\kappa - ik} \quad (9.74)$$

Nous pouvons déduire de ces expressions le cas limite où $V_0 \rightarrow \infty$, qui correspond à une barrière infranchissable par une particule classique quelle que soit son énergie, ou barrière de potentiel infinie. L'équation (9.71) montre alors que $\kappa \rightarrow \infty$, et (9.74) que $B \rightarrow -1$ et $C \rightarrow 0$. La fonction d'onde s'annule dans la région II, en restant continue au point $x = 0$. En revanche sa dérivée $\varphi'(x)$ est discontinue en ce point.

9.3.3 États liés du puits carré

Comme premier exemple d'états liés, étudions ceux du puits carré infini (figure 9.7)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & 0 \leq x \leq a \\ V(x) &= +\infty & x < 0 \text{ ou } x > a \end{aligned}$$

Les barrières de potentiel en $x = 0$ et $x = a$ sont infinies : une particule classique est enfermée dans la région $0 \leq x \leq a$ quelle que soit son énergie. D'après la discussion précédente, la fonction d'onde de la particule quantique s'annule en dehors de l'intervalle $[0, a]$ et une particule quantique est également strictement confinée dans $[0, a]$: sa probabilité de présence est nulle en dehors de l'intervalle $[0, a]$. En raison de l'annulation de la fonction d'onde à $x = 0$ les solutions de (9.70) sont de la forme

$$\varphi(x) = A \sin(kx) \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

et comme $\varphi(x)$ doit aussi s'annuler à $x = a$, les valeurs de k sont de la forme

$$k = k_n = \frac{\pi(n+1)}{a} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.75)$$

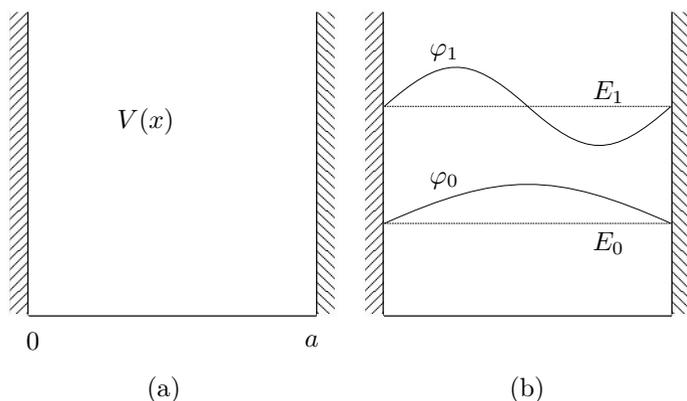


FIG. 9.7 – Puits carré infini et fonctions d’onde de ses deux premiers niveaux.

Nous voyons que l’énergie prend des valeurs discrètes étiquetées par un nombre entier positif⁶ n

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.76)$$

En d’autres termes, nous venons de montrer que les niveaux d’énergie du puits infini sont *quantifiés*, et c’est le premier exemple où nous démontrons explicitement cette quantification. La fonction d’onde correctement normalisée correspondant au niveau E_n est

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} \quad (9.77)$$

Il est facile de vérifier que deux fonctions d’onde $\varphi_n(x)$ et $\varphi_m(x)$ sont orthogonales pour $n \neq m$. Les valeurs k_n et $-k_n$ correspondent au même état physique car la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ conduit à un simple changement de signe de la fonction d’onde, qui est un facteur de phase : c’est pourquoi nous n’avons pas pris en compte les valeurs négatives de n dans (9.75). Remarquons également que la fonction d’onde $\varphi_n(x)$ s’annule n fois dans l’intervalle $[0, a]$: on dit que la fonction d’onde a n *nœuds* dans cet intervalle. Le nombre de nœuds donne une classification des niveaux par valeurs croissantes de l’énergie : plus l’énergie est grande et plus la fonction d’onde a de nœuds. Ceci est un résultat général que nous admettrons lorsque le potentiel $V(x)$ est suffisamment régulier, ce que nous supposerons toujours : si E_n est l’énergie du niveau n , la fonction d’onde correspondante aura n nœuds. La fonction d’onde

6. Notre convention (qui n’est pas la convention habituelle dans ce cas précis) est choisie de telle sorte $n = 0$ corresponde à l’état fondamental, ce qui permet de se conformer à une convention usuelle : en général l’énergie de l’état fondamental est notée E_0 .

de l'état fondamental E_0 ne s'annule pas. Une autre remarque est que l'inégalité de Heisenberg permet de trouver l'ordre de grandeur de l'énergie de l'état fondamental. En effet $p \sim \hbar/x \sim \hbar/a$, ce qui donne

$$E = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

en accord avec (9.76) pour $n = 0$ à un facteur π^2 près. Contrairement au cas de l'atome d'hydrogène, le résultat heuristique diffère du résultat exact par un facteur ~ 10 : ceci provient de la variation brutale du potentiel à $x = 0$ et $x = a$ qui oblige la fonction d'onde à s'annuler de façon brusque, avec comme conséquence une énergie cinétique importante. En effet l'énergie cinétique moyenne $\langle K \rangle_\varphi$ dans l'état φ est

$$\langle K \rangle_\varphi = \langle \varphi | K | \varphi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \varphi^*(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2}$$

et elle est d'autant plus importante que la dérivée seconde de $\varphi(x)$ est grande.

Déterminons maintenant les niveaux d'énergie du puits carré fini (figure 9.8)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & |x| > a/2 \\ V(x) &= -V_0 & |x| < a/2 \end{aligned}$$

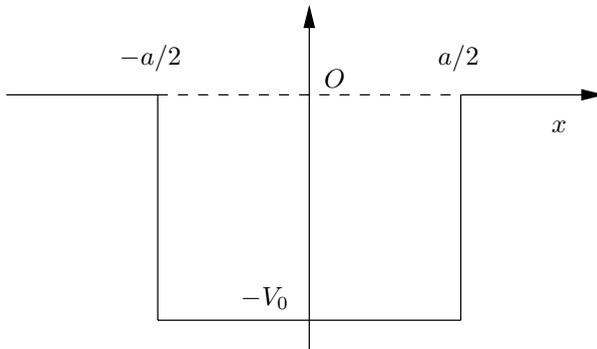


FIG. 9.8 – Puits carré fini.

On cherche les états liés, et on doit donc choisir l'énergie dans l'intervalle $[-V_0, 0]$. Définissons k et κ par

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad 0 \leq \kappa^2 \leq \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (9.78)$$

Le potentiel $V(x)$ est invariant dans l'opération parité $\Pi : x \rightarrow -x$. En effet $V(-x) = V(x)$, ce qui entraîne l'invariance du hamiltonien dans cette

opération : $H(-x) = H(x)$. D'après la discussion du § 8.3.3, on peut chercher les vecteurs propres $|\varphi_{\pm}\rangle$ de H qui sont pairs ou impairs dans l'opération parité

$$\Pi|\varphi_{\pm}\rangle = \pm|\varphi_{\pm}\rangle$$

En termes de fonction d'onde, si $\langle x|\varphi_{\pm}\rangle = \varphi_{\pm}(x)$

$$\varphi_{+}(-x) = \varphi_{+}(x) \quad \varphi_{-}(-x) = -\varphi_{-}(x)$$

En effet, compte tenu de $\Pi|x\rangle = |-x\rangle$

$$\begin{aligned} \langle x|\Pi|\varphi_{\pm}\rangle &= \langle -x|\varphi_{\pm}\rangle = \varphi_{\pm}(-x) \\ &= \pm\langle x|\varphi_{\pm}\rangle = \pm\varphi_{\pm}(x) \end{aligned}$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger (9.70) se divisent donc en solutions paires et impaires. Écrivons les fonctions d'ondes paires et impaires dans les régions I : $x < -a/2$, II : $|x| < a/2$ et III : $x > a/2$; la colonne du milieu du tableau ci-dessous donne les fonctions d'onde paires, la colonne de droite les fonctions d'onde impaires

I	$A e^{-\kappa x }$	$-A' e^{-\kappa x }$
II	$B \cos(kx)$	$B' \sin(kx)$
III	$A e^{-\kappa x}$	$A' e^{-\kappa x}$

Les conditions de continuité de φ'/φ au point $x = a/2$ donnent

$$\text{Solutions paires} \quad \kappa = k \tan(ka/2) \quad (9.79)$$

$$\text{Solutions impaires} \quad \kappa = -k \cot(ka/2) \quad (9.80)$$

La solution graphique de ces équations est représentée sur la figure 9.9. On voit qu'il existe un nombre fini d'états liés, et qu'il existe toujours au moins un état lié.

9.3.4 Diffusion par un potentiel

Après l'étude des états liés, nous passons à celle des états de diffusion. Nous nous proposons d'étudier le comportement d'une particule quand elle traverse une barrière de potentiel de la forme suivante (figure 9.10)

Région I	$x < -a$:	$V(x) = 0$
Région II	$-b < x < b$:	$V(x) = V_0$
Région III	$x > a$:	$V(x) = 0$

Nous nous limitons au cas $E > V_0$, le cas $E < V_0$ sera examiné au § 12.4.5. Définissant

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (9.81)$$

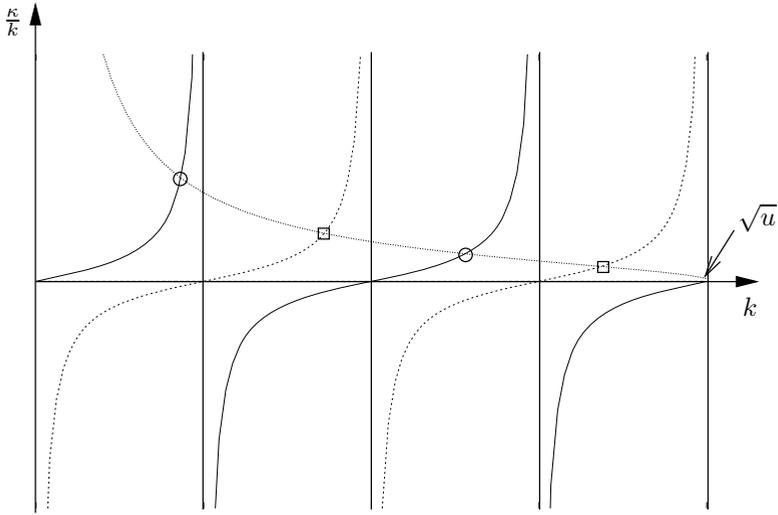


FIG. 9.9 – Détermination graphique des états liés du puits carré fini par intersection des courbes $\tan ka/2$ et $-\cot ka/2$ avec $\sqrt{U - k^2}/k$, où $U = 2mV_0/\hbar^2$.

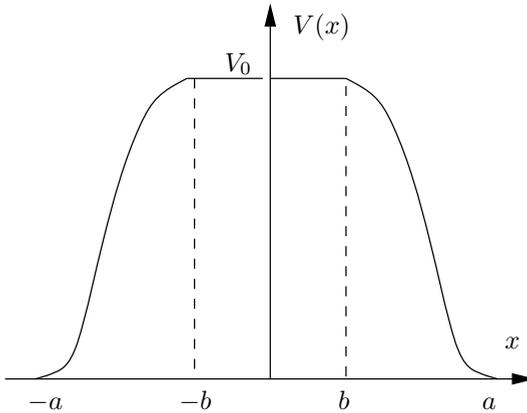


FIG. 9.10 – Une barrière de potentiel.

les fonction d'onde dans les trois régions sont

$$\text{I} : x < -a \quad \varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (9.82)$$

$$\text{II} : -b \leq x \leq b \quad \varphi(x) = F e^{ik'x} + G e^{-ik'x} \quad (9.83)$$

$$\text{III} : x > a \quad \varphi(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx} \quad (9.84)$$

Nous examinons d'abord le passage de la région I à la région II, c'est-à-dire l'intervalle $[-a, -b]$. Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, A et B sont

reliés linéairement à F et G , ce que l'on peut écrire sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (9.85)$$

où R est une matrice 2×2 . Il est possible de déterminer des propriétés de R sans résoudre explicitement l'équation de Schrödinger. On observe en effet que si $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.57), alors son complexe conjugué $\varphi^*(x)$ est également solution de cette équation parce que le potentiel $V(x)$ est réel. Cette propriété est une conséquence de l'invariance par renversement du sens du temps comme on le montre à l'annexe A. La fonction $\varphi^*(x)$ dans les régions I et II est

$$\text{I} \quad \varphi^*(x) = A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} \quad (9.86)$$

$$\text{II} \quad \varphi^*(x) = F^* e^{-ik'x} + G^* e^{ik'x} \quad (9.87)$$

Comparant les coefficients de $\exp(\pm ikx)$ et $\exp(\pm ik'x)$ avec ceux de (9.82) et (9.83) on déduit de (9.85)

$$\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} G^* \\ F^* \end{pmatrix}$$

soit

$$R_{11}^* = R_{22} \quad R_{12}^* = R_{21}$$

On peut donc écrire la matrice R en fonction de deux nombres complexes α et β

$$R = \sqrt{\frac{k'}{k}} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (9.88)$$

La raison pour l'introduction du facteur *a priori* arbitraire $\sqrt{k'/k}$ va apparaître dans un instant. La conservation du courant dans les régions I et II se traduit par la relation

$$k(|A|^2 - |B|^2) = k'(|F|^2 - |G|^2)$$

Calculons le courant dans la région I en exprimant A et B fonction de F et G

$$\begin{aligned} k(|A|^2 - |B|^2) &= k \frac{k'}{k} (|\alpha F + \beta G|^2 - |\beta^* F + \alpha^* G|^2) \\ &= k' (|\alpha|^2 - |\beta|^2) (|F|^2 - |G|^2) \end{aligned}$$

ce qui implique $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$: la matrice $\sqrt{k/k'} R$ est de déterminant un. On voit l'intérêt du coefficient $\sqrt{k'/k}$ dans (9.88) : en raison de la variation de la vitesse entre les régions I et II, c'est la matrice $\sqrt{k/k'} R$ qui a les propriétés les plus simples.

Pour passer de la région II à la région III, on remarque que le passage de la région III vers la région II est identique au passage de I à II, à condition de changer $x \rightarrow -x$ et $k \rightarrow k'$, et donc

$$\begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}$$

soit

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{k}{k'}} \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ -\beta & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \tilde{R} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (9.89)$$

Combinant (9.88) et (9.89), on obtient le passage $(A, B) \rightarrow (C, D)$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = R\tilde{R} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (9.90)$$

et l'on a donc $M = R\tilde{R}$. En utilisant les formes trouvées pour R et \tilde{R} , on déduit

$$M_{11} = M_{22}^* \quad M_{12} = M_{21}^* \quad \det M = 1 \quad (9.91)$$

À titre d'exercice, le lecteur pourra démontrer directement ces relations à partir de l'invariance par renversement du sens du temps et la conservation du courant, sans passer par l'intermédiaire des matrices R et \tilde{R} . La forme générale de la matrice de passage M est par conséquent

$$M = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \quad |\gamma|^2 - |\delta|^2 = 1 \quad (9.92)$$

Cette expression de M est indépendante de la forme du potentiel, pourvu que celui-ci s'annule suffisamment rapidement pour $x \rightarrow \pm\infty$.

Il reste une propriété générale de M que nous n'avons pas encore exploitée : lorsque le potentiel est invariant par parité, $V(x) = V(-x)$, l'opération parité $x \rightarrow -x$ échange les régions I et III. Si $\varphi(x)$ est la solution initiale et $\chi(x) = \varphi(-x)$, nous avons

$$\begin{array}{ll} \text{région I} & \chi(x) = C e^{-ikx} + D e^{ikx} \\ \text{région III} & \chi(x) = A e^{-ikx} + B e^{ikx} \end{array}$$

et la relation entre les différents coefficients est maintenant

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}$$

ou encore

$$\begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22} & -M_{12} \\ -M_{21} & M_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Nous avons utilisé $\det M = 1$. Comparant avec (9.91), nous en déduisons que M est une matrice antisymétrique : $M_{12} = -M_{21}$, ce qui joint à $M_{12}^* = M_{21}$ implique que δ est imaginaire pur, $\delta = i\eta$, η réel.

Au chapitre 13, nous étudierons la théorie de la diffusion dans l'espace à trois dimensions. Nous verrons qu'un outil important de cette théorie est la matrice S , que nous allons introduire dans le cas plus simple à une dimension. Nous supposons le potentiel de forme quelconque s'annulant⁷ dans la région $|x| > a$. Des sources de particules à $x = -\infty$ et $x = +\infty$ génèrent des ondes planes $\exp(ikx)$ et $\exp(-ikx)$ dans les régions $x < -a$ et $x > a$ respectivement : nous appellerons ces ondes les *ondes entrantes*. Ces ondes entrantes peuvent être réfléchies ou transmises et donner des ondes sortantes $\exp(-ikx)$ dans la région $x < -a$ et $\exp(ikx)$ dans la région $x > a$. Par définition, la matrice S relie les coefficients A et D des ondes entrantes (se propageant vers la barrière) aux coefficients B et C des ondes sortantes (cf. (9.82) et (9.84))

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} \quad (9.93)$$

La matrice S peut bien sûr s'exprimer en fonction de M . Cependant, il est plus instructif de répéter les raisonnements qui nous ont donné les propriétés générales de M .

(i) Conservation du courant

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2 \implies |A|^2 + |D|^2 = |B|^2 + |C|^2$$

Cette équation montre que S conserve la norme, et S est donc unitaire⁸.

(ii) $\varphi^*(x)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$\begin{pmatrix} A^* \\ D^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = (S^*)^{-1} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

d'où

$$S = (S^*)^{-1} = (S^{-1})^* = (S^\dagger)^* = S^T \quad (9.94)$$

La matrice S est symétrique : $S_{12} = S_{21}$. L'opération de conjugaison complexe échange les ondes entrantes et les ondes sortantes, ce qui correspond à renverser le sens du temps : la propriété de symétrie $S_{12} = S_{21}$ est donc liée à l'invariance par renversement du sens du temps.

Si on le souhaite, il est immédiat d'exprimer la matrice S en fonction de la matrice M .

Un aspect intéressant de la matrice S est qu'elle permet de relier la diffusion aux états liés, et plus généralement aux résonances (exercice 13.5.4). Prenant un puits de potentiel de forme quelconque (mais tel que $V(x) = 0$

7. On peut généraliser au cas d'un potentiel s'annulant suffisamment vite pour $x \rightarrow \pm\infty$.

8. Le raisonnement ne vaut que pour la dimension finie : nous avons seulement prouvé que S est une isométrie, ce qui suffit à en faire un opérateur unitaire en dimension finie. Il se trouve que S est unitaire même en dimension infinie, mais il faut un argument supplémentaire pour le prouver.

en dehors d'un intervalle fini pour simplifier la discussion), nous choisissons $E < 0$ avec $\kappa = -ik$ donné par (9.81). Les fonctions d'onde dans les régions I et III sont

$$\begin{array}{ll} \text{Région I} & \varphi(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \\ \text{Région III} & \varphi(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} \end{array}$$

On doit avoir $A = D = 0$ pour que $\varphi(x)$ soit normalisable. Compte tenu de la relation (9.93), si l'on veut avoir $(B, C) \neq 0$, il faut que S ait un pôle⁹ à $k = i\kappa$. Cette propriété est générale et on peut la vérifier explicitement sur le puits carré fini de la figure 9.8.

9.4 Potentiel périodique

9.4.1 Théorème de Bloch

Comme dernier exemple de l'équation de Schrödinger à une dimension, considérons le cas d'un potentiel périodique de période spatiale l

$$V(x) = V(x + l) \quad (9.95)$$

Les résultats que nous obtiendrons sont d'une importance capitale en physique du solide : en effet un électron dans un réseau cristallin est soumis à un potentiel périodique – à trois dimensions, mais les résultats obtenus ci-dessous à une dimension se généralisent à trois dimensions –, provenant des interactions de cet électron avec les ions du réseau cristallin. La périodicité du potentiel conduit à l'existence de bandes d'énergie, qui, jointes au principe de Pauli, sont à la base de notre compréhension de la conductibilité électrique. Si le potentiel a la forme (9.95), le problème est invariant par toute translation $x \rightarrow x + l$, et d'après le théorème de Wigner il existe un opérateur unitaire T_l agissant dans l'espace de Hilbert des états, en l'occurrence l'espace des fonctions d'onde $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ tel que

$$(T_l \varphi)(x) = \varphi(x - l) \quad T_l^\dagger = T_l^{-1} \quad (9.96)$$

Rappelons que la fonction obtenue à partir de $\varphi(x)$ par une translation de l est $\varphi(x - l)$. Comme l'opérateur T_l est unitaire, ses valeurs propres t_l sont de module un et on peut les écrire en fonction d'un paramètre q

$$t_l(q) = e^{-iql} \quad (9.97)$$

Le paramètre q n'est défini qu'à un multiple entier près de $2\pi/l$: en effet, si

$$q \rightarrow q' = q + \frac{2\pi p}{l} \quad p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9.98)$$

9. Ou plus généralement une singularité, mais on peut montrer qu'états liés et résonances correspondent à des pôles.

la valeur de t_l est inchangée. Comme T_l commute avec le hamiltonien en raison de la périodicité (9.95) du potentiel, il est possible de diagonaliser simultanément T_l et H . Soit $\varphi_q(x)$ les fonction propres communes de T_l et de H

$$\begin{aligned} T_l \varphi_q(x) &= t_l(q) \varphi_q(x) = e^{-iq l} \varphi_q(x) \\ H \varphi_q(x) &= E_q \varphi_q(x) \end{aligned} \quad (9.99)$$

La première de ces équations montre que

$$\varphi_q(x - l) = e^{-iq l} \varphi_q(x)$$

et nous en déduisons le *théorème de Bloch*¹⁰ : les état stationnaires dans un potentiel périodique (9.95) sont de la forme

$$\varphi_q(x) = e^{iqx} u_{sq}(x) \quad u_{sq}(x) = u_{sq}(x + l) \quad (9.100)$$

où $u_{sq}(x)$ est une fonction périodique de période l . L'indice s est en général nécessaire, car à une valeur de q correspondent plusieurs solutions possibles : nous verrons que s indice les bandes d'énergie. Il est facile d'écrire l'équation différentielle que vérifie $u_{sq}(x)$: comme $P = -i\hbar d/dx$

$$\begin{aligned} P e^{iqx} &= \hbar q e^{iqx} \\ P \varphi_q(x) &= e^{iqx} (P + \hbar q) u_{sq}(x) \\ P^2 \varphi_q(x) &= e^{iqx} (P + \hbar q)^2 u_{sq}(x) \end{aligned}$$

d'où

$$H \varphi_q(x) = e^{iqx} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{\hbar^2 q}{m} \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + V(x) \right] u_{sq}(x) = E_{sq} e^{iqx} u_{sq}(x)$$

soit, en divisant par $\exp(iqx)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{\hbar^2 q}{m} \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + V(x) \right] u_{sq}(x) = E_{sq} u_{sq}(x) \quad (9.101)$$

La fonction d'onde dans un potentiel périodique s'obtient en résolvant (9.101) par exemple dans l'intervalle $[0, l]$ avec la condition aux limites $u_{sq}(0) = u_{sq}(l)$. La quantité $\hbar q$ a les dimensions d'une impulsion et présente effectivement certaines analogies avec une impulsion. Cependant il ne s'agit pas d'une impulsion véritable, ne serait-ce que parce que suivant (9.98) q n'est pas unique : on appelle $\hbar q$ une *quasi-impulsion*. On remarque enfin que si le potentiel est pair, $V(x) = V(-x)$, l'équation (9.101) est inchangée dans les transformations simultanées $x \rightarrow -x$, $q \rightarrow -q$; $u_{s,-q}(x)$ est donc solution de (9.101) avec la même valeur de l'énergie, $E_{sq} = E_{s,-q}$, et tous les niveaux sont doublement dégénérés.

10. Ce théorème est aussi connu sous le nom de théorème de Floquet quand on traite d'une périodicité temporelle.

9.4.2 Bandes d'énergie

Examinons maintenant les propriétés des solutions de l'équation de Schrödinger (9.101) dans le potentiel périodique de la figure 9.11 : $V(x)$ est une suite de crêneaux, et $V(x)$ est non nul dans des intervalles centrés autour de $x = pl$, $p = \dots, -2, -1, 0, 1, 2 \dots$ et s'annule dans les intervalles¹¹

$$\left(p - \frac{1}{2}\right)l - \Delta x \leq x \leq \left(p - \frac{1}{2}\right)l + \Delta x \quad (9.102)$$

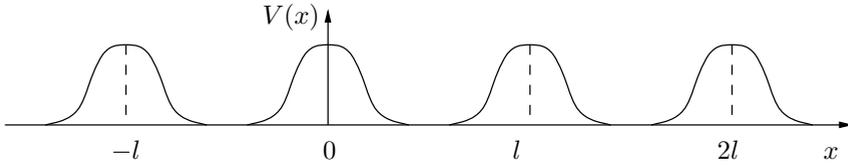


FIG. 9.11 – Potentiel périodique de période l à une dimension.

Dans les intervalles (9.102) où $V(x)$ s'annule, une solution $\varphi(x)$ de l'équation de Schrödinger est une superposition d'ondes planes de vecteur d'onde $\pm k$, $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$. À gauche du crêneau n et dans l'intervalle (9.102) pour $p = n$, $\varphi(x)$ s'écrit

$$\varphi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$$

et à droite de ce crêneau, dans l'intervalle (9.102) avec $p = n + 1$

$$\varphi(x) = A_{n+1} e^{ikx} + B_{n+1} e^{-ikx}$$

Les coefficients (A_n, B_n) sont reliés aux coefficients (A_{n+1}, B_{n+1}) suivant (9.90) par la matrice de passage M (9.92) correspondant au crêneau $V(x)$

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (9.103)$$

D'autre part, compte tenu du théorème de Bloch (9.100)

$$\varphi(x + l) = e^{iq l} \varphi(x)$$

et nous avons

$$A_{n+1} e^{ikl} e^{ikx} + B_{n+1} e^{-ikl} e^{-ikx} = e^{iq l} (A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx})$$

soit

$$e^{iq l} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikl} A_{n+1} \\ e^{-ikl} B_{n+1} \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = DM^{-1} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (9.104)$$

11. En fait il n'est pas nécessaire de supposer cette annulation pour obtenir les résultats qui vont suivre, mais cette supposition simplifie l'argument.

D est la matrice diagonale d'éléments $D_{11} = \exp(ikl)$, $D_{22} = \exp(-ikl)$ et

$$DM^{-1} = \begin{pmatrix} \gamma^* e^{ikl} & -\delta e^{ikl} \\ -\delta^* e^{-ikl} & \gamma e^{-ikl} \end{pmatrix} \quad (9.105)$$

L'équation (9.104) implique que (A_n, B_n) est vecteur propre de la matrice $\tilde{M} = DM^{-1}$ avec la valeur propre $\exp(iql)$, qui est de module un. L'équation aux valeurs propres λ pour la matrice \tilde{M} est ($\det \tilde{M} = 1$)

$$\lambda^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\gamma^* e^{ikl}) + 1 = 0$$

et posant $x = \operatorname{Re}(\gamma^* \exp(ikl))$ les valeurs propres λ_{\pm} sont données par

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= x \pm \sqrt{x^2 - 1} & |x| > 1 \\ \lambda_{\pm} &= x \pm i\sqrt{1 - x^2} & |x| \leq 1 \end{aligned}$$

Le cas $|x| > 1$ est exclu car les racines ne peuvent pas être de module un : leur produit est égal à un et elles sont réelles. En revanche les deux racines complexes sont bien de module un pour $|x| \leq 1$; elles sont non dégénérées si $|x| < 1$ et dégénérées si $|x| = 1$.

Afin de simplifier au maximum les calculs, nous allons examiner un cas limite, le créneau en fonction delta. Les résultats que nous obtiendrons se généralisent qualitativement à tout potentiel périodique. Le potentiel périodique (9.95) est donc

$$V(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x - lp) \quad (9.106)$$

On montre dans l'exercice 9.6.7 que le coefficient γ de M vaut

$$\gamma = 1 + i \frac{g}{2k} \quad (9.107)$$

On en déduit

$$x = \operatorname{Re}(\gamma^* e^{ikl}) = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

et l'équation aux valeurs propres s'écrit

$$x = \cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl \quad (9.108)$$

Notons que q n'est pas fixé de façon unique par (9.108) : $q' = q + 2\pi p/l$ avec p entier vérifie aussi (9.108). Cette équation montre que certains intervalles en k , et donc certaines zones d'énergie puisque $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, sont exclus parce que le membre de droite de (9.108) peut être plus grand que un en module : ces zones sont appelées *bandes interdites*. Montrons-le explicitement dans la région $k \simeq 0$. Posons $y = kl$ et

$$f(y) = \cos y + \frac{gl}{2y} \sin y$$

Comme $f(0) = 1 + gl/2$ on voit qu'un intervalle $0 \leq y < y_0$ ou $0 \leq k < k_0$ est interdit. Supposant $gl \ll 1$ pour une estimation analytique, on trouve

$$y_0 \simeq \sqrt{gl} \quad \text{ou} \quad k_0 \simeq \sqrt{g/l}$$

Il existe d'autres zones interdites : en effet si

$$y = n\pi + \varepsilon \quad |\varepsilon| \ll 1$$

alors

$$|f(y)| \simeq 1 + \frac{gl}{2y} \varepsilon$$

et on met en évidence une région interdite où $|f(y)| > 1$ pour $0 < \varepsilon \ll 1$. Ces remarques permettent de tracer qualitativement la courbe $f(y)$ sur la figure 9.12. On porte conventionnellement E en fonction de q (rappelons que $\hbar q$ est la quasi-impulsion), ce qui donne la figure 9.13 où l'on distingue les bandes permises indicées par s . Compte tenu de (9.98), on peut restreindre q à l'intervalle $[0, 2\pi/l]$, ou de façon équivalente à l'intervalle $[-\pi/l, \pi/l]$, qui est appelé *première zone de Brillouin*. Dans certaines régions on peut exprimer simplement E en fonction de q . Examinons par exemple la région $k \simeq k_0$. Comme $\cos ql = 1$ pour $k = k_0$, (9.108) devient, compte tenu de $f(k_0l) = 1$

$$-\frac{1}{2}q^2l^2 \simeq (k - k_0)lf'(k_0l)$$

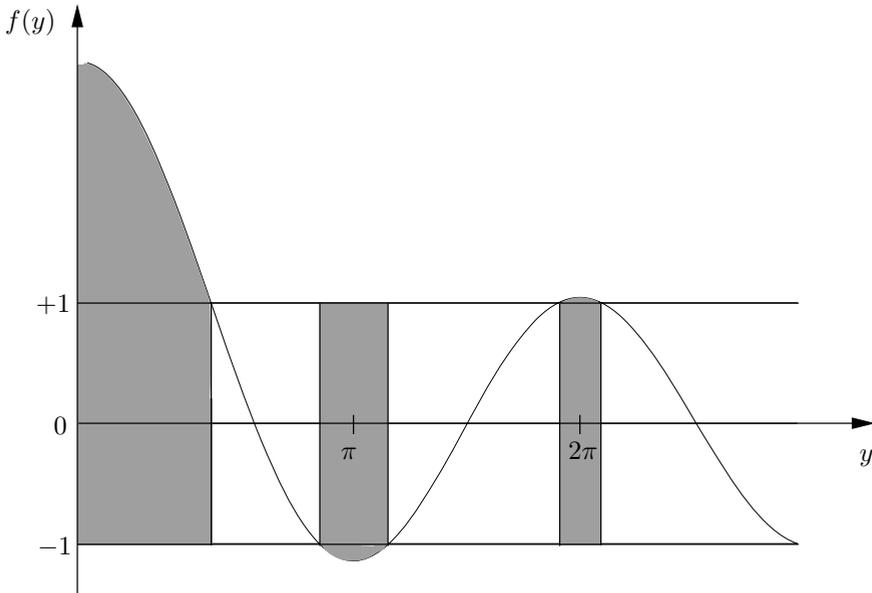


FIG. 9.12 – Solutions de (9.108).

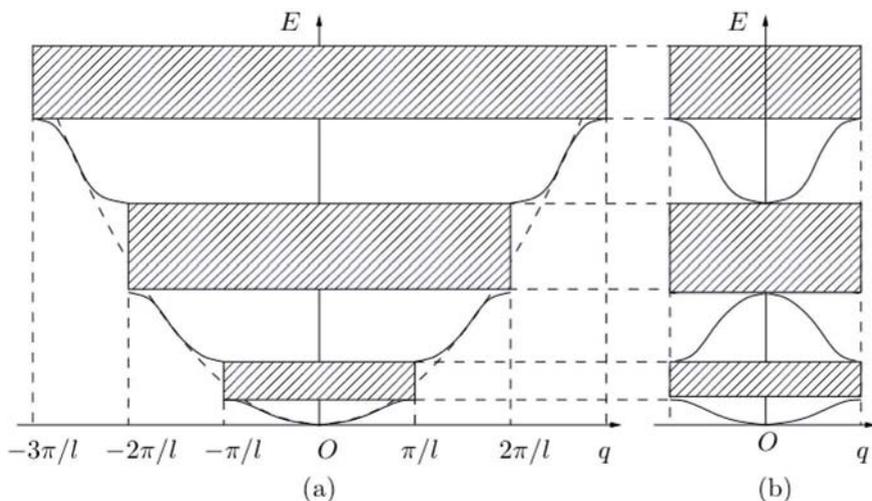


FIG. 9.13 – Bandes d'énergie : (a) q varie sans restrictions (b) q est limité à la première zone de Brillouin.

Ceci permet d'estimer $(E - E_0)$

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_0^2) \simeq \frac{\hbar^2 k_0 (k - k_0)}{m}$$

soit

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 l k_0}{2m |f'(k_0 l)|} q^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} q^2 \quad (9.109)$$

Au voisinage de $k = k_0$ le comportement de l'énergie est celui d'une particule de masse effective m^*

$$m^* = \frac{m |f'(k_0 l)|}{l k_0} \quad (9.110)$$

Cette masse effective joue un grand rôle dans la théorie de la conductibilité électrique : en première approximation, l'effet du réseau cristallin se traduit par un simple changement de la masse.

9.5 Mécanique ondulatoire en dimension $d = 3$

9.5.1 Généralités

Soit \vec{R} et \vec{P} les opérateurs position et impulsion dans l'espace à trois dimensions, de composantes¹² X_j et P_j , $j = x, y, z$. Rappelons les relations

12. Les composantes de \vec{R} seront notées (X, Y, Z) et celles de \vec{r} (x, y, z) .

de commutation canoniques (8.45)

$$[X_j, P_k] = i\hbar \delta_{jk} I \quad (9.111)$$

Les composantes de \vec{R} et de \vec{P} commutent si $j \neq k$. On peut donc construire l'espace des états comme produit tensoriel des espaces $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$, $L_y^{(2)}(\mathbb{R})$ et $L_z^{(2)}(\mathbb{R})$

$$L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3) = L_x^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes L_y^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes L_z^{(2)}(\mathbb{R}) \quad (9.112)$$

Dans cet espace la composante X de \vec{R} sera l'opérateur

$$X \otimes I_y \otimes I_z$$

Si $\varphi_n(x)$ est une base orthonormée de $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$, on construit une base $\varphi_{nlm}(x, y, z)$ de $L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$ en prenant les produits¹³

$$\varphi_{nlm}(x, y, z) = \varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_l(z) \quad (9.113)$$

La construction de l'espace des états et des bases orthonormées est strictement parallèle à celle de l'espace des états de deux spins 1/2. Nous avons observé au § 6.1.2 que le vecteur d'état le plus général de l'espace des états de deux spins 1/2 n'est pas en général le produit tensoriel $|\varphi_1 \otimes \varphi_2\rangle$ de deux vecteurs d'état de spins individuels. De la même façon une fonction $\psi(x, y, z)$ de $L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$ n'est pas en général un produit $\varphi(x)\chi(y)\eta(z)$, mais $\psi(x, y, z)$ peut se décomposer sur la base (9.113)

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n,m,l} c_{nml} \varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_l(z) \quad (9.114)$$

$$c_{nlm} = \int d^3r \varphi_n^*(x)\varphi_m^*(y)\varphi_l^*(z)\psi(x, y, z) \quad (9.115)$$

Il est immédiat d'écrire la généralisation à trois dimensions des formules de la section 9.1. Nous nous contentons de donner quelques exemples, en laissant au lecteur le soin d'établir les autres formules.

- États propres $|\vec{r}\rangle$ de \vec{R}

$$\vec{R} |\vec{r}\rangle = \vec{r} |\vec{r}\rangle \quad (9.116)$$

- Relation de fermeture (cf. (9.9))

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = I \quad (9.117)$$

13. Pour la simplicité de l'écriture nous avons pris les mêmes fonctions de base dans les espaces (x, y, z) , mais nous aurions bien sûr pu choisir trois bases différentes.

- Amplitude de probabilité $\varphi(\vec{r})$ pour trouver une particule dans l'état $|\varphi\rangle$ au point \vec{r} , ou fonction d'onde de la particule

$$\varphi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi \rangle \quad (9.118)$$

- Densité de probabilité de présence : $|\varphi(\vec{r})|^2 d^3r$ est la probabilité de trouver la particule dans le volume d^3r autour du point \vec{r} .
- Action des opérateurs \vec{R} et \vec{P} sur $\varphi(\vec{r})$ (cf. (9.14) et (9.16))

$$\boxed{\left(\vec{R}\varphi \right)(\vec{r}) = \vec{r}\varphi(\vec{r}) \quad \left(\vec{P}\varphi \right)(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})} \quad (9.119)$$

- Transformée de Fourier

$$\boxed{\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}} \quad (9.120)$$

On notera le facteur $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ pour chaque dimension d'espace.

Nous avons établi au § 8.4.2 la forme générale du hamiltonien en dimension $d = 3$. Dans la suite de cette section nous supposons que \vec{A} est un gradient : $\vec{A} = \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})$. Physiquement cela veut dire qu'il n'y a pas de champ magnétique ; le cas d'un champ magnétique non nul sera étudié dans la section 11.5. Le hamiltonien (8.74) est simplement

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (9.121)$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps¹⁴ qui généralise (9.57) à trois dimensions est

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})} \quad (9.122)$$

La généralisation du courant (9.63) est

$$\boxed{\vec{j}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\frac{\hbar}{im} \varphi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, t) \right]} \quad (9.123)$$

qui vérifie l'équation de continuité (exercice 9.6.9)

$$\frac{\partial |\varphi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (9.124)$$

14. Nous laissons au lecteur le soin d'écrire l'équation de Schrödinger dépendant du temps qui généralise (9.55) à trois dimensions.

9.5.2 Espace de phase et densité de niveaux

Dans de nombreux problèmes, il est nécessaire de savoir compter le nombre de niveaux d'énergie dans une certaine région de l'espace (\vec{r}, \vec{p}) : cet espace est appelé *espace de phase*. Revenons au puits infini du § 9.3.3 en appelant L_x la largeur du puits. Les niveaux d'énergie sont étiquetés par un entier positif n , et nous allons nous intéresser au cas où $n \gg 1$ et où L_x est grand : les niveaux d'énergie (9.76) sont alors très resserrés et on pourra remplacer les sommes sur n par des intégrales. Soit un vecteur d'onde (9.75) $k_n = \pi(n + 1)/L_x$. Calculons le nombre de niveaux d'énergie dans l'intervalle en k : $[k_n, k_n + \Delta k]$. D'après (9.77) avec $a \rightarrow L_x$, le nombre de niveaux Δn ($1 \ll \Delta n \ll n$) dans l'intervalle $[k, k + \Delta k]$ est

$$\Delta n = \frac{L_x}{\pi} \Delta k \quad (9.125)$$

Au lieu des conditions d'annulation de la fonction d'onde aux points $x = 0$ et $x = L_x$, il est souvent plus commode de choisir des *conditions aux limites périodiques* : $\varphi(0) = \varphi(L_x)$, soit pour les fonctions d'onde¹⁵

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_n x} \quad k_n = \frac{2\pi n}{L_x} \quad n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (9.126)$$

et par conséquent

$$\Delta n = \frac{L_x}{2\pi} \Delta k \quad (9.127)$$

À première vue (9.145) diffère¹⁶ de (9.125) par un facteur 1/2. Cependant nous avons déjà observé qu'avec les fonctions d'onde (9.77), les valeurs k_n et $-k_n$ correspondent au même état physique car la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ conduit à un simple changement de signe de la fonction d'onde. En revanche, la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ dans (9.126) conduit à un état physique différent : la division par deux dans (9.127) est compensée par le doublement du nombre de valeurs possibles de k_n . Pour compter les niveaux d'énergie, il est équivalent de choisir les conditions aux limites périodiques ou les conditions d'annulation (voir aussi la note 17).

Passons au puits carré infini en dimension $d = 3$: les fonctions d'onde s'annulent en dehors des intervalles où $V(\vec{r}) = 0$

$$0 \leq x \leq L_x \quad 0 \leq y \leq L_y \quad 0 \leq z \leq L_z \quad (9.128)$$

15. Ce choix de fonction d'onde est parfois appelé « quantification dans une boîte ». Il évite de travailler avec les ondes planes du spectre continu, puisque les « ondes planes » (9.126) sont normalisables. Cependant les intégrales de Fourier sont alors remplacées par des sommes de Fourier, ce qui alourdit les calculs.

16. Comme $n \gg 1$, on fait pas de différence entre n et $(n + 1)$.

Ces fonctions d'onde sont de la forme

$$\varphi_{[n_x, n_y, n_z]}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi(n_x + 1)x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_y + 1)y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_z + 1)z}{L_z}\right) \quad (9.129)$$

avec $(n_x, n_y, n_z) = 0, 1, 2, \dots$. Les valeurs correspondantes de l'énergie sont

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{(n_x + 1)^2}{L_x^2} + \frac{(n_y + 1)^2}{L_y^2} + \frac{(n_z + 1)^2}{L_z^2} \right) \quad (9.130)$$

Lorsque $L_x = L_y = L_z = L$, ces valeurs propres sont en général dégénérées (exercice 9.6.8).

Effectuons le décompte des niveaux à trois dimensions. Il sera commode d'utiliser des conditions aux limites périodiques

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x + L_x, y + L_y, z + L_z) \quad (9.131)$$

Soit $\Delta\mathcal{K}$ l'élément de volume $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ de l'espace des \vec{k} , tel que l'extrémité du vecteur d'onde \vec{k} se trouve dans $\Delta\mathcal{K}$: les composantes (x, y, z) de ce vecteur sont comprises dans les intervalles

$$[k_x, k_x + \Delta k_x], [k_y, k_y + \Delta k_y], [k_z, k_z + \Delta k_z]$$

Le nombre de niveaux d'énergie dans $\Delta\mathcal{K}$ s'obtient en généralisant (9.127)

$$\Delta n = \left(\frac{L_x}{2\pi}\right) \Delta k_x \left(\frac{L_y}{2\pi}\right) \Delta k_y \left(\frac{L_z}{2\pi}\right) \Delta k_z = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \Delta\mathcal{K} \quad (9.132)$$

Prenant $\Delta\mathcal{K}$ infinitésimal, $\Delta\mathcal{K} = d^3k$, on définit la *densité de niveaux* (ou *densité d'états*) $\mathcal{D}(\vec{k})$ dans l'espace des \vec{k} comme suit : $\mathcal{D}(\vec{k})d^3k$ est le nombre de niveaux dans le volume d^3k centré en \vec{k} . D'après (9.132)

$$\boxed{\mathcal{D}(\vec{k})d^3k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d^3k} \quad (9.133)$$

où $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$ est le volume de la boîte de côtés (L_x, L_y, L_z) ¹⁷. Compte tenu de $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, la densité de niveaux¹⁸ dans l'espace des \vec{p} est

$$\boxed{\mathcal{D}(\vec{p}) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\mathcal{V}}{h^3}} \quad (9.134)$$

17. Le résultat est aussi valable pour une boîte qui n'est pas un parallélépipède. Les termes correctifs sont en puissances de $(kL)^{-1}$, où L est une dimension caractéristique de la boîte. Le premier terme correctif représente un terme de surface. La différence entre conditions aux limites périodiques et conditions d'annulation, qui est un effet de surface, se traduit aussi par ce type de correction. Ces corrections sont négligeables dans une boîte suffisamment grande.

18. En toute rigueur nous devrions utiliser une notation différente pour les différentes densités de niveaux ; nous avons utilisé la même lettre \mathcal{D} dans tous les cas afin de ne pas multiplier à l'excès les notations.

Ce résultat est fondamental. On en déduit la densité de niveaux par unité d'énergie¹⁹ ; comme $\mathcal{D}(\vec{p})$ dépend seulement de $p = |\vec{p}|$

$$\mathcal{D}(p) = \frac{4\pi \mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} p^2 = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} p^2 \quad (9.135)$$

La densité de niveaux par unité d'énergie $\mathcal{D}(E)$ est

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} p^2 \frac{dp}{dE} = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} mp$$

ou

$$\boxed{\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}m}{2\pi^2\hbar^3} (2mE)^{1/2}} \quad (9.136)$$

Le nombre de niveaux dans $[E, E + dE]$ est $\mathcal{D}(E)dE$. On peut également calculer $\mathcal{D}(E)$ à partir de $\Phi(E)$, qui est le nombre de niveaux d'énergie inférieure à E : $\mathcal{D}(E) = \Phi'(E)$ (exercice 9.6.10). La quantité \mathcal{D}/\mathcal{V} est la densité de niveaux par unité de volume, qui est indépendante du volume.

En remarquant que $\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} d^3r$, on déduit de (9.134) que le nombre de niveaux dans $d^3r d^3p$ est

$$\boxed{dN = \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d^3r d^3p}{h^3}} \quad (9.137)$$

$d^3r d^3p$ est un volume infinitésimal de l'espace de phase (\vec{r}, \vec{p}) . On peut interpréter (9.137) de la façon suivante : le volume élémentaire de l'espace de phase est h^3 , dans le sens où l'on peut placer un niveau d'énergie par volume élémentaire. L'inégalité de Heisenberg permet de le comprendre : si une particule est confinée dans un intervalle Δx , son impulsion $p \sim h/\Delta x$. Ce résultat s'exprime sous forme imagée : alors qu'une particule classique dont l'état est défini par sa position \vec{r} et son impulsion \vec{p} occupe un point (\vec{r}, \vec{p}) dans l'espace de phase, une particule quantique doit occuper au minimum un volume $\sim h^3$.

Les résultats (9.135) ou (9.136) sont d'une importance capitale en mécanique statistique quantique : la probabilité qu'un système à l'équilibre thermique ait une énergie E (voir (1.12) et la note 16 du chapitre 1) est

$$\rho(E) = \mathcal{N} \mathcal{D}(E) e^{-\beta E}$$

où \mathcal{N} est une constante de normalisation fixée par

$$\int dE \rho(E) = 1$$

19. Avec des conditions d'annulation de la fonction d'onde, il s'introduirait un facteur 1/8 dans (9.133) pour tenir compte du fait que les composantes de \vec{k} sont positives. Le résultat final serait toutefois identique, à cause du facteur 1/2 de différence entre (9.125) et (9.127) : $(1/2)^3 = 1/8$.

9.5.3 Règle d'or de Fermi

La notion de densité de niveaux va nous permettre de montrer une des formules les plus importantes de la physique quantique, la *règle d'or de Fermi*, qui permet de calculer les probabilités de transition vers les états de diffusion, aussi appelés états du continu car appartenant au spectre continu d'un hamiltonien, dans le cas présent le hamiltonien H_0 (9.138). Considérons un système physique régi par le hamiltonien $H(t)$ dépendant du temps

$$H(t) = H_0 + W(t) \quad (9.138)$$

où H_0 est indépendant du temps et de spectre supposé connu : les valeurs propres de l'énergie sont E_n et les vecteurs propres $|n\rangle$

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (9.139)$$

Nous nous proposons de résoudre le problème suivant : au temps $t = 0$, le système est dans l'état initial $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$, état propre de H_0 d'énergie E_i , et nous voulons calculer la probabilité $p_{i \rightarrow f}(t)$ de le trouver au temps t dans l'état propre $|f\rangle$ de H_0 d'énergie E_f . Pour ce faire nous devons obtenir le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système au temps t , puisque

$$p_{i \rightarrow f}(t) = |\langle f|\psi(t)\rangle|^2 \quad \text{avec} \quad |\psi(t=0)\rangle = |i\rangle \quad (9.140)$$

Nous avons déjà rencontré ce problème dans un cas simple : nous avons calculé dans la section 5.3 la probabilité de transition d'un niveau à l'autre de la molécule d'ammoniac plongée dans un champ électromagnétique oscillant. Le hamiltonien (9.138) généralise (5.54), H_0 étant l'analogie de (5.55). Nous suivrons la méthode du § 5.3.3 en l'adaptant à un nombre de niveaux quelconque. Comme au § 5.3.3, il est commode de passer dans le point de vue de l'interaction, et suivant (4.44), de définir le vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ et l'interaction $\tilde{W}(t)$ dans ce point de vue

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{iH_0t}|\psi(t)\rangle \quad \tilde{W}(t) = e^{iH_0t}W(t)e^{-iH_0t} \quad (9.141)$$

Soit $\gamma_n(t)$ les composantes de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ dans la base $|n\rangle$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \sum_n \gamma_n(t) |n\rangle \quad (9.142)$$

L'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = \tilde{W}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (9.143)$$

s'écrit en terme des composantes $\gamma_n(t)$. Compte tenu des équations (9.141) à (9.143), on obtient pour les coefficients γ_n le système d'équations différentielles

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\gamma}_n(t) &= \sum_l \langle n|\tilde{W}(t)|l\rangle\gamma_l(t) = \sum_l \langle n|W(t)|l\rangle e^{i(E_n - E_l)t/\hbar}\gamma_l(t) \\ &= \sum_l W_{nl}(t) e^{i\omega_{nl}t} \gamma_l(t) \end{aligned} \quad (9.144)$$

avec

$$W_{nl}(t) = \langle n|W(t)|l\rangle \quad \omega_{nl} = \frac{E_n - E_l}{\hbar} \quad (9.145)$$

Ces équations sont exactes, mais ne sont pas solubles analytiquement, sauf cas particulier. Il faut avoir recours à des approximations : nous allons suivre une méthode appelée la *théorie des perturbations dépendant du temps*. Il est commode d'introduire un paramètre réel λ , $0 \leq \lambda \leq 1$, qui multiplie la perturbation W : $W \rightarrow \lambda W$, ce qui permet de faire varier artificiellement la perturbation²⁰. La théorie des perturbations consiste à obtenir une solution approchée de l'équation de Schrödinger sous forme d'un développement en puissances de λ et on rétablit $\lambda = 1$ à la fin des calculs. Dans ce qui suit, nous allons nous contenter du premier ordre²¹ en λ . Au temps $t = 0$, le système est supposé dans l'état $|i\rangle$

$$\gamma_n(0) = \delta_{ni}$$

Écrivons

$$\gamma_n(t) = \delta_{ni} + \gamma_n^{(1)}(t)$$

Lorsque t est suffisamment petit, $|\gamma_n^{(1)}(t)| \ll 1$ car le système n'a pas eu le temps d'évoluer de façon appréciable. L'équation (9.145) devient en introduisant le paramètre λ

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\delta_{ni} + \gamma_n^{(1)}(t) \right) = \sum_l \lambda W_{nl}(t) \left[\delta_{li} + \gamma_l^{(1)}(t) \right] e^{i\omega_{nl}t}$$

On observe que $\gamma_l^{(1)}(t)$ est d'ordre λ , et que le terme $\sum_l \lambda W_{nl}(t)\gamma_l^{(1)}(t)$ sera donc d'ordre λ^2 . Ce terme est négligeable au premier ordre en λ , ce qui donne en rétablissant $\lambda = 1$

$$i\hbar\dot{\gamma}_n^{(1)}(t) \simeq W_{ni}(t) e^{i\omega_{ni}t} \quad (9.146)$$

Un cas particulier important est celui du potentiel oscillant

$$W(t) = A e^{-i\omega t} + A^\dagger e^{i\omega t} \quad (9.147)$$

20. Si la perturbation est due à l'interaction avec un champ extérieur, on peut la faire varier en ajustant ce champ.

21. La complexité des formules augmente très rapidement avec la puissance de λ .

où A est un opérateur. C'est par exemple ce type de potentiel qui décrit l'interaction d'un atome avec un champ électromagnétique oscillant

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} + \mathcal{E}_0^* e^{i\omega t}$$

Si nous nous intéressons comme au chapitre 5 à la transition $i \rightarrow f$ vers un niveau final $|f\rangle$ bien déterminé, l'amplitude de probabilité $\langle f|\psi(t)\rangle$ est donnée à un facteur de phase près par $\gamma_f(t) \simeq \gamma_f^{(1)}(t)$ qui est solution l'équation différentielle (9.146)

$$i\hbar\dot{\gamma}_f^{(1)}(t) = A_{fi} e^{-i(\omega-\omega_0)t} + A_{if}^* e^{i(\omega+\omega_0)t} \quad (9.148)$$

avec $\omega_0 = \omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$. Cette équation différentielle s'intègre immédiatement car les coefficients $A_{fi} = \langle f|A|i\rangle$ sont indépendants du temps

$$\gamma_f^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \left[A_{fi} \frac{e^{-i(\omega-\omega_0)t} - 1}{\omega - \omega_0} - A_{if}^* \frac{e^{i(\omega+\omega_0)t} - 1}{\omega + \omega_0} \right] \quad (9.149)$$

Cette amplitude de probabilité sera importante si $\omega \simeq \pm\omega_0$, c'est-à-dire, comme au chapitre 5, à la résonance. Dans le cas $\omega \simeq \omega_0$

$$E_f \simeq E_i + \hbar\omega$$

et le système absorbe une énergie $\hbar\omega$: s'il s'agit de l'interaction avec une onde électromagnétique, il absorbe un photon d'énergie $\hbar\omega$. Dans le cas $\omega \simeq -\omega_0$

$$E_f \simeq E_i - \hbar\omega$$

et le système fournit une énergie $\hbar\omega$, par exemple en émettant un photon²² d'énergie $\hbar\omega$. Pour fixer les idées, examinons le premier cas. La probabilité de transition $p_{i \rightarrow f}(t)$ vaut

$$p_{i \rightarrow f}(t) = |\gamma_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |A_{fi}|^2 t^2 f(\omega - \omega_0; t) \quad (9.150)$$

où la fonction f a été définie en (5.66)

$$f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \simeq \frac{2\pi}{t} \delta(\omega - \omega_0) \quad (9.151)$$

On retrouve les résultats du § 5.3.3 dans un cas plus général. Compte tenu des approximations, une condition nécessaire pour la validité de (9.150) est que $p_{i \rightarrow f}(t) \ll 1$. Cependant, il est en général impossible d'isoler une transition vers un état f particulier, et on s'intéresse le plus souvent à une transition vers un ensemble d'états finaux d'énergie voisine

$$\Gamma = \sum_f \Gamma_{i \rightarrow f}$$

22. Voir cependant la mise en garde de la note 27 du chapitre 1.

La sommation sur f est équivalente à une intégration sur l'énergie si on tient compte de la densité de niveaux $\mathcal{D}(E)$

$$\sum_f \rightarrow \int dE \mathcal{D}(E)$$

Par exemple si l'état final correspond à celui d'une particule et si $|A_{fi}|^2$ est isotrope, la densité de niveaux sera donnée par (9.136). Si $|A_{fi}|^2$ n'est pas isotrope, et dépend par exemple de la direction de l'impulsion \vec{p} de la particule finale, on utilisera

$$\mathcal{D}(E) = \frac{V m}{2\pi^2 \hbar^3} (2mE)^{1/2} \frac{d\Omega}{4\pi}$$

où Ω repère la direction de \vec{p} . Compte tenu de (9.150) et (9.151), nous obtenons une probabilité de transition par unité de temps Γ

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{1}{\hbar^2} \int dE |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E) t \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \\ &\simeq \frac{1}{\hbar} \int dE |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E) 2\pi \delta(E - (E_i + \hbar\omega)) \end{aligned}$$

En effectuant l'intégrale on obtient la règle d'or de Fermi

$$\boxed{\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E_f) \quad E_f = E_i + \hbar\omega} \quad (9.152)$$

Cette équation est aussi valable dans le cas d'émission d'énergie, en prenant $E_f = E_i - \hbar\omega$, et aussi pour un potentiel $W(t)$ constant, avec $E_f = E_i$ (exercice 9.6.11).

Les conditions de validité du calcul sont les suivantes.

- Il est nécessaire que la probabilité de trouver le système dans l'état initial (i) soit proche de un, soit

$$\sum_{f \neq i} p_{i \rightarrow f}(t) \ll 1 \quad \text{ou, en termes de } \Gamma_{i \rightarrow f} : \left(\sum_{f \neq i} \Gamma_{i \rightarrow f} \right) t \ll 1$$

ce qui implique que t doit être suffisamment court : $t \ll \tau_2$.

- Dans l'intégrale sur l'énergie E , on doit pouvoir remplacer $f(\omega - (E - E_i)/\hbar; t)$ par une fonction delta

$$\int dE g(E) f\left(\omega - \frac{E - E_i}{\hbar}; t\right) \rightarrow \int d\omega g(E) \frac{2\pi}{t} \delta(E - \hbar\omega_0) = \frac{2\pi}{t} g(E_f)$$

Si ΔE_1 est l'intervalle caractéristique de variation de $g(E) = |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E)$, $\tau_1 = \hbar/\Delta E_1$ doit être petit par rapport à t : $t \gg \tau_1$.

En résumé, il faut que t vérifie l'encadrement $\tau_1 \ll t \ll \tau_2$. Une application importante de la règle d'or de Fermi est la désintégration d'un état instable i (état excité d'un atome ou d'un noyau, particule instable. . .) vers un continuum d'états f . La perturbation est alors indépendante du temps et $E_f \simeq E_i$ dans (9.152). Pour des temps suffisamment courts, la probabilité de trouver le système dans l'état initial instable i est

$$p_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \simeq e^{-\Gamma t} \quad t \ll \tau_2 \quad (9.153)$$

et il est tentant d'identifier Γ à l'inverse de la vie moyenne τ : $\Gamma = \hbar/\tau$. Le calcul que nous venons d'effectuer ne nous permet pas cette identification, car il n'est pas *a priori* valable quel que soit t . On peut cependant justifier la loi exponentielle (9.153) pour des temps longs, grâce à une méthode due à Wigner et Weisskopf décrite à l'annexe B. Cette méthode montre que la dispersion en énergie ΔE sur l'énergie E_f des états finaux est $\Delta E = \hbar/2\tau = \hbar\Gamma/2$.

9.6 Exercices

9.6.1 Inégalités de Heisenberg

1. Soit $\varphi(x)$ une fonction de carré sommable normalisée à l'unité et $I(\alpha)$ la quantité positive ou nulle

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| x\varphi(x) + \alpha \frac{d\varphi}{dx} \right|^2 \geq 0$$

α étant un nombre réel. En intégrant par parties, montrer que

$$I(\alpha) = \langle X^2 \rangle - \alpha + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$$

où $K = -i\hbar/dx$ et

$$\langle X^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\varphi(x)|^2 \quad \langle K^2 \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

En déduire

$$\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$$

2. Comment faut-il modifier le raisonnement de la question précédente pour obtenir l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} ?$$

Montrer que $\Delta x \Delta k = 1/2$ implique que $\varphi(x)$ est une gaussienne

$$\varphi(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma^2 x^2\right)$$

9.6.2 Étalement du paquet d'ondes

1. Montrer que $[P^2, X] = -2i\hbar P$

2. Soit $\langle X^2 \rangle(t)$ la position quadratique moyenne dans l'état $|\varphi(t)\rangle$

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle \varphi(t) | X^2 | \varphi(t) \rangle$$

Montrer que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X^2 \rangle(t) &= \frac{1}{m} \langle PX + XP \rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left[\varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

Ces résultats sont-ils valables si le potentiel $V(x) \neq 0$?

3. Montrer que si la particule est libre ($V(x) = 0$)

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle X^2 \rangle(t) = \frac{2}{m^2} \langle P^2 \rangle = 2v_1^2 = \text{cste}$$

4. Dédurre de ces résultats

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle X^2 \rangle(t=0) + \xi_0 t + v_1^2 t^2 \quad \xi_0 = \left. \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} \right|_{t=0}$$

ainsi que l'expression de $(\Delta x(t))^2$

$$(\Delta x(t))^2 = (\Delta x(t=0))^2 + [\xi_0 - 2v_0 \langle X \rangle(t=0)]t + (v_1^2 - v_0^2)t^2$$

avec $v_0 = \langle P/m \rangle = \text{cste}$.

9.6.3 Paquet d'ondes gaussien

1. On suppose que la fonction $A(k)$ de (9.44) est une gaussienne

$$A(k) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(k - \bar{k})^2}{2\sigma^2} \right]$$

Montrer que

$$\int |A(k)|^2 dk = 1, \quad \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma$$

et que la fonction d'onde $\varphi(x, t=0)$ vaut

$$\varphi(x, t=0) = \frac{\sigma^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp \left[i\bar{k}x - \frac{1}{2} \sigma^2 x^2 \right]$$

Tracer la courbe représentative de $|\varphi(x, t=0)|^2$. Quelle est la largeur de cette courbe ? Identifier la dispersion Δx et vérifier que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

2. Calculer $\varphi(x, t)$. Montrer que si $\hbar\sigma^2 t/m \ll 1$ on a

$$\varphi(x, t) = \exp \left(\frac{i\hbar\bar{k}^2}{2m} t \right) \varphi(x - v_g t, 0) \quad v_g = \frac{\hbar\bar{k}}{m}$$

3. Calculer exactement $\varphi(x, t)$

$$\varphi(x, t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \sigma' \exp \left[i\bar{k}x - i\omega(\bar{k})t - \frac{1}{2} \sigma'^2 (x - v_g t)^2 \right]$$

avec

$$\frac{1}{\sigma'^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{m}$$

et en déduire $|\varphi(x, t)|^2$. Montrer que

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\sigma^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 \sigma^4 t^2}{m^2} \right)$$

Donner l'interprétation physique du résultat.

4. Un neutron sort d'un réacteur nucléaire avec une longueur d'onde de 0.1 nm. On suppose que sa fonction d'onde à $t = 0$ est un paquet d'ondes gaussien de largeur $\Delta x = 1$ nm. Au bout de combien de temps la largeur du paquet d'ondes aura-t-elle doublé? Quelle distance aura parcouru le neutron?

9.6.4 Heuristique de l'inégalité de Heisenberg

1. Si l'électron émis dans la désintégration β du neutron

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

était initialement enfermé dans le neutron dont le rayon $\simeq 0.5$ fm, quelle serait son énergie cinétique? Quelle conclusion peut-on en tirer?

2. Une particule quantique de masse m se déplace sur l'axe des x dans le potentiel harmonique

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Utiliser l'inégalité de Heisenberg pour estimer l'énergie de son état fondamental.

9.6.5 Potentiel de Lennard-Jones pour l'hélium

1. L'énergie potentielle de deux atomes séparés par une distance r est souvent bien représentée par le potentiel de Lennard-Jones

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

où ε et σ sont des paramètres ayant respectivement les dimensions d'une énergie et d'une longueur. Calculer la position r_0 du minimum du potentiel et tracer qualitativement $V(r)$. Montrer qu'au voisinage de $r = r_0$

$$V(r) \simeq -\varepsilon \left[1 - 36 \left(\frac{r - r_0}{r_0} \right)^2 \right] = \frac{1}{2} m\omega^2 (r - r_0)^2 + V_0$$

2. Dans le cas de l'hélium $\varepsilon \simeq 10^{-3}$ eV et $r_0 \simeq 0.3$ nm. Calculer la fréquence de vibration ω et l'énergie $\hbar\omega/2$ du niveau fondamental. Pourquoi l'hélium reste-t-il liquide même si la température $T \rightarrow 0$? Le raisonnement vaut-il pour les deux isotopes ^3He et ^4He ?

3. Pour l'hydrogène, $\varepsilon \simeq 4$ eV. Pourquoi l'hydrogène se solidifie-t-il à basse température? Que pensez-vous des gaz rares : argon, néon, etc.?

9.6.6 Marche de potentiel et retard à la réflexion

1. Cas $E > V_0$. On suppose que les particules sont envoyées de la gauche et arrivent sur la marche de potentiel : dans la région II, on trouve uniquement des particules se propageant vers la droite. Définissons

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

Les fonctions d'onde sont dans les régions I et II

$$\text{I} \quad \varphi(x) = e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{II} \quad \varphi(x) = C e^{ik'x}$$

Soit R le coefficient de réflexion et $T = 1 - R$ le coefficient de transmission. Montrer que

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad T = 1 - R = \frac{4kk'}{(k + k')^2}$$

Pourquoi n'a-t-on pas $T = |C|^2$? Vérifier que la conservation du courant est

$$\frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2 + \frac{\hbar k'}{m} |C|^2$$

2. Cas $E < V_0$. L'équation (9.74) donne le coefficient B de l'onde réfléchié quand une onde incidente $\exp(ikx)$ arrive sur une marche de potentiel avec une énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m) < V_0$, V_0 étant la hauteur de la marche de potentiel. Montrer que $|B| = 1$, $B = \exp(-i\phi)$. Déterminer ϕ et $d\phi/dE$.

3. On suppose que l'onde incidente est un paquet d'ondes du type (9.44)

$$\varphi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} A(k) \exp(ikx - i\omega(k)t)$$

Quel sera le paquet d'ondes réfléchi? En déduire que la réflexion se fait avec un retard

$$\tau = -\hbar \frac{d\phi}{dE} > 0$$

9.6.7 Potentiel en fonction δ

On considère un potentiel à une dimension de la forme

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x)$$

m étant la masse de la particule soumise au potentiel. Ce potentiel donne parfois une approximation commode. Par exemple il peut représenter une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0 , dans la limite où $a \rightarrow 0$ et $V_0 \rightarrow \infty$, le produit $V_0 a$ restant constant et égal à $\hbar^2 g / (2m)$. Dans le cas d'une barrière (potentiel répulsif), $g > 0$, mais on peut aussi modéliser un puits (potentiel attractif), auquel cas $g < 0$.

1. Montrer que g a pour dimension l'inverse d'une longueur.

2. La fonction $\varphi(x)$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g \delta(x) \right] \varphi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x)$$

Montrer que la dérivée de $\varphi(x)$ vérifie au voisinage de $x = 0$

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = g\varphi(0) \quad \varphi(0^\pm) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^\pm} \varphi(\varepsilon)$$

Supposant $g < 0$, montrer qu'il existe un état lié et un seul. Déterminer son énergie et la fonction d'onde correspondante. Montrer que l'on retrouve les résultats en prenant la limite du puits carré avec $V_0 a \rightarrow \hbar^2 |g| / (2m)$ et $a \rightarrow 0$.

3. Modèle pour une molécule diatomique. Supposant toujours $g < 0$, on modélise très grossièrement le potentiel auquel est soumis un électron d'une molécule diatomique par

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} [\delta(x+l) + \delta(x-l)]$$

La droite des noyaux est prise comme axe des x et les deux noyaux sont situés en $x = -l$ et $x = +l$. Montrer que l'on peut classer les solutions de l'équation de Schrödinger en solutions paires et impaires. Si la fonction d'onde est paire, montrer qu'il existe un seul état lié donné par

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 + e^{-2\kappa l}) \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Tracer qualitativement sa fonction d'onde. Si la fonction d'onde est impaire, déterminer l'équation donnant l'énergie des états liés

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 - e^{-2\kappa l})$$

Existe-t-il toujours un état lié? Sinon, quelle condition faut-il imposer? Tracer qualitativement la fonction d'onde lorsqu'il y a un état lié.

4. Puits double et effet tunnel. On reprend la question précédente en supposant que $\kappa l \gg 1$. Montrer que les deux états liés constituent un système à deux niveaux dont le hamiltonien est

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

et relier A à \sqrt{T} , où T est le coefficient de transmission par effet tunnel entre les deux puits.

5. Barrière de potentiel. On s'intéresse maintenant au cas $g > 0$, qui modélise une barrière de potentiel. Calculer la matrice de passage et donner l'expression du coefficient de transmission.

6. Potentiel périodique. Un électron se déplaçant dans un cristal à une dimension est soumis à un potentiel périodique de période l que l'on modélise par (9.106). Pour fixer les idées, on prendra $g > 0$. Utiliser les conditions sur $\varphi'(x)$ pour obtenir directement (9.108)

$$\cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

Montrer qu'il existe des régions interdites pour l'énergie. Tracer qualitativement l'énergie E_q en fonction de q .

9.6.8 Niveaux d'énergie du puits cubique infini en dimension $d = 3$

Déterminer l'énergie des six premiers niveaux d'énergie du puits cubique infini en fonction du côté L du cube ainsi que leur dégénérescence.

9.6.9 Courant de probabilité à trois dimensions

Montrer l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad \rho = |\varphi(\vec{r}, t)|^2$$

pour le courant (9.123).

9.6.10 Densité de niveaux

1. Calculer la densité de niveaux d'énergie $\mathcal{D}(E)$ en dimension $d = 2$. Montrer qu'elle est indépendante de E .

2. Calculer directement le nombre de niveaux $\Phi(E)$ dont l'énergie est inférieure à E , en comptant le nombre de niveaux possibles dans une sphère de rayon $|p| = \sqrt{2mE}$ dans l'espace des impulsions, et en prenant garde aux conditions aux limites. Retrouver l'expression (9.136) de $\mathcal{D}(E)$ par

$$\mathcal{D}(E) = \frac{d\Phi(E)}{dE}$$

3. Calculer la densité de niveaux d'énergie $\mathcal{D}(E)$ pour une particule ultrarelativiste dont l'énergie est donnée par $E = cp$. Généraliser au cas $E = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$. Montrer que d^3p/E est un invariant de Lorentz. En raison de cette invariance, cette expression est souvent prise comme densité de niveaux.

9.6.11 Règle d'or de Fermi

1. *Comparaison avec la formule de Rabi.* Dans un système à deux niveaux, la formule de Rabi (5.62) donne exactement la probabilité de transition entre deux niveaux sous l'effet d'une perturbation harmonique, par exemple

$$P_{+ \rightarrow -}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad \Omega^2 = [(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2]^{1/2}$$

Montrer que la formule approchée (9.150) s'obtient comme la limite de la formule de Rabi si

- $|\omega - \omega_0| \gg \omega_1$, c'est-à-dire loin de la résonance
- ou si $\omega_1 t \ll 1$, c'est-à-dire pour des temps assez courts.

2. *Potentiel constant.* Donner l'expression de l'amplitude (9.149) $\gamma^{(1)}(t)$ et de la probabilité de transition par unité de temps Γ lorsque le potentiel $W(t)$ de (9.147) est indépendant du temps.

9.6.12 Étude de l'expérience de Stern-Gerlach

1. *Étude classique.* Les notations sont celles du § 3.2.2. La trajectoire des atomes d'argent (figure 3.8) est supposée contenue dans le plan de symétrie yOz et voisine de l'axe Oy . Montrer que $\partial B_z / \partial x|_{x=0} = 0$ et que $\partial B_z / \partial y = 0$ si l'on néglige les effets de bord. Montrer qu'une forme approchée du champ magnétique vérifiant les équations de Maxwell dans l'entrefer de l'aimant au voisinage de $x = 0$ et $z = 0$ est

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + b(z\hat{z} - x\hat{x})$$

où $b = \partial B_z / \partial z|_{z=0}$. L'expression classique de la force est $\vec{F} = -\vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$. En déduire les composantes F_x , F_y et F_z . Montrer que sous l'effet de B_0 le moment magnétique $\vec{\mu}$ précesse autour de l'axe Oz avec une fréquence $\omega = |\gamma B_0|$, où γ est le facteur gyromagnétique, et que si $1/\omega$ est très petit par rapport au temps de transit de l'atome dans l'entrefer de l'aimant, alors la composante μ_x donne une force moyenne nulle : tout se passe comme si le moment magnétique était soumis à une force effective $\vec{F} = b\mu_z \hat{z}$.

2. Données numériques. Les atomes d'argent de masse $m = 1.8 \times 10^{-27}$ kg sortent du four avec une vitesse $v \simeq 500$ m.s⁻¹ et une dispersion des vitesses $\Delta v \sim 10$ m.s⁻¹. Les fentes collimatrices ont une hauteur $\Delta z = 10^{-4}$ m, la longueur de l'entrefer est $L = 5 \times 10^{-2}$ m, le champ magnétique $B_0 = 1$ T et $b = 10^4$ T.m⁻¹. Montrer que l'écart δ entre les deux trajectoires correspondant à $S_z = \hbar/2$ et $S_z = -\hbar/2$ à la sortie de l'entrefer vaut

$$\delta = \frac{\mu b}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2$$

Évaluer numériquement δ . Calculer le produit $\Delta z \Delta p_z$ et montrer que $\Delta z \Delta p_z \gg \hbar$. On peut donc traiter les trajectoires des atomes de façon classique.

3. Description quantique. Soit $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)$ la fonction d'onde d'un atome dont le spin est dans l'état $|\pm\rangle$. Montrer que φ_{\pm} vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \mp \mu B \right) \varphi_{\pm}$$

On définit la position moyenne $\langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t)$ et l'impulsion moyenne $\langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t)$ des paquets d'ondes $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)$ par

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t) &= \int d^3r \vec{r} |\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)|^2 \\ \langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t) &= \int d^3r \varphi_{\pm}^*(\vec{r}, t) \left[-i\hbar \vec{\nabla} \varphi_{\pm}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned}$$

Écrire les équations d'évolution de ces valeurs moyennes en calculant $d\langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t)/dt$ et $d\langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t)/dt$ à l'aide du théorème d'Ehrenfest (4.26). Montrer que l'écart δ entre les centres des deux paquets d'ondes est le même que celui calculé à la question 2 pour les trajectoires classiques.

4. Invariance par parité. Dans une configuration expérimentale où l'on analyse un spin dirigé suivant Oz à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach tel que $\vec{B} \parallel Ox$, on suppose que le spin est dévié préférentiellement dans la direction $x > 0$; par exemple $\langle S_x \rangle > 0$. En examinant l'image de l'expérience dans un miroir situé dans le plan xOy , montrer qu'une telle déviation préférentielle est exclue si les interactions pertinentes dans l'expérience sont invariantes par parité (ce qui est effectivement le cas).

9.6.13 Modèle de mesure de von Neumann

1. Dans le modèle de mesure quantique imaginé par von Neumann, on se propose de mesurer une grandeur physique A d'un système quantique S en faisant interagir ce système avec une particule (quantique) Π dont l'opérateur d'impulsion est P ; on se place pour simplifier à une dimension d'espace. Le hamiltonien d'interaction est supposé de la forme

$$H = g(t)AP$$

où $g(t)$ est une fonction positive présentant un pic aigu de largeur τ autour de $t = 0$ et telle que

$$g = \int_{-\infty}^{\infty} g(t) dt \simeq \int_{-\tau/2}^{\tau/2} g(t) dt$$

On suppose que l'on peut négliger l'évolution de S et de Π pendant la durée très courte τ de l'interaction entre S et Π , qui a lieu entre les temps t_i et t_f : $t_i \simeq -\tau/2$ et $t_f \simeq \tau/2$. En déduire l'opérateur d'évolution (4.14)

$$U(t_f, t_i) \simeq e^{-igAP/\hbar}$$

2. On suppose que l'état initial $S + \Pi$ est

$$|\psi(t_i)\rangle = |n \otimes \varphi\rangle$$

où $|n\rangle$ est un vecteur propre de A , dont le spectre est supposé pour simplifier non dégénéré, $A|n\rangle = a_n|n\rangle$, et $|\varphi\rangle$ un état de la particule localisé au voisinage d'un point x avec une dispersion Δx . Montrer que l'état final est

$$|\psi(t_f)\rangle = |n \otimes \varphi_n\rangle \quad \text{avec} \quad |\varphi_n\rangle = e^{-igAP/\hbar} |\varphi\rangle$$

Soit $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$ la fonction d'onde finale de la particule. Montrer que

$$\varphi_n(x) = \varphi(x - ga_n)$$

La fonction $\varphi_n(x)$ est donc localisée au voisinage du point $x - ga_n$, et si $g|a_n - a_m| \gg \Delta x$ quel que soit $n \neq m$, la position de la particule permet de remonter à la valeur a_n de A et effectue donc une mesure de A . L'état final de la particule est parfaitement corrélé à la valeur de A et à l'état final de S car les états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ sont orthogonaux pour $n \neq m$: $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$.

3. Quel est l'état final de Π si l'état initial de S est la superposition linéaire

$$|\chi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

Montrer que la probabilité d'observer S dans l'état final $|n\rangle$ est $|c_n|^2$: la mesure est idéale car elle ne modifie pas les probabilités $|c_n|^2$.

9.6.14 Transformation de Galilée

Considérons une onde plane classique, par exemple une vibration sonore, se propageant suivant l'axe des x

$$f(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

et une transformation de Galilée de vitesse v

$$x' = x + vt \quad t' = t$$

1. Montrer que pour une onde classique l'amplitude transformée $f'(x', t')$ vérifie

$$f'(x', t') = f(x, t)$$

d'où l'on tire la loi de transformation des vecteurs d'onde et des fréquences

$$k' = k \quad \omega' = \omega + vk$$

Quelle est l'interprétation physique de la loi de transformation des fréquences ? Supposons maintenant que l'on ait affaire à une onde de de Broglie pour une particule de masse m . Les relations précédentes sont-elles compatibles avec les lois de transformation de l'impulsion et de l'énergie

$$p' = p + mv \quad E' = E + pv + \frac{1}{2} mv^2 ?$$

2. Montrer que pour une onde de Broglie on ne doit pas exiger

$$\varphi'(x', t') = \varphi(x, t)$$

mais seulement

$$\varphi'(x', t') = \exp \left[\frac{if(x, t)}{\hbar} \right] \varphi(x, t)$$

En utilisant les relations (à démontrer)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} &= \frac{\partial}{\partial t} - v \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x'} &= \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

déterminer la forme de la fonction $f(x, t)$ en exigeant que si $\varphi(x, t)$ obéit à l'équation de Schrödinger, il en soit de même pour $\varphi'(x', t')$.

9.7 Bibliographie

Les résultats de ce chapitre sont très classiques et se retrouvent sous une forme voisine dans la plupart des traités de mécanique quantique. Parmi les exposés les plus clairs, on peut retenir celui de Merzbacher [1970], chapitre 6. Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 6, donnent également une discussion très complète et illustrée par de nombreux exemples. Voir aussi Messiah [1959], chapitre III, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre I ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 2 ; cette dernière référence est accompagnée d'un CD réalisé par M. Joffre, qui permet de visualiser le mouvement de paquets d'ondes. Pour la règle d'or de Fermi, on pourra consulter Messiah [1959], chapitre XVII ou Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre XIII.

Chapitre 10

Moment angulaire

DANS CE CHAPITRE, nous allons développer l'étude des propriétés du moment angulaire que nous avons introduit au chapitre 8. La propriété *fondamentale* du moment angulaire est d'être le générateur infinitésimal des rotations. Tous les résultats que nous allons obtenir dans ce chapitre sont des conséquences plus ou moins directes de cette propriété. Dans la section 10.1, nous construisons explicitement une base de vecteurs propres communs à \vec{J}^2 et à J_z , qui sont des opérateurs hermitiens compatibles. La rotation d'un état physique, que nous avons déjà introduite au chapitre 3 pour la polarisation d'un photon et pour le spin 1/2, sera traitée dans le cas général dans la section 10.2. La section 10.3 est consacrée au moment angulaire orbital, dont l'origine est le mouvement des particules dans l'espace. La section 10.4 transpose à la mécanique quantique les résultats classiques du mouvement dans une force centrale, tandis que la section 10.5 contient des applications aux désintégrations de particules et d'états excités. Enfin la section 10.6 développe l'addition des moments angulaires.

N. B. Dans tout ce chapitre, on utilisera un système d'unités où $\hbar = 1$.

10.1 Diagonalisation de \vec{J}^2 et de J_z

Nous avons établi au chapitre 8 les relations de commutation (8.31) et (8.32) entre les différentes composantes du moment angulaire, que nous rappelons ci-dessous dans un système d'unités où $\hbar = 1$ (rappelons qu'un moment angulaire a la dimension de \hbar , et c'est pourquoi les notations se simplifient dans un tel système d'unités)

$$\boxed{[J_x, J_y] = iJ_z \quad [J_y, J_z] = iJ_x \quad [J_z, J_x] = iJ_y} \quad (10.1)$$

ou

$$\boxed{[J_k, J_l] = i \sum_m \varepsilon_{klm} J_m} \quad (10.2)$$

La seule connaissance de ces relations de commutation va nous permettre de diagonaliser le moment angulaire, c'est-à-dire trouver les vecteurs propres et les valeurs propres de combinaisons convenablement choisies de J_x , J_y et J_z . Comme ces trois opérateurs ne commutent pas entre eux, on ne peut évidemment pas les diagonaliser simultanément : les trois composantes de \vec{J} sont mutuellement incompatibles. Une autre observation est que \vec{J}^2 est un opérateur scalaire et, d'après (8.33), un tel opérateur commute avec les trois composantes de \vec{J}

$$[\vec{J}^2, J_k] = 0 \quad (10.3)$$

ce que l'on peut vérifier par un calcul explicite (exercice 10.7.1). On choisit en général de diagonaliser simultanément \vec{J}^2 et J_z : c'est ce que l'on appelle souvent *quantifier le moment angulaire suivant Oz*. On dit aussi que l'axe Oz est *choisi comme axe de quantification du moment angulaire*. Il est commode de définir les opérateurs $J_{\pm} = J_{\mp}^{\dagger}$ par

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (10.4)$$

On vérifie immédiatement les relations de commutation et les identités suivantes

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \quad (10.5)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z \quad (10.6)$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_-J_+ + J_+J_-) + J_z^2 \quad (10.7)$$

$$J_+J_- = \vec{J}^2 - J_z(J_z - 1) \quad (10.8)$$

$$J_-J_+ = \vec{J}^2 - J_z(J_z + 1) \quad (10.9)$$

Ces relations nous seront utiles pour la diagonalisation. Soit $|jm\rangle$ un vecteur propre de \vec{J}^2 et de J_z , où j étiquette la valeur propre de \vec{J}^2 et m celle de J_z . Comme \vec{J}^2 est un opérateur positif, ses valeurs propres sont ≥ 0 , et on les écrit sous la forme $j(j+1)$ avec $j \geq 0$; on justifiera bientôt cette écriture des valeurs propres de \vec{J}^2 . Le nombre m est appelé *nombre quantique magnétique*. En résumé

$$\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle \quad (10.10)$$

$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle \quad (10.11)$$

D'après (10.5), les vecteurs $J_{\pm}|jm\rangle$ sont vecteurs propres de J_z avec la valeur propre $m \pm 1$

$$\begin{aligned} J_z[J_{\pm}|jm\rangle] &= (J_{\pm}J_z \pm J_{\pm})|jm\rangle = J_{\pm}(m \pm 1)|jm\rangle \\ &= (m \pm 1)[J_{\pm}|jm\rangle] \end{aligned}$$

De même, comme $[\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0$

$$\vec{J}^2[J_{\pm}|jm\rangle] = j(j+1)[J_{\pm}|jm\rangle]$$

Nous venons de montrer que les vecteurs $J_{\pm}|jm\rangle$ sont vecteurs propres de \vec{J}^2 avec la valeur propre $j(j+1)$ et de J_z avec la valeur propre $m \pm 1$. De plus, supposant $|jm\rangle$ unitaire : $\langle jm|jm\rangle = 1$, on peut calculer la norme de $J_+|jm\rangle$ à partir de (10.9)

$$\begin{aligned} \|J_+|jm\rangle\|^2 &= \langle jm|J_-J_+|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_z(J_z + 1)|jm\rangle \\ &= j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \geq 0 \end{aligned} \quad (10.12)$$

et celle de $J_-|jm\rangle$ à partir de (10.8)

$$\begin{aligned} \|J_-|jm\rangle\|^2 &= \langle jm|J_+J_-|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_z(J_z - 1)|jm\rangle \\ &= j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1) \geq 0 \end{aligned} \quad (10.13)$$

La positivité n'est assurée simultanément pour les deux normes que si $-j \leq m \leq j$. Partant de $|jm\rangle$, par application répétée de J_+ , on obtient une série de vecteurs propres communs à \vec{J}^2 et J_z , étiquetés par $(j, m+1)$, $(j, m+2)$, etc. Ces vecteurs propres ont une norme positive tant que $m \leq j$, mais la norme deviendrait négative pour $m > j$. Il faut donc que la série s'arrête, ce qui n'est possible que si l'un des vecteurs $(J_+)^n|jm\rangle$ s'annule pour une valeur entière de $n = n_1 + 1$ telle que $m + n_1 = j$

$$J_+[(J_+)^{n_1}|jm\rangle] = 0$$

Le même raisonnement avec J_- montre qu'il doit exister un entier n_2 tel que

$$J_-[(J_-)^{n_2}|jm\rangle] = 0$$

Des relations

$$j = m + n_1 \qquad -j = m - n_2$$

on déduit que $2j$, et donc $(2j+1)$ doit être un nombre entier, d'où le théorème de diagonalisation de \vec{J}^2 et de J_z .

Théorème : Les valeurs possibles de j sont entières ou demi-entières : $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Si $|jm\rangle$ est vecteur propre commun à \vec{J}^2 et J_z , m prend nécessairement l'une des $(2j+1)$ valeurs

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j \quad \blacksquare$$

Lorsque j prend les valeurs $0, 1, 2, \dots$ on dit que le moment angulaire est entier, et qu'il est demi-entier¹ lorsque $j = 1/2, 3/2, \dots$. Examinons la normalisation et la phase des vecteurs $|jm\rangle$. Partant d'un vecteur $|jm\rangle$ on construit par

1. Bien que la moitié d'un entier pair soit aussi un demi-entier...

application répétée de J_+ et de J_- une série de $(2j+1)$ vecteurs orthogonaux, sous-tendant un sous-espace vectoriel à $(2j+1)$ dimensions $\mathcal{E}(j)$ de \mathcal{H} . Ces vecteurs ne sont pas de norme unité, mais si l'on définit $|j, m-1\rangle$ par

$$|j, m-1\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{-1/2} J_- |jm\rangle \quad (10.14)$$

alors $|j, m-1\rangle$ est bien de norme unité d'après (10.13). D'autre part, en utilisant (10.8)

$$\begin{aligned} J_+ J_- |jm\rangle &= [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} J_+ |j, m-1\rangle \\ &= [j(j+1) - m(m-1)] |jm\rangle \end{aligned}$$

soit

$$J_+ |j, m-1\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} |jm\rangle$$

ou bien, avec la substitution $m \rightarrow m+1$

$$J_+ |jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} |j, m+1\rangle \quad (10.15)$$

Les relations (10.14) ou (10.15) fixent complètement la phase relative des vecteurs $|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \dots, |j, -j\rangle$. Une base de $\mathcal{E}(j)$ formée de vecteurs $|jm\rangle$ qui satisfont à (10.14) ou (10.15) est appelée *base standard* $|jm\rangle$.

Il peut arriver que la donnée de (j, m) ne suffise pas à spécifier de façon unique un vecteur de \mathcal{H} : \vec{J}^2 et J_z ne forment pas un ensemble complet de propriétés physiques compatibles. Nous en verrons un exemple au § 10.4.2 avec l'atome d'hydrogène : la donnée du moment angulaire (orbital), noté dans ce cas l , ne suffit pas à spécifier un état lié, il faut en plus se donner un nombre quantique $n = l+1, l+2, \dots$, ou nombre quantique principal. En général on doit utiliser un nombre quantique, ou un ensemble de nombres quantiques supplémentaires τ pour étiqueter des vecteurs propres $|j, m=j\rangle$ de \vec{J}^2 et de J_z , normalisés par

$$\langle \tau, j, j | \tau', j, j \rangle = \delta_{\tau, \tau'}$$

Par application répétée de J_- on forme une base standard de $\mathcal{E}(\tau, j)$

$$|\tau, j, j\rangle, |\tau, j, j-1\rangle, \dots, |\tau, j, -j+1\rangle, |\tau, j, -j\rangle$$

Résumons les propriétés essentielles d'une base standard $|\tau, jm\rangle$

$$\vec{J}^2 |\tau, jm\rangle = j(j+1) |\tau, jm\rangle \quad J_z |\tau, jm\rangle = m |\tau, jm\rangle \quad (10.16)$$

$$J_+ |\tau, jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} |\tau, j, m+1\rangle \quad (10.17)$$

$$J_- |\tau, jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} |\tau, j, m-1\rangle \quad (10.18)$$

$$J_+ |\tau, j, j\rangle = 0 \quad J_- |\tau, j, -j\rangle = 0 \quad (10.19)$$

$$\langle \tau', j' m' | \tau, jm \rangle = \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} \delta_{m' m} \quad (10.20)$$

Nous supprimerons par la suite l'indice τ qui ne jouera aucun rôle dans ce chapitre. Les éléments de matrice de \vec{J}^2 , J_z et J_{\pm} dans une base standard sont

$$\langle j'm' | \vec{J}^2 | jm \rangle = j(j+1)\delta_{j'j}\delta_{m'm} \quad (10.21)$$

$$\langle j'm' | J_z | jm \rangle = m\delta_{j'j}\delta_{m'm} \quad (10.22)$$

$$\langle j'm' | J_{\pm} | jm \rangle = [j(j+1) - mm']^{1/2}\delta_{j'j}\delta_{m',m\pm 1} \quad (10.23)$$

Dans le sous-espace $\mathcal{E}(j)$ où \vec{J}^2 a une valeur propre $j(j+1)$ fixée, les opérateurs J_z et J_{\pm} sont représentés par des matrices $(2j+1) \times (2j+1)$, la matrice représentant J_z étant diagonale. Il est instructif (exercice 10.7.4) d'expliciter ces matrices dans le cas $j = 1/2$ et de retrouver les matrices 2×2 (3.47) du spin $1/2$, ainsi que dans le cas $j = 1$, où l'on retrouve les générateurs infinitésimaux des rotations dans l'espace à trois dimensions : la loi de transformation d'un vecteur est celle d'un moment angulaire $j = 1$. L'équation (10.23) donne pour les générateurs infinitésimaux du cas $j = 1$ (exercice 10.7.4)

$$\boxed{J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \quad (10.24)$$

Ces générateurs infinitésimaux ont superficiellement une forme différente de celle des générateurs T_i déterminés en (8.26). En fait ils y sont reliés par la transformation unitaire (10.64) qui fait passer des composantes cartésiennes de \hat{r} à ses composantes sphériques : exercice 10.7.4.

10.2 Matrices de rotation

Nous avons vu au chapitre 3 comment faire tourner un spin $1/2$: partant d'un état $|+\rangle$ obtenu à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à Oz , nous savons construire grâce à (3.57) l'état $|+, \hat{n}\rangle$ obtenu à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à \hat{n} . On fait agir sur l'état $|+\rangle$ un opérateur de rotation $U[\mathcal{R}]$ qui transforme $|+\rangle$ en $|+, \hat{n}\rangle$

$$|+, \hat{n}\rangle = U[\mathcal{R}]|+\rangle = |+\rangle_{\mathcal{R}}$$

La rotation \mathcal{R} amène l'axe Oz sur la direction \hat{n} ; cette rotation n'est pas unique, et nous verrons que cette absence d'unicité correspond à l'arbitraire de phase dans la définition de $|+, \hat{n}\rangle$. Un autre exemple de rotation d'un état physique a été donné au chapitre 3 dans le cas de la polarisation d'un photon : partant d'un état de polarisation linéaire $|x\rangle$, on obtient un état de polarisation linéaire $|\theta\rangle$ en lui appliquant un opérateur de rotation $U[\mathcal{R}_z(\theta)]$

correspondant à une rotation d'angle θ autour de la direction de propagation Oz du photon (3.29)

$$|\theta\rangle = \exp(-i\theta\Sigma_z)|x\rangle = U[\mathcal{R}_z(\theta)]|x\rangle$$

Dans le cas général, l'état $|\varphi\rangle_{\mathcal{R}}$ transformé par une rotation \mathcal{R} d'un état $|\varphi\rangle$ est

$$|\varphi\rangle_{\mathcal{R}} = U[\mathcal{R}]|\varphi\rangle$$

Nous allons donner la forme matricielle explicite des opérateur de rotation $U[\mathcal{R}]$ dans la base $|jm\rangle$. L'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}]$ s'exprime en fonction des générateurs infinitésimaux J_x , J_y et J_z : cf. (8.30). Comme les composantes de \vec{J} commutent avec \vec{J}^2 , le commutateur $[U(\mathcal{R}), \vec{J}^2] = 0$ et les éléments de matrice de U sont nuls si $j \neq j'$

$$\langle j'm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle \propto \delta_{j',j}$$

Dans le sous-espace $\mathcal{E}(j)$, l'opérateur $U(\mathcal{R})$ sera représenté par une matrice $(2j+1) \times (2j+1)$ notée $D^{(j)}[\mathcal{R}]$. Ses éléments de matrice sont

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}] = \langle jm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle \quad (10.25)$$

Les matrices $D^{(j)}$ sont appelées *matrices de rotation*, ou *matrices de Wigner*. Examinons la transformation par rotation d'un état $|jm\rangle$ qui donne le vecteur $|jm\rangle_{\mathcal{R}}$

$$|jm\rangle_{\mathcal{R}} = U[\mathcal{R}]|jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle \langle jm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle$$

où l'on a remarqué que dans la relation de fermeture

$$\sum_{j',m'} |j'm'\rangle \langle j'm'| = I$$

seuls les termes $j = j'$ contribuent. On peut donc écrire

$$\boxed{|jm\rangle_{\mathcal{R}} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}]|jm'\rangle} \quad (10.26)$$

Rappelons les propriétés de groupe des opérateurs $U[\mathcal{R}]$: dans le cas d'une représentation vectorielle (8.12)

$$U[\mathcal{R}_2]U[\mathcal{R}_1] = U[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] \quad (10.27)$$

et dans celui d'une représentation spinorielle (8.13)

$$U[\mathcal{R}_2]U[\mathcal{R}_1] = \pm U[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] \quad (10.28)$$

Nous montrerons à la fin de ce paragraphe que (10.27) correspond au cas d'un moment angulaire entier et (10.28) à celui d'un moment angulaire demi-entier.

À la propriété de groupe pour les opérateurs U correspond une propriété analogue pour les matrices de rotation

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] = \pm \sum_{m''} D_{m'm''}^{(j)}[\mathcal{R}_2]D_{m''m}^{(j)}[\mathcal{R}_1]$$

Revenons à l'étude de la rotation qui amène l'axe Oz dans la direction \hat{n} d'angles polaire et azimutal (θ, ϕ)

$$\hat{n}_x = \sin \theta \cos \phi \quad \hat{n}_y = \sin \theta \sin \phi \quad \hat{n}_z = \cos \theta \quad (10.29)$$

Nous allons choisir *par convention* la rotation suivante : \mathcal{R} , noté $\mathcal{R}(\theta, \phi)$, sera le produit d'une première rotation d'angle θ autour de Oy suivie d'une rotation de ϕ autour de Oz (figure 10.1)

$$\boxed{\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_z(\phi)\mathcal{R}_y(\theta)} \quad (10.30)$$

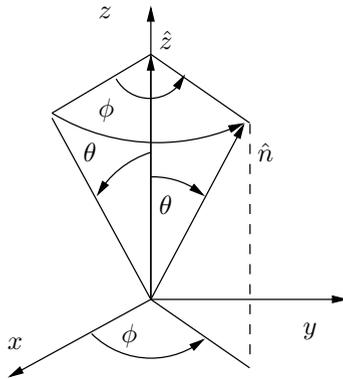


FIG. 10.1 – Rotation $\mathcal{R}(\theta, \phi)$ amenant l'axe Oz sur \hat{n} .

Compte tenu de (10.30) et de la loi de groupe, l'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}(\theta, \phi)]$ est donné en fonction des générateurs infinitésimaux J_y et J_z par

$$U[\mathcal{R}(\theta, \phi)] = e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} \quad (10.31)$$

et ses éléments de matrice dans une base $|jm\rangle$ par

$$\boxed{D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}(\theta, \phi)] = \langle jm' | e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} | jm \rangle} \quad (10.32)$$

Cette équation se simplifie en

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}(\theta, \phi)] \equiv D_{m'm}^{(j)}(\theta, \phi) = e^{-im'\phi} \langle jm' | e^{-i\theta J_y} | jm \rangle \quad (10.33)$$

$$= e^{-im'\phi} d_{m'm}^{(j)}(\theta) \quad (10.34)$$

Nous avons défini la matrice $d^{(j)}(\theta)$ par

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = \langle jm' | e^{-i\theta J_y} | jm \rangle} \quad (10.35)$$

Les matrices $d^{(j)}$ vérifient une propriété de groupe déduite de celle des matrices $D^{(j)}$

$$d_{m'm}^{(j)}(\theta_2 + \theta_1) = \sum_{m''} d_{m'm''}^{(j)}(\theta_2) d_{m''m}^{(j)}(\theta_1)$$

Il n'y a pas de signe \pm dans cette équation car l'angle de rotation peut être supérieur à 2π .

Nous avons déjà mentionné l'arbitraire dans le choix de la rotation (θ, ϕ) : nous aurions pu effectuer une première rotation d'un angle ψ autour de Oz sans modifier l'axe \hat{n} final. Le nouvel opérateur de rotation serait

$$U[\mathcal{R}'] = U[\mathcal{R}(\theta, \phi)] e^{-i\psi J_z}$$

et le résultat (10.26) serait modifié par le facteur de phase $\exp(-im\psi)$. La définition la plus générale des matrices de rotation fait intervenir trois angles, appelés angles d'Euler, (ϕ, θ, ψ) , et notre convention correspond au choix d'angles d'Euler² $(\phi, \theta, 0)$.

Dans la base $|jm\rangle$, iJ_y est représenté par une matrice réelle, car d'après (10.23) les éléments de matrice de J_+ et de J_- sont réels et

$$J_y = -\frac{i}{2}(J_+ - J_-)$$

La matrice $\exp(-i\theta J_y)$ est aussi une matrice réelle et la propriété de groupe

$$U^\dagger[\mathcal{R}] = U^{-1}[\mathcal{R}] = U[\mathcal{R}^{-1}]$$

se traduit par

$$\left[d^{(j)}(\theta) \right]^\dagger = \left[d^{(j)}(-\theta) \right]$$

ce qui donne pour les éléments de matrice

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = d_{mm'}^{(j)}(-\theta)} \quad (10.36)$$

Il existe une autre propriété de symétrie (exercice 10.7.12)

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = (-1)^{m-m'} d_{-m', -m}^{(j)}(\theta)} \quad (10.37)$$

2. La notation habituelle pour les matrices de rotation est

$$D^{(j)}(\theta, \phi) \rightarrow D^{(j)}(\phi, \theta, \psi = 0)$$

Enfin on peut montrer que les matrices $D^{(j)}$ forment une représentation dite *irréductible* du groupe des rotations, c'est-à-dire que tout vecteur de $\mathcal{E}(j)$ peut être obtenu à partir d'un vecteur arbitraire de cet espace par application d'une matrice de rotation $D^{(j)}$, et que toute matrice commutant avec toutes les matrices $D^{(j)}$ est multiple de la matrice identité.

Le test pour la présence du facteur \pm dans (10.28) est donné par l'examen des rotations de 2π : ce facteur apparaît lorsqu'une rotation de 2π est représentée par l'opérateur $-I$ dans l'espace $\mathcal{E}(j)$. Examinons une rotation de 2π autour de l'axe Oz

$$\begin{aligned} \langle jm' | U[\mathcal{R}_z(2\pi)] | jm \rangle &= e^{-2i\pi m} \delta_{m'm} = \delta_{m'm} \quad j \text{ entier} \\ &= e^{-2i\pi m} \delta_{m'm} = -\delta_{m'm} \quad j \text{ demi-entier} \end{aligned}$$

Comme le choix de l'axe Oz est arbitraire, l'opérateur de rotation d'angle 2π vaut I pour j entier et $-I$ pour j demi-entier. En revanche les opérateurs de rotation d'angle 4π sont égaux à I pour toute valeur de j . Examinons deux rotations successives d'angles θ_1 et θ_2 autour d'un axe \hat{n} , avec

$$\theta_1 + \theta_2 = \theta + 2\pi n \quad 0 \leq \theta < 2\pi \quad n \text{ entier} \geq 0$$

Des équations

$$\begin{aligned} e^{-i(\theta_1+\theta_2)\vec{J}\cdot\hat{n}} &= e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} e^{-2i\pi n(\vec{J}\cdot\hat{n})} = e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} \quad j \text{ entier} \\ &= (-1)^n e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} \quad j \text{ demi-entier} \end{aligned}$$

on déduit que (10.27) est valable pour j entier et (10.28) pour j demi-entier. En d'autres termes, à toute rotation \mathcal{R} correspondent deux opérateurs de rotation de signe opposé pour j demi-entier, et un seul pour j entier.

Dans le cas du spin $1/2$, vérifions que nous retrouvons bien la matrice $D^{(1/2)}(\theta, \phi)$ déjà calculée au chapitre 3. La matrice $d^{(1/2)}(\theta)$ vaut d'après (3.59)

$$d^{(1/2)}(\theta) = \exp(-i\theta\sigma_y/2) = \cos \frac{\theta}{2} I - i\sigma_y \sin \frac{\theta}{2}$$

ou sous forme explicite

$$d^{(1/2)}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & -\sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (10.38)$$

les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre $m = 1/2, -1/2$; l'équation(10.33) donne alors la matrice $D^{(j)}(\theta, \phi)$

$$D^{(1/2)}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 & -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 & e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix}$$

en accord avec (3.58).

La matrice de rotation $d^{(1)}(\theta)$ d'un moment angulaire $j = 1$ s'obtient à partir de l'expression (10.24) des générateurs infinitésimaux pour le moment angulaire un, les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre $m = 1, 0, -1$ (exercice 10.7.4)

$$d^{(1)}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \end{pmatrix} \quad (10.39)$$

On vérifie que les matrices $d^{(1/2)}$ et $d^{(1)}$ obéissent aux propriétés de symétrie (10.36) et (10.37).

10.3 Moment angulaire orbital

10.3.1 Opérateur moment angulaire orbital

Considérons un champ scalaire classique $\psi(\vec{r})$ et faisons lui subir une rotation $R_z(\phi)$ d'angle ϕ autour de Oz ; soit $\vec{r}' = \mathcal{R}\vec{r}$ le vecteur transformé du vecteur \vec{r} dans cette rotation

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \phi - y \sin \phi \\ y' &= x \sin \phi + y \cos \phi \\ z' &= z \end{aligned}$$

La valeur du champ scalaire transformé $\psi'(\vec{r}')$ au point \vec{r}' doit être identique à sa valeur au point \vec{r}

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r})$$

ou encore

$$\boxed{\psi'(\vec{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})} \quad (10.40)$$

Cette loi de transformation est correcte pour un champ scalaire classique, mais si $\psi(\vec{r})$ est une fonction d'onde, $\psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$ et $\psi'(\vec{r})$ pourraient *a priori* différer par un facteur de phase

$$\psi'(\vec{r}) = e^{i\theta(\vec{r})} \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$$

(voir la discussion suivant (9.17)). En toute rigueur nous savons seulement que $|\psi'(\vec{r}')| = |\psi(\vec{r})|$ et nous devons montrer que le facteur de phase éventuel est absent. Le vecteur $U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle$ représente physiquement un état propre de l'opérateur position \vec{R} , obtenu à partir de l'état propre $|\vec{r}\rangle$ de \vec{R} par une rotation $U(\mathcal{R})$. Vérifions-le explicitement en utilisant le fait que \vec{R} est un opérateur vectoriel dont les composantes X_k se transforment suivant (8.34)

$$\begin{aligned} X_k[U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle] &= U(\mathcal{R})U^{-1}(\mathcal{R})X_kU(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle \\ &= U(\mathcal{R})\left(\sum_l \mathcal{R}_{kl}X_l\right)|\vec{r}\rangle = U(\mathcal{R})\left(\sum_l \mathcal{R}_{kl}x_l\right)|\vec{r}\rangle \\ &= (\mathcal{R}\vec{r})_k[U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle] \end{aligned}$$

ce qui montre que l'on peut définir le vecteur d'état $|\mathcal{R}\vec{r}\rangle$, c'est-à-dire fixer sa phase, par

$$|\mathcal{R}\vec{r}\rangle \equiv U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle \quad (10.41)$$

Si $|\psi'\rangle$ est le transformé par $U(\mathcal{R})$ de $|\psi\rangle$: $|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | U(\mathcal{R}) | \psi \rangle = \langle U^\dagger(\mathcal{R})\vec{r} | \psi \rangle \\ &= \langle U^{-1}(\mathcal{R})\vec{r} | \psi \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1}\vec{r} | \psi \rangle = \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r}) \end{aligned}$$

ce qui démontre (10.40). À première vue l'argument \mathcal{R}^{-1} dans (10.40) qui s'écrit aussi

$$[U(\mathcal{R})\psi](\vec{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$$

peut surprendre, mais nous avons déjà rencontré une situation analogue pour les translations dans l'équation (9.15), écrite ci-dessous dans le cas de la dimension 3 avec $\hbar = 1$

$$\left[e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}} \psi \right](\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a})$$

alors que³

$$e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}} |\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{a}\rangle$$

La transformée par translation de \vec{a} de la fonction $\psi(\vec{r})$ est bien $\psi(\vec{r} - \vec{a})$ et non $\psi(\vec{r} + \vec{a})$! Si l'angle de rotation ϕ devient infinitésimal pour une rotation autour de Oz

$$U[\mathcal{R}_z(\phi)] \simeq I - i\phi J_z$$

et d'après (10.40)

$$\begin{aligned} [(I - i\phi J_z)\psi](\vec{r}) &\simeq \psi(x + y\phi, -x\phi + y, z) \\ &\simeq \psi(\vec{r}) + \phi \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\ &= \psi(\vec{r}) - i\phi(XP_y - YP_x)\psi \end{aligned}$$

d'où

$$[J_z\psi](\vec{r}) = [(XP_y - YP_x)\psi](\vec{r}) = [(\vec{R} \times \vec{P})_z\psi](\vec{r}) = (\vec{L}_z\psi)(\vec{r}) \quad (10.42)$$

L'opérateur moment angulaire de la particule décrite par une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ est appelé *moment angulaire orbital* (car associé au mouvement d'une particule sur une orbite dans l'espace), et il est en général noté \vec{L}

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \quad (10.43)$$

\vec{L} a été construit comme générateur infinitésimal de rotations et vérifie nécessairement les relations de commutation d'un moment angulaire (10.1) ou (10.2)

$$[L_j, L_k] = i \sum_l \varepsilon_{jkl} L_l \quad (10.44)$$

3. On remarquera que cette équation fixe la phase du vecteur $|\vec{r} + \vec{a}\rangle$ relativement à celle de $|\vec{r}\rangle$, de même que (10.41) fixe la phase de $|\mathcal{R}\vec{r}\rangle$ relativement à celle de $|\vec{r}\rangle$.

On peut vérifier ces relations par un calcul explicite utilisant les relations de commutation canoniques (8.45) : exercice 10.7.5. On note $|lm\rangle$ les vecteurs propres de \vec{L}^2 et de L_z

$$\vec{L}^2|lm\rangle = l(l+1)|lm\rangle \quad (10.45)$$

$$L_z|lm\rangle = m|lm\rangle \quad (10.46)$$

Ces équations peuvent être transformées en équations différentielles, si l'on écrit les opérateurs L_j sous forme d'opérateurs différentiels agissant dans $L^{(2)}(\mathbb{R}^3)$. Le calcul est laborieux si l'on effectue le changement de variables $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$ mais il se simplifie si l'on utilise la propriété des L_i d'être les générateurs infinitésimaux des rotations. Le cas de L_z est particulièrement simple : considérant ψ comme fonction de (r, θ, ϕ) nous avons

$$(e^{-i\alpha L_z} \psi) = \psi(r, \theta, \phi - \alpha)$$

et en prenant α infinitésimal

$$([I - i\alpha L_z]\psi)(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi) - \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \phi}$$

soit $L_z\psi = -i(\partial\psi/\partial\phi)$. Le calcul de L_x et L_y prend quelques lignes de plus, car dans une rotation autour de Ox ou autour de Oy les angles θ et ϕ varient tous les deux ; on trouve (exercice 10.7.5)

$$L_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (10.47)$$

$$L_{\pm} = i e^{\pm i\phi} \left(\cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \mp i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (10.48)$$

$$\vec{L}^2 = - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (10.49)$$

Les opérateurs L_j dépendent seulement des angles, et non de r , d'où la dénomination *moment angulaire*. Les fonctions propres de \vec{L}^2 et de L_z ne dépendent que des angles θ et ϕ ou, de façon équivalente, de \hat{r} . Ces fonctions propres sont appelées *harmoniques sphériques*

$$Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{r}) = \langle \hat{r} | lm \rangle \quad (10.50)$$

Les équations (10.45) et (10.46) deviennent

$$[\vec{L}^2 Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | \vec{L}^2 | lm \rangle = l(l+1) Y_l^m(\hat{r}) \quad (10.51)$$

$$[L_z Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | L_z | lm \rangle = m Y_l^m(\hat{r}) \quad (10.52)$$

tandis que (10.15) s'écrit

$$[L_{\pm} Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | L_{\pm} | lm \rangle = [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_l^{m \pm 1}(\hat{r})$$

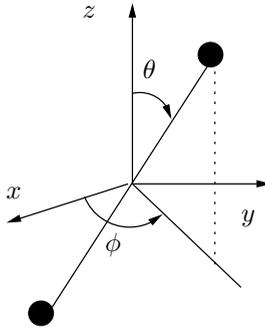


FIG. 10.2 – Rotateur sphérique.

L'équation (10.52) devient, compte tenu de (10.47)

$$[L_z Y_l^m](\theta, \phi) = -i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi)$$

ce qui implique

$$Y_l^m(\theta, \phi) = e^{im\phi} f_l^m(\theta) \quad (10.53)$$

La loi de transformation (10.40) montre que dans une rotation de 2π la fonction d'onde est inchangée. et qu'il ne s'introduit donc aucun signe $(-)$ dans une telle rotation. Ceci implique que *les moments angulaires orbitaux sont toujours entiers*.

Une application simple et importante est le rotateur sphérique : considérons une molécule diatomique en rotation autour de son centre de masse pris comme origine des coordonnées (figure 10.2 et exercice 1.6.1). Son moment d'inertie est $I = \mu r_0^2$, où μ est la masse réduite et r_0 la distance entre les noyaux (la contribution des électrons est négligeable). Si ω est la vitesse angulaire de rotation, le hamiltonien classique H_{cl} est

$$H_{cl} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{(I\omega)^2}{I} = \frac{l^2}{2I}$$

où $l = I\omega$ est le moment angulaire. La version quantique du hamiltonien est

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

et les valeurs de l'énergie sont

$$E_l = \frac{l(l+1)}{2I} \quad (10.54)$$

Les fonctions propres sont les $Y_l^m(\theta, \phi)$, où les angles θ et ϕ donnent l'orientation de la droite joignant les deux noyaux : $Y_l^m(\theta, \phi)$ est l'amplitude pour

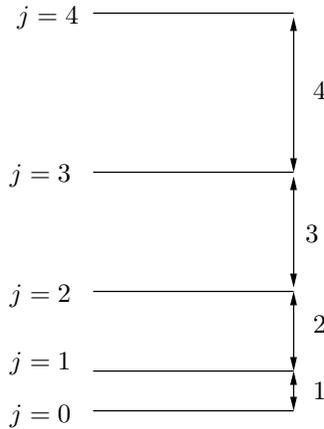


FIG. 10.3 – Spectre du rotateur sphérique. Le niveau j est séparé du niveau $(j - 1)$ par j/I , ou $\hbar^2 j/I$ si l'on rétablit \hbar .

trouver cette droite orientée suivant la direction (θ, ϕ) . Le spectre des niveaux de rotation est donné dans la figure 10.3, et il reproduit bien les données expérimentales sur les spectres des molécules diatomiques. Une justification plus complète de (10.54) sera donnée au § 16.3.2.

10.3.2 Propriétés des harmoniques sphériques

Nous allons maintenant résumer les principales propriétés des harmoniques sphériques, celles qui sont les plus souvent utilisées.

1. *Base sur la sphère unité.* Les harmoniques sphériques forment une base orthonormée pour les fonctions de carré sommable sur la sphère unité $\hat{r}^2 = 1$

$$\int \sin \theta \, d\theta \, d\phi [Y_l^{m'}(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\theta, \phi) = \int d\Omega [Y_l^{m'}(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (10.55)$$

On utilise fréquemment la notation angle solide : $\Omega = (\theta, \phi)$ et

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\phi = d^2 \hat{r} \quad (10.56)$$

Si une fonction $f(\theta, \phi)$ est de carré sommable sur la sphère unité, on peut écrire un développement analogue à un développement de Fourier

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l,m} c_{lm} Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$c_{lm} = \int d\Omega [Y_l^m(\theta, \phi)]^* f(\theta, \phi) \quad (10.57)$$

2. *Relation avec les polynômes de Legendre.* Une définition possible des polynômes de Legendre $P_l(u)$ est

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (10.58)$$

$P_l(u)$ est un polynôme de degré l , de parité $(-1)^l$

$$P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$$

Les polynômes de Legendre forment un système complet de polynômes orthogonaux dans l'intervalle $[-1, +1]$. Les premiers polynômes de Legendre sont

$$P_0(u) = 1 \quad P_1(u) = u \quad P_2(u) = \frac{1}{2}(3u^2 - 1) \quad (10.59)$$

Les fonctions de Legendre associées $P_l^m(u)$ sont définies par

$$P_l^m(u) = (1 - u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad P_l^0(u) = P_l(u) \quad (10.60)$$

et on montre que les harmoniques sphériques sont reliés aux P_l^m par

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad : \quad m > 0 \quad (10.61)$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^{-m}(\theta, \phi)]^* \quad : \quad m < 0$$

D'après (10.53), Y_l^0 est indépendant de ϕ et est proportionnel à $P_l(\cos \theta)$

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (10.62)$$

Comme cas particuliers, écrivons Y_l^m pour $l = 0$ et $l = 1$

$$l = 0 \quad Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$l = 1 \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_0 \quad (10.63)$$

$$Y_1^\pm = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_{\pm 1}$$

À un facteur de normalisation $\sqrt{3/4\pi}$ près, les Y_1^m ne sont pas autre chose que les *composantes sphériques* du vecteur unitaire \hat{r}

$$\hat{r} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_0 \quad Y_1^\pm = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\hat{r}_x \pm i\hat{r}_y}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_{\pm 1} \quad (10.64)$$

Ces formules justifient les conventions de phase utilisées pour les polarisations droite et gauche dans (3.11).

3. *Transformation par rotation.* En multipliant à gauche la relation (10.26) écrite pour $j = l$ par le bra $\langle \hat{r} |$ on obtient

$$Y_l^m(\mathcal{R}^{-1}\hat{r}) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(\mathcal{R}) Y_l^{m'}(\hat{r}) \quad (10.65)$$

On peut montrer également (exercice 10.7.6) une relation entre harmoniques sphériques et matrices de rotation

$$D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \quad (10.66)$$

On déduit de ces deux équations le théorème d'addition des harmoniques sphériques. En effet, prenant \hat{r} suivant la direction d'angles polaires (α, β) , soit \mathcal{R} la rotation d'angles (θ, ϕ) amenant \hat{z} sur \hat{n} , et Θ l'angle entre \hat{r} et la direction définie par les angles (θ, ϕ) (figure 10.4)

$$\cos \Theta = \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos(\beta - \phi)$$

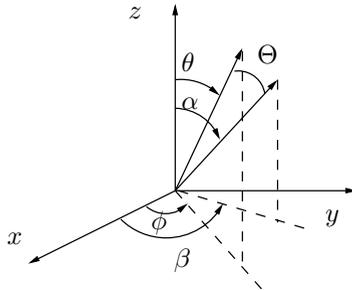


FIG. 10.4 – Configuration des angles dans (10.67).

L'angle Θ entre $\mathcal{R}^{-1}\hat{r}$ et l'axe des z est le même que l'angle entre \hat{n} et \hat{r} . Il suffit alors de faire $m = 0$ dans (10.65) pour obtenir

$$P_l(\cos \Theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l [Y_l^m(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\alpha, \beta) \quad (10.67)$$

Parité des harmoniques sphériques. L'opérateur parité Π défini au § 8.3.3 agit sur une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ suivant

$$[\Pi\psi](\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \quad (10.68)$$

Π commute avec le moment angulaire orbital \vec{L} , et plus généralement avec \vec{J} . En effet, la matrice représentative de l'opérateur parité dans l'espace à

trois dimensions \mathbb{R}^3 est la matrice $-I$, qui commute avec toute matrice de rotation \mathcal{R} , d'où

$$[U(\mathcal{R}), \Pi] = 0 \implies [\vec{J}, \Pi] = 0 \text{ et } [\vec{L}, \Pi] = 0 \quad (10.69)$$

Ceci implique les équations

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 \Pi Y_l^m &= \Pi \vec{L}^2 Y_l^m = l(l+1) \Pi Y_l^m \\ L_z \Pi Y_l^m &= \Pi L_z Y_l^m = m \Pi Y_l^m \end{aligned}$$

qui montrent que ΠY_l^m est proportionnel à Y_l^m

$$\Pi Y_l^m = \alpha(l, m) Y_l^m$$

Y_l^m est donc fonction propre de Π et comme $\Pi^2 = I$, $\alpha(l, m) = \pm 1$. Montrons que $\alpha(l, m)$ est en fait indépendant de m en utilisant le fait que L_+ commute avec Π

$$\begin{aligned} L_+ \Pi Y_l^m &= \alpha(l, m) L_+ Y_l^m = \alpha(l, m) [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} Y_l^{m+1} \\ &= \Pi L_+ Y_l^m = [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} \Pi Y_l^{m+1} \\ &= [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} \alpha(l, m+1) Y_l^{m+1} \end{aligned}$$

ce qui entraîne que $\alpha(l, m+1) = \alpha(l, m)$: $\alpha(l, m)$ est indépendant de m et

$$[\Pi Y_l^m](\hat{r}) = \alpha(l) Y_l^m(\hat{r}) = Y_l^m(-\hat{r})$$

La transformation $\hat{r} \rightarrow -\hat{r}$ correspond à

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (10.70)$$

Si $m = 0$, $Y_l^0 \propto P_l(\cos \theta)$; d'après (10.62) et compte tenu de $P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$ on trouve $\alpha(l) = (-1)^l$ et

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) \text{ ou } Y_l^m(\hat{r}) = (-1)^l Y_l^m(-\hat{r}) \quad (10.71)$$

10.4 Particule dans un potentiel central

10.4.1 Équation d'onde radiale

Nous allons utiliser les résultats précédents pour montrer que l'équation de Schrödinger à trois dimensions, qui est une équation aux dérivées partielles, se ramène à une équation différentielle ordinaire lorsque le potentiel est central, c'est-à-dire invariant par rotation

$$V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$$

Dans ce cas, comme l'énergie cinétique est un opérateur scalaire, le hamiltonien total pour une particule de masse M

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + V(r) \quad (10.72)$$

est invariant par rotation : $[H, \vec{J}] = 0$. Dans notre problème, seul intervient le moment angulaire orbital, puisque les seuls opérateurs dont nous disposons sont \vec{P} et \vec{R}

$$[H, \vec{L}] = 0 \quad \text{ou} \quad [H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = 0 \quad (10.73)$$

Dans l'espace $L^2_{\vec{r}}(\mathbb{R}^3)$, l'opérateur énergie cinétique est proportionnel au laplacien ∇^2

$$-\vec{P}^2 = -(-i\nabla)^2 = \nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (10.74)$$

en écrivant le laplacien en coordonnées sphériques. Comparant avec (10.49), on reconnaît dans la partie angulaire du laplacien l'opérateur \vec{L}^2

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \quad (10.75)$$

Cette équation confirme la relation de commutation $[H, \vec{L}] = 0$, puisque $[\vec{L}^2, \vec{L}] = 0$ et que la partie radiale du laplacien, qui ne dépend pas des angles, commute manifestement avec \vec{L} . Nous pouvons donc écrire le hamiltonien (10.72)

$$H = -\frac{1}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2Mr^2} \vec{L}^2 + V(r) \quad (10.76)$$

Compte tenu de leurs relations de commutation, nous savons qu'il est possible de diagonaliser simultanément H , \vec{L}^2 et L_z . Soit $\psi_{lm}(\vec{r})$ une fonction propre commune à ces trois opérateurs. Comme il n'existe qu'un seul harmonique sphérique (l, m) , si

$$\vec{L}^2 \psi_{lm} = l(l+1) \psi_{lm} \quad \text{et} \quad L_z \psi_{lm} = m \psi_{lm}$$

alors ψ_{lm} doit être proportionnel⁴ à Y_l^m

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = f_l(r) Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (10.77)$$

Il est commode de factoriser $1/r$: $u_l(r)$ est la *fonction d'onde radiale*. Examinons l'action de H sur ψ_{lm}

$$H \psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \left[-\frac{1}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_l(r) + \left(\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) \frac{u_l(r)}{r} \right] Y_l^m(\theta, \phi)$$

4. Nous anticipons sur le fait, prouvé quelques lignes plus bas, que f_l ne dépend pas de m .

L'équation aux valeurs propres

$$H\psi_{lm} = E_l\psi_{lm}$$

devient

$$\left[-\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E_l u_l(r) \quad (10.78)$$

La fonction d'onde radiale et l'énergie sont affectées uniquement d'un indice l , et non m , car elles sont indépendantes de m d'après (10.78). *Chaque valeur de l'énergie aura donc – au moins – une dégénérescence $(2l+1)$.* Ceci aurait pu être prévu à partir de la relation de commutation $[H, L_{\pm}] = 0$: si

$$H\psi_{lm} = E_{lm}\psi_{lm},$$

en utilisant un raisonnement analogue à celui qui nous a permis de montrer que $\alpha(l, m)$ est indépendant de m , on déduit que E_{lm} est indépendant de m (exercice 10.7.7). Pour chaque valeur du moment angulaire l , ou pour chaque onde partielle l , nous avons réduit l'équation de Schrödinger à une équation différentielle ordinaire dans la seule variable r . Suivant une tradition historique, les ondes partielles sont étiquetées s, p, d, f, g, h, \dots

$$l = 0 : \text{onde } s; \quad l = 1 : \text{onde } p; \quad l = 2 : \text{onde } d; \quad l = 3 : \text{onde } f$$

et ensuite par ordre alphabétique : $l = 4$: onde g , etc. Dans chaque onde partielle, l'équation (10.78) montre que le potentiel $V(r)$ doit être remplacé par un *potentiel effectif* $V_l(r)$ (figure 10.5)

$$V_l(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} \quad (10.79)$$

Le terme $l(l+1)/(2Mr^2)$ est appelé terme de *barrière centrifuge*. Ce terme est aussi présent en mécanique classique, où l'énergie peut s'écrire

$$E = \frac{1}{2} M \vec{v}^2 + V(r) = \frac{1}{2} M (v_r^2 + \omega^2 r^2) + V(r)$$

v_r est la vitesse radiale et ω la vitesse angulaire. Comme⁵ $l = M\omega r^2$ et que \vec{l} est constant dans le cas d'une force centrale

$$E = \frac{1}{2} M v_r^2 + \frac{l^2}{2Mr^2} + V(r) = \frac{1}{2} M v_r^2 + V_l(r)$$

Le terme $l^2/(2Mr^2)$ correspond à la force centrifuge

$$-\frac{d}{dr} \left(\frac{l^2}{2Mr^2} \right) = \frac{l^2}{Mr^3} = M\omega^2 r$$

5. Suivant notre convention habituelle, les lettres minuscules désignent des quantités classiques (nombres), ou des nombres quantiques.

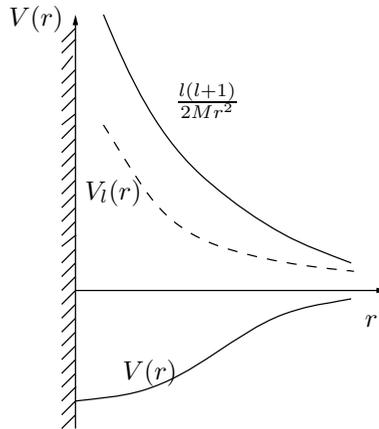


FIG. 10.5 – Potentiel effectif. Les lignes en trait plein représentent les potentiels $V(r)$ et la barrière centrifuge $l(l+1)/(2mr^2)$ et les tirets leur somme, le potentiel effectif $V_l(r)$ dans l'onde partielle de moment angulaire l .

Ce terme tend à éloigner la particule du centre de force et correspond à un potentiel répulsif. En mécanique quantique, on remplacera pour chaque valeur de l l'opérateur \vec{L}^2 par sa valeur propre $l(l+1)$, et au potentiel $V(r)$ s'ajoutera un potentiel répulsif $l(l+1)/(2Mr^2)$.

Toutes les fonctions $\psi_{lm}(\vec{r})$ de type (10.77) avec $u_l(r)$ solution de (10.78) ne sont pas acceptables physiquement. En effet, si la fonction $\psi_{lm}(\vec{r})$ représente un état lié, elle doit obéir à la condition de normalisation

$$\int d^3r |\psi_{lm}(\vec{r})|^2 = 1 \quad (10.80)$$

Si $\psi_{lm}(\vec{r})$ représente un état de diffusion, un comportement à l'infini en onde plane plus onde sphérique $\exp(\pm ikr)/r$ est acceptable (cf. (10.81)). Dans le cas d'un état lié, l'équation (10.78) possède en général à l fixé plusieurs solutions : en effet cette équation est identique à celle d'un problème unidimensionnel dans l'intervalle $[0, +\infty[$, car $0 \leq r < \infty$, le potentiel effectif étant le potentiel $V_l(r)$ (10.79). La fonction d'onde radiale et l'énergie sont étiquetées par un nombre quantique supplémentaire n' : $n' = 0, 1, 2, \dots$. La fonction d'onde et l'énergie seront notées $u_{n'l}(r)$ et $E_{n'l}$. Si le potentiel $V(r)$ est suffisamment régulier, on montre que n' est égal au nombre de zéros, aussi appelé nombre de nœuds, de la fonction d'onde radiale $u_{n'l}(r)$ (cf. § 9.3.3). Le nombre quantique n' classe les valeurs de l'énergie par ordre croissant

$$n'_1 > n'_2 \Rightarrow E_{n'_1 l} > E_{n'_2 l}$$

Nous verrons au chapitre 13 que les fonctions d'onde des états de diffusion sont étiquetées par le vecteur d'onde \vec{k}

$$r \rightarrow \infty : \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (10.81)$$

Il est possible d'analyser le comportement des fonctions d'onde $u_{nl}(r)$ pour $r \rightarrow 0$. En effet, dans tous les cas d'intérêt physique, le terme de barrière centrifuge est le plus singulier lorsque $r \rightarrow 0$ et il contrôle le comportement de $u_{nl}(r)$ dans cette limite. Si l'on suppose un comportement en loi de puissances⁶

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^\alpha$$

et que l'on reporte dans (10.78), on obtient pour les deux termes les plus singuliers en $r^{\alpha-2}$

$$-\frac{1}{2M} \alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} + \frac{l(l+1)}{2M} r^{\alpha-2} = 0$$

ce qui implique

$$\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$$

soit $\alpha = l + 1$ ou $\alpha = -l$. La seconde valeur est exclue car l'intégrale dans (10.80) divergerait à l'origine, sauf si $l = 0$. Cependant, pour $l = 0$, une solution $u_0(r) \propto \text{cste}$, soit $\psi_l(\vec{r}) \propto 1/r$, bien que normalisable, n'est pas acceptable car elle ne peut pas être solution de l'équation de Schrödinger ; en effet

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

En résumé le comportement des fonctions d'onde radiales pour $r \rightarrow 0$ est

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^{l+1} \quad (10.82)$$

La fonction d'onde radiale s'annule à l'origine. Ceci peut se comprendre intuitivement : comme $0 \leq r < \infty$, tout se passe comme s'il y avait une barrière de potentiel infinie à $r = 0$, et nous savons que dans ce cas (voir § 9.3.2) la fonction d'onde doit s'annuler. Toutefois, les solutions en r^{-l} peuvent être utiles dans la résolution de l'équation de Schrödinger lorsque l'on se trouve dans une région où r est strictement positif.

L'exemple de l'atome d'hydrogène, étudié dans la sous-section suivante, conduit à redéfinir le nombre quantique radial

$$n' \rightarrow n = n' + l + 1 \quad (10.83)$$

6. La loi de puissances donnant le comportement à l'origine ne dépend pas du nombre quantique n' ou de k , et nous supprimons la dépendance en n' ou en k .

10.4.2 Atome d'hydrogène

Les résultats de la sous-section précédente permettent d'aborder le calcul des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène, un des quelques problèmes physiques pour lesquels on dispose d'une solution analytique. La masse M dans (10.78) est la masse de l'électron m_e , ou plus exactement la masse réduite μ (exercice 8.5.6)

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e \quad (10.84)$$

où m_p est la masse du proton. Nous conserverons néanmoins m_e dans les équations, afin de souligner l'ordre de grandeur (à 0.1 % près!) de la masse pertinente dans ce problème. Le potentiel $V(r)$ est le potentiel coulombien attractif entre l'électron et le proton

$$V(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{r} \quad (10.85)$$

et l'équation (10.78) devient

$$\left[-\frac{1}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r) \quad (10.86)$$

Il est toujours conseillé en physique de rendre les équations adimensionnelles par des changements de variables appropriés. Dans le présent problème, l'unité de longueur naturelle est le rayon de Bohr (1.41) $a_0 = 1/(m_e e^2)$ et l'unité d'énergie le Rydberg (1.42)⁷ $R_\infty = e^2/(2a_0) = m_e e^4/2$. Ceci suggère de définir les quantités sans dimensions x et ε_{nl}

$$x = \frac{r}{a_0} = m_e e^2 r \quad \varepsilon_{nl} = -\frac{E_{nl}}{R_\infty} = -\frac{2a_0 E_{nl}}{e^2} \quad (10.87)$$

Dans la suite du calcul, nous nous limitons aux états liés pour lesquels $E_{nl} < 0$ et donc $\varepsilon_{nl} > 0$, ce qui explique le choix du signe moins. Définissant également

$$v_{nl}(x) = u_{nl}(r) = u_{nl}(a_0 x)$$

nous obtenons après simplification par $(2m_e a_0^2)^{-1}$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{2}{x} \right] v_{nl}(x) = -\varepsilon_{nl} v_{nl}(x) \quad (10.88)$$

Nous nous contenterons de déterminer la solution dans le cas $l = 0$, c'est-à-dire dans l'onde s , en renvoyant le cas général à l'exercice 10.7.9. Afin d'alléger les notations, nous posons

$$v_{n0}(x) = v(x) \quad \varepsilon_{n0} = \varepsilon$$

⁷ Rappelons que nous avons choisi un système d'unités où $\hbar = 1$: si l'on rétablit \hbar , $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ et $R_\infty = m_e e^4/(2\hbar^2)$.

et (10.88) devient

$$\frac{d^2 v(x)}{dx^2} = \left(\varepsilon - \frac{2}{x} \right) v(x)$$

D'après la sous-section précédente, nous savons que $v(x) \propto x$ pour $x \rightarrow 0$. Cherchons le comportement dominant pour $x \rightarrow \infty$ en négligeant le terme en $2/x$. Nous avons alors⁸

$$v(x) \sim \exp(\pm \sqrt{\varepsilon} x)$$

Le comportement en $\exp(\sqrt{\varepsilon} x)$ est inacceptable car la fonction d'onde ne serait pas normalisable, en raison de la divergence exponentielle. Le seul comportement possible est en $\exp(-\sqrt{\varepsilon} x)$. Afin de prendre en compte l'information contenue dans le comportement à l'infini, définissons une nouvelle fonction $f(x)$ par

$$v(x) = e^{-\alpha x} f(x) \quad \alpha^2 = \varepsilon$$

Ce changement de fonction transforme l'équation différentielle pour $v(x)$ en

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - 2\alpha \frac{df}{dx} + \frac{2}{x} f = 0 \quad (10.89)$$

Cherchons pour $f(x)$ un développement en puissances de x , sachant que $f(x) \propto x$ pour $x \rightarrow 0$

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k \quad (10.90)$$

L'équation (10.89) détermine une relation de récurrence sur les coefficients a_k

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1)a_k x^{k-2} - 2\alpha \sum_{k=1}^{\infty} k a_k x^{k-1} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^{k-1} = 0$$

En remarquant que pour $k = 1$ le premier terme de l'équation précédente s'annule et en réétiquetant k

$$\sum_{k=1}^{\infty} [k(k+1)a_{k+1} - 2(\alpha k - 1)a_k] x^{k-1} = 0 \quad (10.91)$$

L'annulation du coefficient de x^{k-1} donne une relation entre a_{k+1} et a_k

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} a_k$$

Si l'on fixe arbitrairement a_1 , tous les a_k se déduisent de a_1 . Pour $k \gg 1$ la relation de récurrence est approximativement

$$a_{k+1} \simeq \frac{2\alpha}{k} a_k \Rightarrow a_k \simeq \frac{(2\alpha)^k}{k!} a_1$$

8. En fait ce comportement n'est déterminé qu'à un polynôme multiplicatif près.

et

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k \sim \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2\alpha)^k}{k!} a_1 x^k \sim a_1 e^{2\alpha x}$$

Ce comportement entraîne pour $x \rightarrow \infty$

$$v(x) \sim e^{2\alpha x} e^{-\alpha x} \sim a_1 e^{\alpha x}$$

qui rend la fonction d'onde non normalisable. La seule façon d'éviter la divergence exponentielle est que développement (10.90) s'arrête pour une valeur entière $k = n$, ce qui ne peut se produire que si $\alpha n = 1$. Les valeurs possibles de ε sont donc étiquetées par un entier n

$$\varepsilon_n = \alpha^2 = \frac{1}{n^2}$$

et il en est de même pour celles de l'énergie

$$E_n = E_{n0} = -\frac{me^4}{2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_{\infty}}{n^2} \quad (10.92)$$

L'exercice 10.7.9 montre que les énergies possibles pour $l \neq 0$ sont de la forme

$$E_{nl} = -\frac{R_{\infty}}{n^2} \quad n = l + 1, l + 2, \dots \quad (10.93)$$

Les fonctions d'onde radiales $v_{n0}(x)$ pour $n = 1$ et 2 des états liés de l'atome d'hydrogène dans l'onde s , normalisées à un, sont données par

$$v_{10}(x) = 2x e^{-x} \quad (10.94)$$

$$v_{20}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} x \left(1 - \frac{x}{2}\right) e^{-x/2} \quad (10.95)$$

La fonction d'onde radiale de l'état $n = 2, l = 1$ (onde p) est

$$v_{21}(x) = \frac{1}{2\sqrt{6}} x^2 e^{-x/2} \quad (10.96)$$

En conclusion, nous avons obtenu le spectre de l'atome d'hydrogène (figure 10.6). On remarque que les niveaux sont dégénérés, sauf dans le cas $n = 1$. Pour une valeur donnée de n , toutes les valeurs de l comprises entre $l = 0$ et $l = n - 1$ sont possibles, et la dégénérescence est

$$G(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

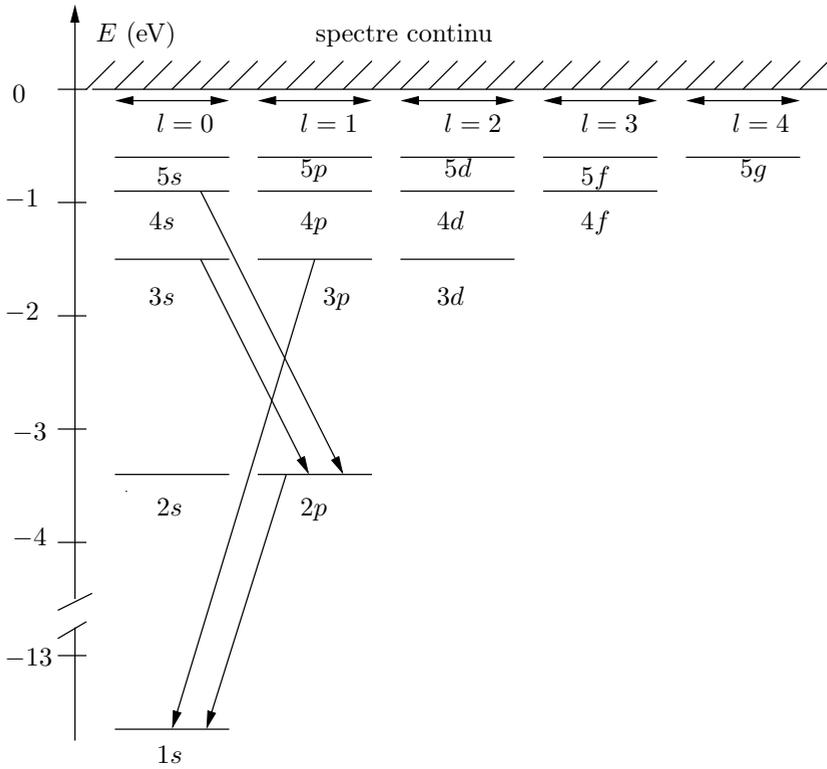


FIG. 10.6 – Spectre de l'atome d'hydrogène et exemples de transitions possibles.

Cette dégénérescence est propre au potentiel coulombien. Le spectre de l'électron externe d'un alcalin est qualitativement semblable à celui de l'atome d'hydrogène (figure 10.7), mais il n'y a plus de dégénérescence. En mécanique classique, le potentiel coulombien présente aussi une particularité remarquable : il est le seul, avec le potentiel harmonique $V(r) \propto r^2$, pour lequel les trajectoires se referment sur elles-mêmes⁹. Dans les deux cas cette propriété du mouvement classique, ainsi que les dégénérescences associées du problème quantique, ont pour origine une symétrie supplémentaire. Cette symétrie conduit à une loi de conservation supplémentaire, celle du vecteur de Lenz dans le cas coulombien.

⁹ Les deux comportements peuvent être reliés : cf. Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 11, exercice 3.

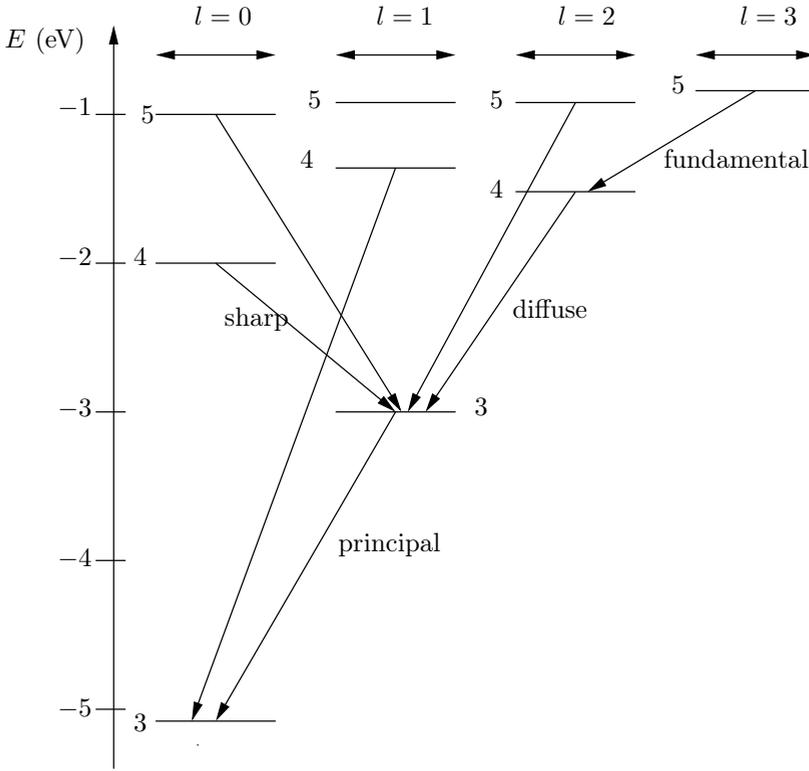


FIG. 10.7 – Spectre de l'atome de sodium et exemples de transitions possibles.

10.5 Distributions angulaires des désintégrations

10.5.1 Rotations de π , parité, réflexion par rapport à un plan

Dans cette section, nous nous proposons d'étudier les désintégrations d'une particule C en deux particules A et B

$$C \rightarrow A + B \quad (10.97)$$

Nous choisissons un référentiel d'inertie où la particule C est au repos ; les particules A et B partent donc avec des impulsions opposées \vec{p} et $-\vec{p}$ respectivement. Les processus (10.97) comprennent les *désintégrations (ou transitions) radiatives*, avec émission d'un photon : un niveau excité A^* d'un atome, d'une molécule ou d'un noyau atomique émet un photon γ tandis que le système passe dans un niveau d'énergie inférieure A , qui peut être ou non l'état

fondamental

$$A^* \rightarrow A + \gamma \quad (10.98)$$

Les états A^* et A peuvent aussi correspondre à des particules différentes, comme par exemple dans la désintégration

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma \quad (10.99)$$

où les particules Σ^0 et Λ^0 sont des particules neutres formées d'un quark up, un quark down et un quark étrange (exercice 10.7.17).

L'invariance par rotation du hamiltonien responsable de la désintégration entraîne la conservation du moment angulaire, ce qui conduit à des contraintes sur les amplitudes de désintégration et à des conséquences importantes sur la distribution angulaire des particules finales. Si le hamiltonien responsable de la désintégration est invariant par parité, ce qui est le cas pour les interactions électromagnétiques et fortes, mais non pour les interactions faibles, on obtiendra des contraintes supplémentaires. Il est commode d'introduire l'opérateur \mathcal{Y} , produit d'une rotation de π autour de l'axe Oy et de l'opération parité Π (§ 8.3.3)

$$Y = e^{-i\pi J_y} \quad \mathcal{Y} = Y \Pi = e^{-i\pi J_y} \Pi = \Pi e^{-i\pi J_y} \quad (10.100)$$

Cette opération n'est autre qu'une réflexion par rapport au plan xOz : \mathcal{Y} est l'opérateur de réflexion par rapport à ce plan. Étudions tout d'abord l'action de Y . Cet opérateur transforme J_x en $-J_x$, J_z en $-J_z$ et laisse J_y inchangé

$$Y^{-1} J_z Y = -J_z \quad Y^{-1} J_{\pm} Y = -J_{\mp} \quad (10.101)$$

Examinons l'action de Y sur un état $|jm\rangle$

$$J_z(Y|jm\rangle) = -Y J_z |jm\rangle = -m(Y|jm\rangle)$$

L'état $Y|jm\rangle$ est donc égal à $|j, -m\rangle$ à un facteur de phase près

$$Y|jm\rangle = e^{i\alpha(j,m)} |j, -m\rangle$$

car Y est unitaire et conserve la norme. Ce résultat n'est pas surprenant car l'action de Y équivaut à renverser la direction de l'axe de quantification du moment angulaire. Suivant une stratégie déjà mise en œuvre dans le cas de la parité, on utilise l'action de J_+ pour relier $\alpha(j, m)$ à $\alpha(j, m+1)$

$$\begin{aligned} J_+ Y|jm\rangle &= e^{i\alpha(j,m)} J_+ |j, -m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} e^{i\alpha(j,m)} |j, -m+1\rangle \\ &= -Y J_- |jm\rangle = -\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} Y|j, m-1\rangle \\ &= -\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} e^{i\alpha(j,m-1)} |j, -m+1\rangle \end{aligned}$$

soit

$$e^{i\alpha(j,m-1)} = -e^{i\alpha(j,m)}$$

Comme Y est une rotation de π , Y^2 est une rotation de 2π , $Y^2 = (-1)^{2j}$ et

$$Y^2|jm\rangle = e^{i\alpha(j,m)}e^{i\alpha(j,-m)}|jm\rangle = e^{2i\alpha(j,m)}(-1)^{2m}|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle$$

d'où les deux solutions possibles

$$e^{i\alpha(j,m)} = (-1)^{j-m} \quad \text{ou} \quad e^{i\alpha(j,m)} = (-1)^{j+m}$$

Les deux solutions sont identiques pour j entier, et pour $j = 1/2$ on vérifie sur (10.38) que la première solution est la bonne ; on peut montrer que c'est aussi le cas pour tout j demi-entier. En fin de compte

$$Y|jm\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle \quad Y^{-1}|jm\rangle = (-1)^{j+m}|j, -m\rangle \quad (10.102)$$

10.5.2 Transitions dipolaires

Nous examinons dans cette sous-section les transitions radiatives du type (10.98). Revenons tout d'abord sur la description de la polarisation d'un photon que nous avons étudiée au chapitre 3, en la replaçant dans le cadre général du moment angulaire. Nous avons déterminé le générateur infinitésimal des rotations de la polarisation lorsque la rotation se faisait autour de la direction de propagation, prise comme axe Oz . Dans la base des états de polarisation linéaire $|x\rangle$ et $|y\rangle$, ce générateur infinitésimal est donné par (3.26)

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

En effet nous avons vu en (3.29) que $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ effectue une rotation d'angle θ de la polarisation dans le plan xOy , et on peut identifier Σ_z et la composante z du moment angulaire du photon : $\Sigma_z = J_z$. L'action de l'opérateur $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ sur les états de polarisation circulaire droite $|D\rangle$ et gauche $|G\rangle$ (3.11) est d'après (3.29)

$$\exp(-i\theta\Sigma_z)|D\rangle = e^{-i\theta}|D\rangle \quad \exp(-i\theta\Sigma_z)|G\rangle = e^{i\theta}|G\rangle$$

ce qui prouve que les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ ont des nombres quantiques magnétiques $m = 1$ et $m = -1$ respectivement¹⁰. Par ailleurs la description du champ électromagnétique par un potentiel vecteur montre que le photon a un caractère vectoriel, et donc un spin 1, ce qui permet l'identification de $|D\rangle$ et $|G\rangle$ avec des états $|jm\rangle$ (figure 10.8)

$$|D\rangle = |j = 1, m = 1\rangle = |11\rangle \quad |G\rangle = |j = 1, m = -1\rangle = |1, -1\rangle \quad (10.103)$$

l'axe de quantification Oz du moment angulaire étant pris le long de la direction de propagation du photon. La valeur de m est appelé *l'hélicité* du photon : $m = +1$ correspond à une hélicité positive, $m = -1$ à une hélicité

10. Un argument équivalent consiste à remarquer que $\Sigma_z|D\rangle = |D\rangle$ et que $\Sigma_z|G\rangle = -|G\rangle$.

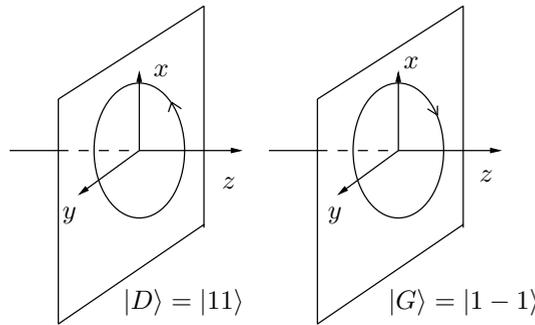


FIG. 10.8 – (a) Polarisation circulaire droite (b) Polarisation circulaire gauche.

négative. Comme à un moment angulaire 1 correspondent trois valeurs possibles du nombre quantique magnétique, $m = +1, m = 0, m = -1$, on peut se demander ce que devient la valeur $m = 0$ dans le cas du photon. Une analyse générale due à Wigner montre que, pour une particule de masse nulle et de spin j , les seules valeurs propres permises de J_z sont $m = j$ et $m = -j$, l'axe Oz étant pris le long de la direction de propagation de la particule. Lorsque la parité n'est pas une symétrie du hamiltonien, les deux valeurs possibles sont indépendantes : si le neutrino avait une masse nulle¹¹, le neutrino, particule de spin $j = 1/2$, aurait toujours $m = -1/2$, et l'antineutrino, particule *différente*, $m = +1/2$. Les interactions du photon, qui sont les interactions électromagnétiques, conservent la parité, ce qui fait que la même particule peut avoir $m = 1$ et $m = -1$.

Reste à vérifier que la définition (10.103) correspond bien à une base standard du moment angulaire. Nous allons utiliser l'opérateur $Y = \exp(-i\pi J_y)$ qui change la direction de propagation du photon, l'axe Oz restant inchangé. Son action sur les états de polarisation linéaire est (figure 10.9)

$$Y|x\rangle = -|x\rangle \quad Y|y\rangle = |y\rangle$$

On en déduit l'action sur les états de polarisation circulaire $|D\rangle$ et $|G\rangle$ (3.11)

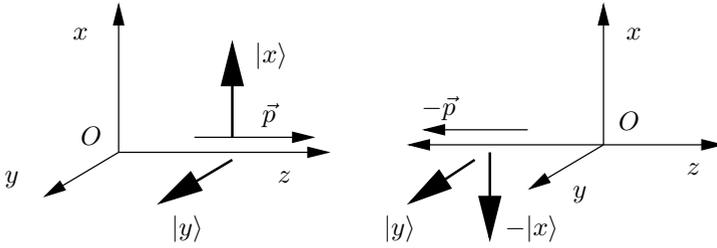
$$Y|D\rangle = Y \left[\frac{-1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle) = |G\rangle \quad (10.104)$$

La phase relative des états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ correspond bien à celle d'une base standard puisque d'après (10.102)

$$Y|D\rangle = Y|1, 1\rangle = (-1)^{1-1}|1, -1\rangle = |G\rangle$$

Le choix (3.11) est aussi confirmé par le fait que $|D\rangle$ et $|G\rangle$ sont donnés par les mêmes combinaisons que les composantes sphériques \hat{r}_1, \hat{r}_{-1} et \hat{r}_0 (10.64) de \hat{r} .

11. Ce qui a longtemps semblé probable, mais a été contredit par l'expérience : exercice 4.4.6. et note 4 du chapitre 1.

FIG. 10.9 – Action de Y sur les états de polarisation linéaire.

Appelons \vec{p} l'impulsion du photon, que nous choisissons comme axe Oz , soit $|jm\rangle$ l'état de moment angulaire de A^* – on dit souvent que l'état excité a un spin j –, $|j'm'\rangle$ l'état de moment angulaire du niveau final A , ou spin du niveau final A , et $|1\mu\rangle$ celui du photon. En raison de l'invariance par rotation, le moment angulaire est conservé dans la transition

$$\vec{J} = \vec{J}' + \vec{S} + \vec{L}$$

où \vec{S} est le spin du photon et \vec{L} le moment angulaire orbital. La projection de cette équation sur Oz donne

$$m = m' + \mu + m_l$$

Il est facile de se convaincre que le nombre quantique magnétique du moment angulaire orbital est nul : $m_l = 0$. En effet, la fonction d'onde spatiale du photon est une onde plane

$$e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = e^{ipz}$$

qui est invariante par rotation autour de Oz : la composante suivant Oz du moment angulaire orbital doit être nulle. On peut aussi remarquer que d'après (10.47)

$$L_z e^{ipz} = -i \frac{\partial}{\partial \phi} e^{ipr \cos \theta} = 0$$

La conservation du moment angulaire suivant Oz donne donc

$$\begin{array}{ll} \text{photon droit final} & m = m' + 1 \\ \text{photon gauche final} & m = m' - 1 \end{array} \quad (10.105)$$

Si A et A^* ont un spin nul ($j = j' = 0$), alors $m = m' = 0$ et les équations (10.105) n'ont pas de solution : il n'y a pas de transition radiative à un seul photon $j = 0 \rightarrow j' = 0$, souvent appelée transition $0 \rightarrow 0$. Les transitions radiatives $0 \rightarrow 0$ ne sont possibles qu'avec l'émission d'au moins deux photons, et la probabilité d'une telle transition est défavorisée par une puissance de la constante de structure fine $\alpha \simeq 1/137$.

Un cas plus intéressant, et qui se présente souvent en pratique, est celui où $j = 1$ et $j' = 0$. Si le photon est émis suivant Oz avec une hélicité $\mu = \pm 1$, deux cas sont possibles, compte tenu de $j' = m' = 0$

$$\text{photon droit final} \quad m = 1 \quad \mu = 1 \quad (10.106)$$

$$\text{photon gauche final} \quad m = -1 \quad \mu = -1 \quad (10.107)$$

Soit a l'amplitude de probabilité de (10.106), b celle de (10.107). Il faut bien comprendre qu'il s'agit de l'amplitude de probabilité d'une transition, analogue à celle calculée en (9.149), et non des amplitudes de probabilité telles qu'elles sont définies dans le postulat **II** du chapitre 4. Le module carré d'une amplitude de transition donne la probabilité de transition par unité de temps. Les amplitudes a et b peuvent être vues comme les éléments de matrice d'un opérateur T , appelé *matrice de transition*, calculable, au moins formellement, en fonction du hamiltonien et qui a les mêmes symétries que le hamiltonien. Anticipant sur ce qui va suivre, on définit un angle θ qui est l'angle entre la direction d'émission prise dans le plan xOz du photon et l'axe Oz , et on écrit les amplitudes de transition a et b (dans (10.105) $m' = 0$ puisque $j' = 0$)

$$\begin{aligned} a &= \langle D, \theta = 0 | T | j = 1, m = 1 \rangle = \langle D, \theta = 0 | T | 11 \rangle \\ b &= \langle G, \theta = 0 | T | j = 1, m = -1 \rangle = \langle G, \theta = 0 | T | 1, -1 \rangle \end{aligned} \quad (10.108)$$

Si la parité est une symétrie du hamiltonien responsable de la transition, T commute avec \mathcal{Y} (10.100) : comme les deux amplitudes a et b correspondent à des transitions qui se déduisent l'une de l'autre par une réflexion par rapport au plan xOz (figure 10.10 (a) et (b)), on doit avoir $|a| = |b|$. Pour déterminer la phase dans cette relation, on utilise

$$\begin{aligned} a &= \langle D, \theta = 0 | \mathcal{Y}^{-1} T \mathcal{Y} | 1, 1 \rangle = \eta_\gamma \eta_A \eta_{A^*} \langle G, \theta = 0 | T | 1, -1 \rangle \\ &= \eta_\gamma \eta_A \eta_{A^*} b \end{aligned} \quad (10.109)$$

où $\eta_X = \pm 1$ est la parité d'une particule X : si la particule X a une impulsion \vec{p} et que l'on écrit son vecteur d'état $|X, \vec{p}\rangle$

$$\Pi |X, \vec{p}\rangle = \eta_X |X, -\vec{p}\rangle \quad (10.110)$$

La description du champ électromagnétique par un potentiel vecteur, qui est un vecteur polaire, montre que la parité du photon est $\eta_\gamma = -1$. Soit $\eta = \eta_A \eta_{A^*}$; il y a deux cas possibles

- | | | |
|----|-------------|----------|
| 1. | $\eta = -1$ | $a = b$ |
| 2. | $\eta = +1$ | $a = -b$ |

Nous allons montrer que le premier cas est celui d'une transition dipolaire électrique, le second celui d'une transition dipolaire magnétique¹², par comparaison avec le cas classique le plus simple, le rayonnement d'une charge

12. Ce résultat dépend des conventions de signe utilisées pour les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$; on trouve le signe opposé dans Feynman *et al.* [1965], volume III, section 18.1, en raison d'une convention de signe différente dans la définition de $|D\rangle$.

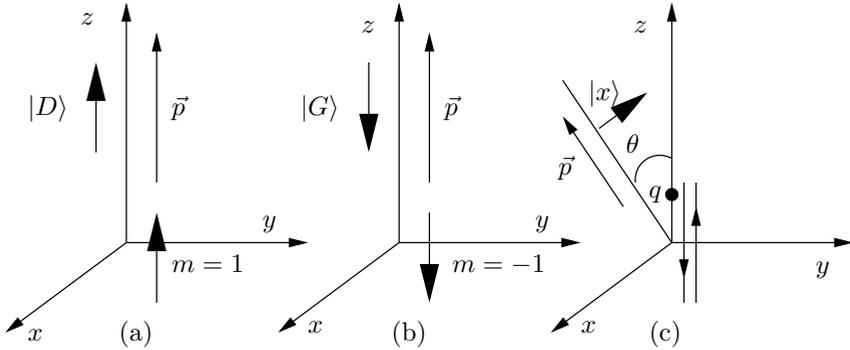


FIG. 10.10 – Émission de photons avec $\vec{p} \parallel Oz$. Les amplitudes (a) et (b) se déduisent l'une de l'autre par réflexion par rapport au plan xOz . (c) Polarisation linéaire du photon final. La charge q effectue un mouvement oscillant le long de Oz .

se déplaçant le long de Oz avec un mouvement harmonique. Le moment angulaire classique de cette charge par rapport à l'origine, et en particulier sa composante suivant z , est toujours nul, et le cas quantique se rapprochant le plus de cette situation est celui où l'état excité A^* possède un moment angulaire nul suivant Oz , c'est-à-dire qu'il est dans l'état $|j = 1, m = 0\rangle$. Afin de comparer la distribution angulaire du photon avec celle du rayonnement classique, il nous faut envisager le cas où l'angle d'émission du photon $\theta \neq 0$, l'état initial de l'atome étant $|10\rangle$. On obtient l'état $|D, \theta\rangle$ (resp. $|G, \theta\rangle$) du photon par une rotation d'angle θ autour de Oy à partir de $|D, \theta = 0\rangle$ (resp. $|G, \theta = 0\rangle$)

$$\begin{aligned} |D, \theta\rangle &= U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|D, \theta = 0\rangle \\ |G, \theta\rangle &= U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|G, \theta = 0\rangle \end{aligned}$$

L'amplitude d'émission dans la direction θ , par exemple pour un photon droit et un état initial $|j = 1, m = 0\rangle$, est

$$\begin{aligned} a_D^{m=0}(\theta) &= \langle D, \theta | T | 10 \rangle = \langle D, \theta = 0 | U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] T | 10 \rangle \\ &= \langle D, \theta = 0 | T U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | 10 \rangle \\ &= \langle D, \theta = 0 | T | 11 \rangle \langle 11 | U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | 10 \rangle \\ &= a d_{01}^{(1)}(\theta) = \frac{a}{\sqrt{2}} \sin \theta \end{aligned} \quad (10.111)$$

Nous avons utilisé l'invariance par rotation de T , introduit un ensemble d'états intermédiaires dans le sous-espace $j = 1$, $\sum_m |1m\rangle \langle 1m|$ et obtenu l'élément de matrice de rotation grâce à (10.39). Un calcul analogue donne pour l'émission d'un photon gauche

$$a_G^{m=0}(\theta) = b d_{0-1}^{(1)}(\theta) = -\frac{b}{\sqrt{2}} \sin \theta \quad (10.112)$$

Si la polarisation finale est linéaire, on peut la décomposer sur les états¹³ $|x\rangle$ polarisés dans le plan xOz et $|y\rangle$ polarisés suivant Oy (figure 10.10 (c))

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|D\rangle + |G\rangle) \quad |y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|D\rangle + |G\rangle) \quad (10.113)$$

on déduit

$$\begin{aligned} a_x^{m=0}(\theta) &= \langle x, \theta | T | 10 \rangle = -\frac{1}{2}(a+b) \sin \theta \\ a_y^{m=0}(\theta) &= \langle y, \theta | T | 10 \rangle = \frac{i}{2}(a-b) \sin \theta \end{aligned} \quad (10.114)$$

Dans le cas dipolaire électrique $a = b$ les photons sont polarisés suivant Ox ; dans le cas dipolaire magnétique ils sont polarisés suivant Oy . C'est bien ce qui correspond au cas classique : si l'on prend par exemple une charge animée d'un mouvement d'oscillation harmonique suivant Oz , avec un moment angulaire nul suivant Oz , le rayonnement est polarisé dans le plan xOz . Au contraire, un dipôle magnétique donnerait un rayonnement polarisé suivant Oy . Une transition dipolaire électrique correspond à $\eta = -1$, et donc à *un état initial et final ayant des parités opposées*, tandis qu'une transition dipolaire magnétique correspond à un état initial et un état final ayant la même parité. Dans les deux cas la distribution angulaire est en $\sin^2 \theta$.

10.5.3 Désintégrations : cas général

Revenons à la désintégration générale à deux corps (10.97), en appelant j_A , j_B et j_C les spins des particules A , B et C . Définissons les amplitudes de transition pour un état initial $|j_C m_C\rangle$ de la particule C vers les états finaux $|j_A m_A\rangle$ et $|j_B m_B\rangle$ des particules A et B , et supposons la particule A émise avec une impulsion \vec{p} dirigée suivant une direction (θ, ϕ)

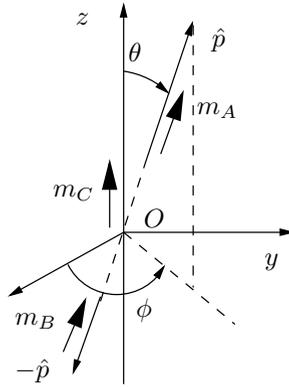
$$a_{m_A m_B}^{m_C}(\theta, \phi) = \langle m_A m_B; (\theta, \phi) | T | m_C \rangle \quad (10.115)$$

Si la particule A est émise dans la direction $\hat{p} = (\theta, \phi)$, l'état

$$|m_A m_B; (\theta, \phi)\rangle = U(\mathcal{R}) |m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0)\rangle$$

est le transformé de $|m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0)\rangle$ par la rotation (θ, ϕ) qui amène l'axe Oz sur la direction \hat{p} . Il faut souligner que, dans cet état, nous avons choisi l'axe de quantification du moment angulaire suivant \hat{p} , et que m_A et m_B sont les valeurs propres de $(\vec{J} \cdot \hat{p})$, et non J_z (figure 10.11). Lorsque la particule A est émise dans la direction Oz : $\theta = \phi = 0$, la conservation de la composante z du moment angulaire implique, comme dans le cas de la sous-section précédente, que $m_C = m_A + m_B$. Les seules amplitudes de transition non nulles sont

$$b_{m_A, m_B} = \langle m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | T | m_C = m_A + m_B \rangle \quad (10.116)$$

FIG. 10.11 – Désintégration $C \rightarrow A + B$.

En reprenant le raisonnement utilisé dans (10.111)

$$\begin{aligned}
 a_{m_A, m_B}^{m_C}(\theta, \phi) &= \langle m_A m_B; (\theta, \phi) | T | m_C \rangle \\
 &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | U^\dagger(\mathcal{R}) T | m_C \rangle \\
 &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | T | m'_C = m_A + m_B \rangle \\
 &\quad \times \langle m'_C = m_A + m_B | U^\dagger(\mathcal{R}) | m_C \rangle \\
 &= b_{m_A, m_B} \left(D_{m_C; m_A + m_B}^{(j_C)}(\theta, \phi) \right)^* \quad (10.117)
 \end{aligned}$$

$$= b_{m_A, m_B} d_{m_C; m_A + m_B}^{(j_C)}(\theta) e^{im_C \phi} \quad (10.118)$$

Si la parité est conservée dans la désintégration

$$\begin{aligned}
 b_{m_A, m_B} &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | \mathcal{Y}^\dagger T \mathcal{Y} | m_C = m_A + m_B \rangle \\
 &= \eta (-1)^{j_C - j_A - j_B} b_{-m_A, -m_B} \quad (10.119)
 \end{aligned}$$

où $\eta = \eta_A \eta_B \eta_C$ est le produit des parités des trois particules. La conservation de la parité divise par deux le nombre d'amplitudes indépendantes. Les amplitudes définies dans (10.118) sont appelées *amplitudes d'hélicité*. Toutefois, il faut prendre garde au fait que l'axe de quantification du moment angulaire de la particule B est souvent pris suivant la direction de son impulsion, soit $-\hat{p}$, ce qui fait que $m_B \rightarrow -m_B$. Les nombres quantiques magnétiques m_A et $-m_B$ (avec notre définition) sont les hélicités des particules A et B .

13. Les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont définis par rapport à la direction \vec{p} de propagation : figure 10.10(c).

10.6 Composition de deux moments angulaires

10.6.1 Composition de deux spins 1/2

Nous avons construit au § 6.1.2 l'espace à quatre dimensions $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ produit tensoriel des espaces à deux dimensions de deux spins 1/2, \vec{S}_1 et \vec{S}_2 . Une base possible de cet espace est formée des vecteurs propres $|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle$, $\varepsilon = \pm$, de S_{1z} et de S_{2z}

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle \text{ et } |--\rangle \quad (10.120)$$

Les propriétés physiques diagonales dans cette base sont \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , S_{1z} et S_{2z}

$$\vec{S}_1^2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad S_{1z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad (10.121)$$

$$\vec{S}_2^2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad S_{2z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad (10.122)$$

Cette base correspond au choix suivant d'un ensemble complet d'opérateurs compatibles : $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$. Il est possible de former une autre base intéressante en considérant le moment angulaire total \vec{S} obtenu en additionnant \vec{S}_1 et \vec{S}_2

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (10.123)$$

\vec{S} est bien le moment angulaire total, car il permet de construire le générateur infinitésimal dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ d'une rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ d'angle θ autour d'un axe \hat{n}

$$U(\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)) = e^{-i\theta(\vec{S}_1 \cdot \hat{n})} e^{-i\theta(\vec{S}_2 \cdot \hat{n})} = e^{-i\theta(\vec{S} \cdot \hat{n})} \quad (10.124)$$

où nous avons utilisé $[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0$. Comme \vec{S}_1^2 et \vec{S}_2^2 sont des opérateurs scalaires, ils commutent avec \vec{S} , et un autre ensemble d'opérateurs compatibles est $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$; nous vérifierons ultérieurement que cet ensemble est aussi complet. Cherchons les vecteurs de base de ce nouvel ensemble. Posant $|1, 1\rangle = |++\rangle$ on vérifie

$$S_z |1, 1\rangle = |1, 1\rangle$$

$$S_+ |1, 1\rangle = (S_{1+} + S_{2+}) |++\rangle = 0$$

$$S_- |1, 1\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle = |+-\rangle + |-+\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$$

Cette dernière équation définit le vecteur unitaire $|1, 0\rangle$, qui vérifie

$$S_z |1, 0\rangle = (S_{1z} + S_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = 0$$

Enfin

$$S_- |1, 0\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = \sqrt{2} |--\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle$$

$$S_z |1, -1\rangle = -|1, -1\rangle$$

$$S_- |1, -1\rangle = 0$$

Ces équations montrent que les trois vecteurs

$$\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$$

forment une base standard pour un moment angulaire 1. Il suffit de vérifier les propriétés de la base standard pour S_z et S_- , car $S_+ = S_-^\dagger$ et $\vec{S}^2 = \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+) + S_z^2$. Le calcul ci-dessus montre que l'on a bien construit une base standard, par exemple

$$S_-|1, 1\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$$

Il faut enfin, pour obtenir une base de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, construire un quatrième vecteur orthogonal aux trois autres

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Ce vecteur n'est autre que le vecteur $|\Phi\rangle$ (6.15). Ce vecteur étant invariant par rotation correspond à un moment angulaire zéro, et on peut vérifier explicitement que

$$S_z|0, 0\rangle = 0 \quad S_\pm|0, 0\rangle = 0$$

En résumé, en composant deux moments angulaires 1/2, nous avons obtenu un moment angulaire $s = 1$ et un moment angulaire $s = 0$. Une base standard de \vec{S}^2 et de S_z est formée des vecteurs correspondant à $s = 1$

$$s = 1 \quad \begin{cases} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{cases} \quad (10.125)$$

et à $s = 0$

$$s = 0 \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (10.126)$$

Comme nous avons trouvé quatre vecteurs orthogonaux, ces vecteurs forment une base de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ et l'ensemble des opérateurs compatibles $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$, ou simplement $\{\vec{S}^2, S_z\}$, est bien complet. Les états $s = 1$ sont appelés *états triplets* et l'état $s = 0$ *état singulet*.

Comme application, retrouvons les résultats de l'exercice 6.6.4, où nous avons à diagonaliser l'opérateur $(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$. Cet opérateur est diagonal dans la base $\{\vec{S}^2, S_z\}$. En effet

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)^2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad (10.127)$$

ou

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 2\vec{S}^2 - 3I = [2s(s+1) - 3]I$$

L'opérateur $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ est égal à I dans l'état triplet et à $-3I$ dans l'état singulet. On en déduit les projecteurs \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_0 sur les états triplet et singulet

$$\mathcal{P}_0 + \mathcal{P}_1 = I \quad \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3\mathcal{P}_0 + \mathcal{P}_1$$

d'où

$$\mathcal{P}_0 = \frac{1}{4}(I - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad \mathcal{P}_1 = \frac{1}{4}(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (10.128)$$

L'opérateur $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ est un opérateur scalaire qui commute avec \vec{S} , mais non avec les opérateurs de spin individuels \vec{S}_1 et \vec{S}_2 . On remarque aussi que les états triplets sont symétriques (c'est-à-dire qu'ils ne changent pas de signe) dans la permutation des spins 1 et 2, tandis que l'état singulet est antisymétrique dans cette permutation.

10.6.2 Cas général : composition de deux moments angulaires \vec{J}_1 et \vec{J}_2

Nous allons généraliser ce qui précède à la composition de deux moments angulaires \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . Le raisonnement utilisé en (10.124) peut être répété pour montrer que $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ est le moment angulaire total. Suivant la sous-section précédente, nous construisons l'espace produit tensoriel à $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ dimensions

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$$

Une base possible de cet espace est constituée des vecteurs propres

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \quad (10.129)$$

communs à $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}$ et J_{2z}

$$\begin{aligned} \vec{J}_1^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= j_1(j_1 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \\ \vec{J}_2^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \\ J_{1z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= m_1 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \\ J_{2z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= m_2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \end{aligned}$$

Cette base correspond à l'ensemble complet d'opérateurs qui commutent $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$. Nous allons construire une autre base de \mathcal{E} , celle où les opérateurs $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ sont diagonaux. Nous partons des deux observations suivantes.

- Tout vecteur $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ est vecteur propre de J_z avec la valeur propre $m = m_1 + m_2$.
- Si une valeur de j est possible, on doit avoir par application de J_+ et J_- une série de $(2j + 1)$ vecteurs $|jm\rangle$. *A priori*, on pourrait même avoir plusieurs séries de vecteurs de ce type, et nous noterons $N(j)$ le nombre de ces séries pour une valeur de j donnée.

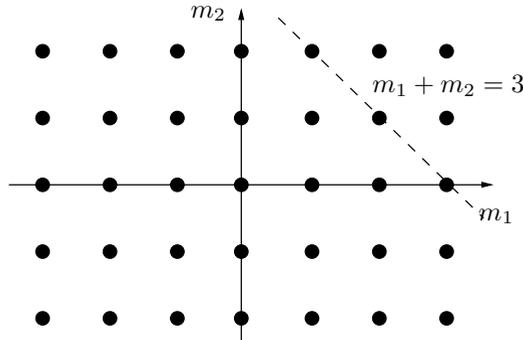


FIG. 10.12 – Composition de deux moments angulaires.

Soit $n(m)$ la dégénérescence de la valeur propre m de J_z . Comme m apparaît si et seulement si $j \geq |m|$, on aura (figure 10.12)

$$n(m) = \sum_{j \geq |m|} N(j)$$

et par conséquent

$$N(j) = n(j) - n(j + 1)$$

Mais $n(m)$ est égal au nombre de couples (m_1, m_2) tels que $m = m_1 + m_2$. En supposant par exemple $j_1 \geq j_2$

$$n(m) = \begin{cases} 0 & \text{si } |m| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |m| & \text{si } j_1 - j_2 \leq m \leq j_1 + j_2 \\ 2j_2 + 1 & \text{si } 0 \leq |m| \leq j_1 - j_2 \end{cases}$$

On en conclut

$$N(j) = 1 \text{ pour } j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$$

et $N(j) = 0$ dans tous les autres cas. Pour tenir compte du cas $j_2 > j_1$, il suffit de remplacer $(j_1 - j_2)$ par $|j_1 - j_2|$. Nous pouvons donc énoncer le théorème suivant.

Théorème de composition des moments angulaires. Dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$

1. Les valeurs possibles de j sont

$$|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \quad (10.130)$$

2. À chaque valeur de j correspond une seule série de vecteurs propres $|jm\rangle$

$$\vec{J}^2|jm\rangle = j(j + 1)|jm\rangle \quad J_z|jm\rangle = m|jm\rangle \quad (10.131)$$

Il est instructif de vérifier que la dimension de \mathcal{E} est bien correcte ($j_1 \geq j_2$)

$$\begin{aligned} \dim \mathcal{E} &= \sum_{j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2} (2j + 1) \\ &= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 - j_2 - 1)(j_1 - j_2) + (j_1 + j_2) \\ &\quad - (j_1 - j_2 - 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned}$$

On passe de la base orthonormée $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ à la base orthonormée $|jm\rangle$ par une transformation unitaire. Les éléments de la matrice unitaire qui effectue cette transformation sont appelés *coefficients de Clebsch-Gordan* (C-G) $C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2}$

$$|jm\rangle = \sum_{m_1 + m_2 = m} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \quad (10.132)$$

qui ne peuvent être différents de zéro que si $m = m_1 + m_2$ et $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$. On choisit la convention de phase suivante

$$C_{m_1 m_2; j, m=j}^{j_1 j_2} \text{ réel} \geq 0$$

et on peut alors montrer par application de J_- que tous les C-G sont réels. Les coefficients de Clebsch-Gordan sont les éléments d'une matrice unitaire réelle, les indices matriciels étant $(m_1 m_2)$ et (jm) . Ils vérifient donc les conditions d'orthogonalité

$$\sum_{m_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m_1 m_2; j' m'}^{j_1 j_2} = \delta_{j j'} \delta_{m m'} \quad (10.133)$$

et inversement

$$\sum_{j=|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \sum_{m=-j}^j C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m_1' m_2'; jm}^{j_1 j_2} = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \quad (10.134)$$

Les équations (10.125) et (10.126) donnent des exemples de C-G

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}; 11}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = 1 \quad C_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}; 10}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Comme application de la composition des moments angulaires, étudions le *couplage spin-orbite* : en raison d'effets relativistes, le moment angulaire orbital et le spin d'un électron atomique, par exemple l'électron de l'atome d'hydrogène ou l'électron de valence d'un alcalin, ne sont pas indépendants, comme nous le verrons au § 15.2.2. Le moment angulaire total de l'électron est la somme de son moment angulaire orbital \vec{L} et de son spin \vec{S}

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (10.135)$$

Les valeurs possibles de j sont donc $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$ (sauf si $l = 0$, auquel cas $j = s = 1/2$). Le moment angulaire orbital et le spin sont couplés par un potentiel spin-orbite

$$V_{\text{so}}(r) = V(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (10.136)$$

Ce potentiel prend des valeurs différentes selon que $j = l + 1/2$ ou $j = l - 1/2$; en effet

$$(\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

soit

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (10.137)$$

ce qui donne pour le potentiel spin-orbite

$$V_{\text{so}}(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} V(r) l & : j = l + 1/2 \\ -\frac{1}{2} V(r) (l + 1) & : j = l - 1/2 \end{cases} \quad (10.138)$$

10.6.3 Composition des matrices de rotation

La loi de composition des moments angulaires se reflète dans une loi de composition des matrices de rotation. Considérons les éléments de matrice de l'opérateur de rotation $U(\mathcal{R})$ entre les états $|jm\rangle$ et $|jm'\rangle$ du type (10.132)

$$\begin{aligned} \langle jm|U(\mathcal{R})|jm'\rangle &= D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) \\ &= \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | U(\mathcal{R}) | j_1 j_2 m'_1 m'_2 \rangle \end{aligned}$$

d'où

$$D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R}) \quad (10.139)$$

Compte tenu des relations d'orthogonalité (10.133) et (10.134) des C-G, on peut inverser (10.139)

$$D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R}) = \sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) \quad (10.140)$$

Cette équation peut être interprétée de la manière suivante : dans l'espace $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$, on forme la matrice $\Delta(\mathcal{R})$, produit tensoriel de $D^{(j_1)}(\mathcal{R})$ et $D^{(j_2)}(\mathcal{R})$

$$\Delta_{m_1 m_2; m'_1 m'_2}(\mathcal{R}) = D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) \otimes D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R})$$

Par un changement de base effectué grâce à une matrice unitaire dont les éléments sont les coefficients de C-G $C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2}$, la matrice

$$\Delta'(\mathcal{R}) = C \Delta(\mathcal{R}) C^{-1}$$

devient une matrice diagonale par blocs

$$C\Delta(\mathcal{R})C^{-1} = \begin{pmatrix} D^{(j_1+j_2)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D^{(j_1+j_2-1)} & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & D^{(|j_1-j_2|)} \end{pmatrix}$$

En termes mathématiques, ceci s'appelle réduire le produit de deux représentations $D^{(j_1)}$ et $D^{(j_2)}$ du groupe de rotation en composantes irréductibles

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(j_1+j_2)} + D^{(j_1-j_2-1)} + \dots + D^{(|j_1-j_2|)} \quad (10.141)$$

10.6.4 Théorème de Wigner-Eckart (opérateurs scalaires et vectoriels)

Nous avons donné en (8.33) la définition d'un opérateur scalaire \mathcal{S} : c'est un opérateur qui commute avec \vec{J} : $[\mathcal{S}, \vec{J}] = 0$. Examinons les éléments de matrice $\langle j'm' | \mathcal{S} | jm \rangle$ de \mathcal{S} dans une base standard du moment angulaire

$$[\mathcal{S}, \vec{J}^2] = 0 \Rightarrow j' = j \quad [\mathcal{S}, J_z] = 0 \Rightarrow m' = m$$

De plus

$$[\mathcal{S}, J_{\pm}] = 0 \Rightarrow \langle jm | \mathcal{S} | jm \rangle = \langle j || \mathcal{S} || j \rangle \text{ indépendant de } m \quad (10.142)$$

La quantité $\langle j || \mathcal{S} || j \rangle$ est appelée *élément de matrice réduit* de \mathcal{S} .

Nous passons maintenant aux opérateurs vectoriels \vec{V} , dont nous avons donné la définition en (8.34) : les composantes cartésiennes V_k d'un opérateur vectoriel se transforment par rotation suivant la loi

$$U^\dagger(\mathcal{R}) V_k U(\mathcal{R}) = \sum_l \mathcal{R}_{kl} V_l \quad (10.143)$$

En considérant des rotations infinitésimales nous en avons déduit les relations de commutation avec les composantes du moment angulaire

$$[J_k, V_l] = i \sum_p \varepsilon_{klp} V_p \quad (10.144)$$

Les équations (10.143) et (10.144) sont strictement équivalentes et peuvent servir l'une comme l'autre pour définir un opérateur vectoriel. Il est commode d'utiliser les composantes sphériques V_q de \vec{V}

$$V_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y) \quad V_0 = V_z \quad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y) \quad (10.145)$$

Ces composantes sont aussi appelées composantes standard de \vec{V} , car dans le cas où \vec{V} est l'opérateur position, $\vec{V} = \vec{R}$, les composantes \hat{r}_1, \hat{r}_0 et \hat{r}_{-1} du vecteur \hat{r} ne sont autres que les harmoniques sphériques Y_1^\pm et Y_1^0 à un facteur $\sqrt{3/4\pi}$ près (cf. (10.64)). Ceci implique d'après (10.65) la loi de transformation

$$(\mathcal{R}\hat{r})_m = \sum_{m'} D_{m'm}^{(1)}(\mathcal{R}^{-1})\hat{r}_{m'} \quad (10.146)$$

La loi de transformation des composantes sphériques de \vec{V} est donc¹⁴

$$U(\mathcal{R})V_qU^\dagger(\mathcal{R}) = \sum_{q'} D_{q'q}^{(1)}(\mathcal{R})V_{q'} \quad (10.147)$$

On pourrait naturellement vérifier cette expression en utilisant les formules explicites pour $D^{(1)}$ et la définition des composantes sphériques.

Notre objectif est de relier les éléments de matrice des diverses composantes d'un opérateur vectoriel entre des états $|jm\rangle$. Pour ce faire, examinons les propriétés de transformation par rotation du vecteur $|1jqm\rangle = V_q|jm\rangle$

$$\begin{aligned} U(\mathcal{R})|1jqm\rangle &= U(\mathcal{R})V_qU^\dagger(\mathcal{R})U(\mathcal{R})|jm\rangle \\ &= \sum_{q'm'} D_{q'q}^{(1)}(\mathcal{R})D_{m'm}^{(j)}(\mathcal{R})|1jq'm'\rangle \end{aligned}$$

Les vecteurs $|1jqm\rangle$ se transforment par rotation exactement de la même façon que les vecteurs $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ avec $j_1 = 1, j_2 = j, m_1 = q, m_2 = m$. On peut donc construire des vecteurs

$$|\tilde{j}\tilde{m}\rangle = \sum_{m+q=\tilde{m}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} |1jqm\rangle \quad (10.148)$$

qui se transforment par rotation suivant la loi

$$U(\mathcal{R})|\tilde{j}\tilde{m}\rangle = \sum_{\tilde{m}'} D_{\tilde{m}'\tilde{m}}^{(\tilde{j})} |\tilde{j}\tilde{m}'\rangle$$

Cette équation montre que les vecteurs $|\tilde{j}\tilde{m}\rangle$ forment une base standard de l'espace $\mathcal{E}(\tilde{j})$, à un facteur global multiplicatif près. Ces vecteurs ne seront pas en général normalisés à un, mais ils auront une norme identique, quel que soit \tilde{m}

$$\langle \tilde{j}\tilde{m} | \tilde{j}'\tilde{m}' \rangle = \delta_{\tilde{j}\tilde{j}'} \delta_{\tilde{m}\tilde{m}'} \alpha(\tilde{j})$$

Inversant (10.148)

$$V_q|jm\rangle = |1jqm\rangle = \sum_{\tilde{j}=j-1}^{j+1} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} |\tilde{j}\tilde{m}\rangle$$

14. On remarquera que l'ordre U, U^\dagger , ainsi que l'ordre des indices, sont différents de ceux de (10.143).

d'où

$$\begin{aligned}\langle j' m' | V_q | j m \rangle &= \sum_{\tilde{j}} C_{qm; \tilde{j} \tilde{m}}^{1j} \langle j' m' | 1j \tilde{j} \tilde{m} \rangle \\ &= \sum_{\tilde{j}} C_{qm; \tilde{j} \tilde{m}}^{1j} \delta_{j' \tilde{j}} \delta_{m' \tilde{m}} \beta(j', j) = C_{qm; j' m'}^{1j} \beta(j', j)\end{aligned}$$

Définissant l'élément de matrice réduit $\langle j' || V_q || j \rangle$ par

$$\langle j' || V || j \rangle = \beta(j', j)$$

on obtient le *théorème de Wigner-Eckart* pour les opérateurs vectoriels

$$\langle j' m' | V_q | j m \rangle = C_{qm; j' m'}^{1j} \langle j' || V || j \rangle \quad (10.149)$$

Toute la dépendance dans les nombres quantiques magnétiques m, m' et q est contenue dans le coefficient de Clebsch-Gordan $C_{qm; j' m'}^{1j}$, que l'on trouve dans des tables. À j fixé, les seules valeurs possibles de j' sont $j' = j - 1, j, j + 1$. Ce théorème se généralise aux *opérateurs tensoriels irréductibles* : voir l'exercice 10.7.18.

Comme application, calculons les éléments de matrice d'un opérateur vectoriel lorsque $j = j'$, en utilisant le fait que \vec{J} est un opérateur vectoriel dont les éléments de matrice obéissent à (10.149)

$$\langle j m' | J_q | j m \rangle = C_{qm; j m'}^{1j} \langle j || J || j \rangle$$

Il en découle une relation de proportionnalité pour les composantes cartésiennes V_k

$$\langle j m' | V_k | j m \rangle = K \langle j m' | J_k | j m \rangle$$

Pour évaluer la constante K , nous calculons le produit scalaire $\vec{J} \cdot \vec{V}$, qui est un opérateur scalaire

$$\begin{aligned}\langle j m | (\vec{J} \cdot \vec{V}) | j m \rangle &= \sum_{k, m''} \langle j m | J_k | j m'' \rangle \langle j m'' | V_k | j m \rangle \\ &= K \sum_{k, m''} \langle j m | J_k | j m'' \rangle \langle j m'' | J_k | j m \rangle \\ &= K \langle j m | \vec{J}^2 | j m \rangle = K j(j+1)\end{aligned}$$

En combinant ces équations on obtient pour les éléments de matrice de V_k

$$\langle j m' | V_k | j m \rangle = \frac{1}{j(j+1)} \langle j || (\vec{J} \cdot \vec{V}) || j \rangle \langle j m' | J_k | j m \rangle \quad (10.150)$$

Comme $(\vec{J} \cdot \vec{V})$ est un opérateur scalaire, $\langle j m | (\vec{J} \cdot \vec{V}) | j m \rangle$ est indépendant de m et égal à l'élément de matrice réduit $\langle j || (\vec{J} \cdot \vec{V}) || j \rangle$.

10.7 Exercices

10.7.1 Propriétés de \vec{J}

Vérifier par un calcul explicite que $[\vec{J}^2, J_z] = 0$. Vérifier également les identités (10.5) à (10.9).

10.7.2 Rotation d'un moment angulaire

Soit \mathcal{R} la rotation (10.30) d'angles (θ, ϕ) . Vérifier que le vecteur

$$U(\mathcal{R})|jm\rangle = e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} |jm\rangle$$

est vecteur propre de l'opérateur

$$J_x \sin \theta \cos \phi + J_y \sin \theta \sin \phi + J_z \cos \theta = \vec{J} \cdot \hat{n}$$

avec la valeur propre m ; \hat{n} est le vecteur unitaire dans la direction (θ, ϕ) . Suggestion : adapter (8.29).

10.7.3 Rotations (θ, ϕ)

Montrer que l'on peut écrire la rotation (10.30) $\mathcal{R}(\theta, \phi)$ sous la forme

$$\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_{y'}(\theta)\mathcal{R}_z(\phi)$$

où Oy' est l'axe obtenu à partir de Oy par une rotation de ϕ autour de Oz . Suggestion : montrer

$$\mathcal{R}_{y'}(\theta) = \mathcal{R}_z(\phi)\mathcal{R}_y(\theta)\mathcal{R}_z(-\phi)$$

10.7.4 Moments angulaires $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$

1. Retrouver à partir de (10.23) les opérateurs S_x , S_y et S_z du spin 1/2.

2. Toujours à partir de (10.23), calculer les matrices 3×3 représentatives de J_x , J_y et J_z pour le moment angulaire $j = 1$.

3. Montrer que pour $j = 1$, J_x, J_y, J_z sont reliés aux générateurs infinitésimaux (8.26) T_x, T_y, T_z par la transformation unitaire qui fait passer des composantes cartésiennes de \hat{r} à ses composantes sphériques (10.64) : $J_i = U^\dagger T_i U$ avec

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -i & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

4. Calculer la matrice de rotation $d^{(1)}(\theta)$

$$d^{(1)}(\theta) = \exp(-i\theta J_y)$$

et vérifier (10.39). Suggestion : montrer que $J_y^3 = J_y$.

10.7.5 Moment angulaire orbital

1. Utiliser les relations de commutation canoniques

$$[X_i, P_j] = i \delta_{ij} \hbar$$

et l'expression $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ pour montrer

$$[L_x, L_y] = iL_z$$

2. Démontrer les équations (10.47) à (10.49). Suggestion : montrer que pour une rotation infinitésimale d'angle $d\alpha$ autour de Ox , les angles θ et ϕ varient de

$$d\theta = -\sin\phi d\alpha \quad d\phi = -\frac{\cos\phi}{\tan\theta} d\alpha$$

En déduire L_x et $L_y = i[L_x, L_z]$.

3. Comme $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$, on pourrait s'attendre à une inégalité de Heisenberg

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Or dans un état propre de L_z où m est fixé, $\Delta L_z = 0$, tandis que $\Delta\phi \leq 2\pi$, puisque $0 \leq \phi \leq 2\pi$ et l'inégalité de Heisenberg est violée dans cet état. Où est la faute de raisonnement ? Suggestion : voir l'exercice 7.4.3, question 2. Pourquoi le raisonnement de l'exercice 9.6.1 est-il en défaut ?

10.7.6 Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques

1. Soit $\varphi(\vec{r}) = \varphi(x, y, z)$ la fonction d'onde d'une particule. Montrer que

$$\left(e^{-i\alpha L_z} \varphi \right) (0, 0, z) = \varphi(0, 0, z)$$

et en déduire que si une particule est localisée sur l'axe Oz , la composante z de son moment angulaire orbital est nulle. Interpréter qualitativement ce résultat.

2. On suppose que le moment angulaire orbital de la particule est l et on écrit sa fonction d'onde comme le produit d'un harmonique sphérique et d'une fonction d'onde radiale $g_l(r)$ qui ne dépend que de $r = |\vec{r}|$

$$\psi_{lm}(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \phi) g_l(r) = \langle \theta, \phi | lm \rangle g_l(r)$$

On s'intéresse uniquement à la partie angulaire. En utilisant

$$|\theta, \phi\rangle = U(\mathcal{R})|\theta = 0, \phi = 0\rangle$$

où \mathcal{R} est la rotation d'angles (θ, ϕ) , montrer que

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto \left[D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) \right]^*$$

On peut montrer que le coefficient de proportionnalité est $\sqrt{(2l+1)/(4\pi)}$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \left[D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) \right]^*$$

10.7.7 Indépendance de l'énergie par rapport à m

En supposant le potentiel $V(r)$ invariant par rotation, soit ψ_{lm} une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H\psi_{lm} = E_{lm}\psi_{lm}$$

Utiliser la relation de commutation $[L_+, H] = 0$ pour montrer que l'énergie E_{lm} est en fait indépendante de m .

10.7.8 Puits sphérique

1. Soit le potentiel $V(\vec{r})$ à symétrie sphérique (voir la figure 13.4)

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ &= 0 & r > R \end{aligned}$$

appelé puits sphérique. Établir l'équation donnant les états liés dans l'onde s ($l = 0$). Y a-t-il toujours un état lié? Comparer avec le cas du puits à une dimension.

2. On modélise le potentiel neutron-proton par un puits sphérique de rayon $R \simeq 2$ fm. Il existe un seul état lié neutron-proton dans l'onde s , le deutéron¹⁵, dont l'énergie de liaison est $B \simeq 2.2$ MeV. Calculer la profondeur V_0 du puits nécessaire pour qu'il y ait juste un état lié. Comparer V_0 avec l'énergie de liaison et montrer que $V_0 \gg B$.

3. Trouver les niveaux d'énergie dans l'onde s d'une particule dans le potentiel

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \quad A, B > 0$$

10.7.9 Atome d'hydrogène pour $l \neq 0$

1. Écrire l'équation qui généralise (10.89) lorsque le moment angulaire orbital $l \neq 0$. En déduire que l'on doit rajouter à (10.91) le terme

$$-l(l+1) \left[\frac{a_1}{x} + \sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1} x^{k-1} \right]$$

2. Montrer la relation de récurrence

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k$$

et en déduire $\alpha = \frac{1}{n}$, $k \geq l+1$ et par conséquent $l+1 \leq k \leq n$. Montrer que le spectre de l'atome d'hydrogène est donné par (10.93).

10.7.10 Éléments de matrice d'un potentiel

L'électron externe d'un atome est supposé dans un état p ($l = 1$). Sa fonction d'onde est

$$\psi_{1m}(\vec{r}) = Y_1^m(\theta, \phi) \frac{u_1(r)}{r}$$

15. En fait le deutéron a aussi une petite composante d'onde d .

Il est plongé dans un potentiel extérieur de la forme

$$V(\vec{r}) = Ax^2 + By^2 - (A + B)z^2$$

où A et B sont des constantes.

1. Montrer *sans calculs* que la matrice représentative de V dans la base $|lm\rangle$ est de la forme

$$V_{m'm} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \beta \\ 0 & \gamma & 0 \\ \beta & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre m' , $m = 1, 0, -1$.

2. Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de V . Montrer que $\langle L_z \rangle = 0$ dans un état propre de V .

3. Utiliser (10.63) pour calculer explicitement α , β et γ en fonction de A , B et

$$I = \int_0^\infty |u_1(r)|^2 r^2 dr$$

10.7.11 Équation radiale en dimension $d = 2$

On se propose d'écrire l'équivalent de l'équation (10.78) lorsque l'espace est à deux dimensions et le potentiel invariant par rotation. L'équation de Schrödinger indépendante du temps est

$$\left[-\frac{1}{2M} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

On utilise les coordonnées polaires dans le plan xOy

$$x = r \cos \theta \qquad y = r \sin \theta$$

On rappelle l'expression du laplacien en coordonnées polaires

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

et l'expression du moment angulaire

$$L_z = XP_y - YP_x = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$$

1. Montrer que les fonctions propres de L_z sont de la forme $\exp(im\theta)$.

2. On cherche des solutions de l'équation de Schrödinger de la forme

$$\psi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{r}} e^{im\theta} u_{nm}(r)$$

Montrer que $u_{nm}(r)$ et E_{nm} vérifient l'équation radiale

$$\left[-\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{m^2 + 1/4}{2Mr^2} \right] u_{nm}(r) = E u_{nm}(r)$$

Quelle est l'interprétation de n ? Quel est le comportement de $u_{nm}(r)$ lorsque $r \rightarrow 0$?

10.7.12 Propriété de symétrie des matrices $d^{(j)}$

En utilisant l'opérateur Y (10.100), démontrer la propriété de symétrie des matrices de rotation $d^{(j)}(\beta)$

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{-m', -m}^{(j)}(-\beta)$$

10.7.13 Diffusion de la lumière

1. On reprend l'étude de la transition radiative $A^* \rightarrow A + \gamma$ avec $j = j(A^*) = 1$ et $j' = j(A) = 0$. Déterminer dans le cas dipolaire électrique les amplitudes de transition pour un état initial $m = 1$ lorsque les photons polarisés circulairement sont émis dans le plan xOz avec une impulsion \vec{p} faisant un angle θ avec l'axe Oz

$$a_D^{m=1}(\theta) = \frac{1}{2} a(1 + \cos \theta)$$

$$a_G^{m=1}(\theta) = \frac{1}{2} a(1 - \cos \theta)$$

Généraliser au cas où le photon est émis dans la direction (θ, ϕ) .

2. On suppose que des photons d'impulsion $\vec{p} \parallel Oz$ arrivent sur l'atome dans son état fondamental A . L'atome absorbe le photon et est porté dans son état excité A^* ; il revient dans son état fondamental en émettant un photon dans une direction du plan xOz faisant un angle θ avec Oz . On appelle b l'amplitude d'absorption d'un photon de polarisation circulaire droite D

$$b = \langle j = 1, m = 1 | T' | D \rangle$$

Montrer que si les transitions sont dipolaires électriques, on a aussi

$$b = \langle j = 1, m = -1 | T' | G \rangle$$

Soit $c_{P \rightarrow P'}(\theta)$ l'amplitude de transition pour la diffusion d'un photon initial de polarisation circulaire P ($P = D$ ou G) sous un angle θ avec une polarisation finale P' . Montrer que

$$c_{P \rightarrow P'}(\theta) = \frac{ab}{2} (1 \pm \cos \theta)$$

où le signe (+) correspond à $P = P'$ et le signe (-) à $P \neq P'$. En déduire pour une polarisation linéaire $|x\rangle$ du photon initial et pour des polarisations linéaires $|x'\rangle$ ou $|y\rangle$ du photon diffusé, définies par rapport à la direction de propagation de ce photon

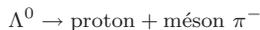
$$c_{x \rightarrow x'}(\theta) = ab \cos \theta$$

$$c_{x \rightarrow y}(\theta) = 0$$

Donner une analogie classique qui conduit également à une distribution angulaire en $\cos^2 \theta$ avec un rayonnement polarisé dans le plan xOz . Généraliser au cas où le photon est émis dans la direction (θ, ϕ) .

10.7.14 Mesure du moment magnétique du Λ^0

La particule Λ^0 est une particule de charge nulle, de masse $M \simeq 1115 \text{ MeV}/c^2$, de spin $1/2$ et de vie moyenne $\tau \simeq 2.5 \times 10^{-10} \text{ s}$. Un de ses modes de désintégration principaux (66 % des cas) est



où le proton a un spin $1/2$ et le méson π^- un spin 0 .

1. Dans le référentiel où le Λ^0 est au repos, on suppose le proton émis avec une impulsion \vec{p} dans la direction Oz , choisie comme axe de quantification du moment angulaire. Soit m la projection suivant Oz du spin du Λ^0 et m' celle du proton. Pourquoi doit-on avoir $m = m'$? Soit a et b les amplitudes de probabilité des transitions

$$\begin{aligned} a &: \Lambda^0 \left(m = \frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} \left(m' = \frac{1}{2}; \vec{p} \parallel Oz \right) \\ b &: \Lambda^0 \left(m = -\frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} \left(m' = -\frac{1}{2}; \vec{p} \parallel Oz \right) \end{aligned}$$

Montrer que $|a| = |b|$ si la parité est conservée dans la désintégration. Suggestion : examiner l'action d'une réflexion par rapport au plan xOz .

2. Le proton est maintenant émis avec une impulsion \vec{p} parallèle à une direction \hat{n} du plan xOz , faisant un angle θ avec Oz . Soit m' la projection du spin du proton sur la direction \hat{n} et $a_{m'm}(\theta)$ l'amplitude

$$a_{m'm}(\theta) : \Lambda^0 \left(m = \frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} (m'; \vec{p} \parallel \hat{n})$$

Exprimer

$$a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta) = a_{++}(\theta) \quad \text{et} \quad a_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta) = a_{-+}(\theta)$$

en fonction de a , b et θ .

3. On suppose que le Λ^0 est produit dans un état de spin $m = 1/2$. Montrer que la distribution angulaire du proton est de la forme

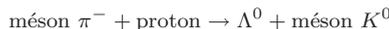
$$w(\theta) = w_0(1 + \alpha \cos \theta)$$

Calculer α en fonction de a et b . L'expérience montre que

$$\alpha \simeq -0.645 \pm 0.016$$

Que peut-on en conclure sur la conservation de la parité dans la désintégration ?

4. Le Λ^0 est produit en bombardant une cible de protons au repos par un faisceau de mésons π^- dans la réaction (figure 10.13)



Par conservation de l'impulsion, \vec{p}_{π^-} , \vec{p}_{Λ^0} et \vec{p}_{K^0} sont situés dans un même plan. On choisit pour axe Oz une perpendiculaire à ce plan

$$\hat{z} = \frac{\vec{p}_{\pi^-} \times \vec{p}_{\Lambda^0}}{|\vec{p}_{\pi^-} \times \vec{p}_{\Lambda^0}|}$$

et comme axe Oy la direction \vec{p}_{Λ^0} de l'impulsion du Λ^0 . Sachant que la parité est conservée dans la réaction de production et que les protons cibles ne sont pas polarisés, montrer que si \vec{S} est l'opérateur de spin du Λ^0 , alors les valeurs moyennes des composantes S_x et S_y sont nulles : $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$.

5. On suppose pour simplifier¹⁶ que $\langle S_z \rangle = 1/2$ et que tous les Λ^0 ont la même durée de vie τ et se désintègrent au même point. Le système est plongé dans un champ magnétique

16. En fait $|\langle S_z \rangle| < 1/2$ et on doit faire appel au formalisme de l'opérateur statistique.

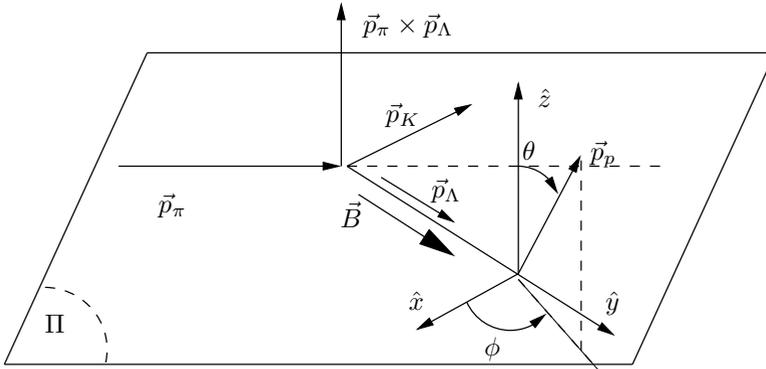


FIG. 10.13 – Cinématique de la production et de la désintégration du Λ^0 .

\vec{B} uniforme et constant parallèle à Oy . Le Λ^0 possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ relié à son spin \vec{S} par un facteur gyromagnétique γ : $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$. Décrire qualitativement le mouvement du spin du Λ^0 . Déterminer son orientation au moment de la désintégration en fonction de τ , de B et γ . Montrer que la distribution angulaire du proton émis dans la désintégration est

$$w(\theta, \phi) = w_0(1 + \alpha \cos \Theta)$$

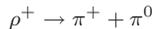
avec

$$\cos \Theta = \cos \lambda \cos \theta + \sin \lambda \sin \theta \cos \phi$$

où les angles θ et ϕ sont les angles polaire et azimutal de l'impulsion du proton. Quelle est la valeur de l'angle λ ? En déduire que la détermination de $w(\theta, \phi)$ permet de mesurer le facteur gyromagnétique γ . On négligera la courbure de la trajectoire du proton due au champ magnétique ainsi que les transformations des angles dues au mouvement du Λ^0 .

10.7.15 Production et désintégration du méson ρ^+

1. Le méson ρ^+ est une particule de spin 1 qui se désintègre en deux mésons π , particules de spin 0



On choisit de se placer dans un référentiel où le méson ρ^+ est au repos ; on suppose que son spin est quantifié suivant l'axe Oz et qu'il se trouve initialement dans l'état de spin $|1m\rangle$, $m = -1, 0, 1$. Soit

$$a_m(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | T | 1m \rangle$$

l'amplitude de transition pour la désintégration du méson ρ^+ dans l'état initial $|1m\rangle$ avec émission du méson π^+ dans la direction d'angles polaire et azimutal (θ, ϕ) . Montrer que l'on peut écrire

$$a_m(\theta, \phi) = a \left[D_{m0}^{(1)}(\theta, \phi) \right]^*$$

Quelle est la signification physique de a ? En déduire la distribution angulaire $W_m(\theta, \phi)$ du méson π^+ , c'est-à-dire la probabilité d'émission du méson π^+ dans la direction (θ, ϕ) lorsque le méson ρ^+ est initialement dans l'état $|1m\rangle$. Montrer que $W_m(\theta, \phi)$ est indépendant de ϕ (pourquoi ?) et donner son expression explicite en fonction de θ pour les trois valeurs de m , $m = -1, 0, 1$.

2. Si l'état initial du méson ρ^+ est une combinaison linéaire d'états $|1m\rangle$

$$|\lambda\rangle = \sum_{m=-1,0,1} c_m |1m\rangle \quad \sum_{m=-1,0,1} |c_m|^2 = 1$$

quelle sera la distribution angulaire $W_\lambda(\theta, \phi)$?

3. En général le méson ρ^+ n'est pas produit dans un état pur, mais dans un mélange décrit par un opérateur statistique ρ

$$\rho = \sum_\lambda p_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| \quad p_\lambda \geq 0 \quad \sum_\lambda p_\lambda = 1$$

Montrer que la distribution angulaire est alors

$$W(\theta, \phi) = \rho_{00} \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \sin^2 \theta (\rho_{11} + \rho_{-1,-1}) \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\theta \operatorname{Re} (\rho_{-10} e^{-i\phi} - \rho_{10} e^{i\phi}) - \sin^2 \theta \operatorname{Re} (\rho_{1,-1} e^{2i\phi})$$

4. Le méson ρ^+ est produit dans la réaction : méson π^+ (\vec{p}_1) + proton ($\vec{p} = 0$) \rightarrow méson ρ^+ (\vec{p}_2) + proton (\vec{p}_3), où \vec{p}_i dénote l'impulsion des particules. On choisit pour axe Oz la normale \hat{n} au plan de la réaction

$$\hat{n} = \frac{\vec{p}_1 \times \vec{p}_2}{|\vec{p}_1 \times \vec{p}_2|}$$

La parité Π est conservée dans cette réaction et on suppose que les protons cibles ne sont pas polarisés. Montrer que la valeur moyenne $\langle \vec{J} \rangle = \operatorname{Tr}(\rho \vec{J})$ du spin du méson ρ^+ est dirigée suivant \hat{n} : $\langle \vec{J} \rangle = c \hat{n}$. En déduire

$$\operatorname{Tr}(\rho J_x) = \operatorname{Tr}(\rho J_y) = 0$$

Utiliser le fait que la cinématique de la réaction de production est invariante dans l'opération

$$\mathcal{Z} = \Pi e^{-i\pi J_z} \quad [\rho, \mathcal{Z}] = 0$$

pour montrer que

$$\rho_{mm'} = (-1)^{m-m'} \rho_{mm'}$$

ρ ne dépend en fait que de quatre paramètres réels et a la forme d'un damier

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \rho_{1,-1} \\ 0 & \rho_{00} & 0 \\ \rho_{1,-1}^* & 0 & \rho_{-1,-1} \end{pmatrix}$$

10.7.16 Interaction de deux dipôles

Le hamiltonien d'interaction de deux dipôles magnétiques portés par des particules de spin $1/2$ s'écrit

$$H = \frac{K}{r^3} [3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2] = \frac{K}{r^3} S_{12}$$

où \vec{r} est le vecteur joignant les deux dipôles et $\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ les matrices de Pauli des deux particules. Soit

$$\vec{\Sigma} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

le spin total. Montrer que

$$S_{12} = 2 [3Q^2 - \vec{\Sigma}^2] \quad Q^2 = (\vec{\Sigma} \cdot \hat{r})^2$$

et que $Q^4 = Q^2 : Q^2$ est un projecteur. En déduire que $S_{12}^2 = 4\vec{\Sigma}^2 - 2S_{12}$ et que les valeurs propres de S_{12} sont 0, 2 et -4.

10.7.17 Désintégration du Σ^0

La particule Σ^0 , formée d'un quark up, d'un quark down et d'un quark étrange, de masse $1192 \text{ MeV}/c^2$ et de spin $1/2$, se désintègre par une transition radiative en une particule Λ^0 , également formée d'un quark up, d'un quark down et d'un quark étrange, de masse $1115 \text{ MeV}/c^2$ et de spin $1/2$

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma$$

Le Σ^0 est supposé au repos, son spin quantifié suivant Oz et la projection de son spin sur cet axe est m ; l'impulsion \vec{p} du photon est située dans le plan xOz et fait un angle θ avec l'axe Oz .

1. On suppose d'abord que le photon est émis dans la direction Oz ($\theta = 0$). Si m' est la projection du spin du Λ^0 sur Oz , montrer que les amplitudes non nulles sont (T est l'opérateur de transition)

$$\begin{aligned} a &= \langle D, m' = -\frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = \frac{1}{2} \rangle \\ b &= \langle G, m' = \frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = -\frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

tandis que

$$\begin{aligned} c &= \langle D, m' = \frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = \frac{1}{2} \rangle = 0 \\ d &= \langle G, m' = -\frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = -\frac{1}{2} \rangle = 0 \end{aligned}$$

autrement dit $m' = m$ est interdit et les transitions permises correspondent à $m' = -m$ quand $\theta = 0$. La notation (D , G) spécifie l'état de polarisation circulaire droite (D) ou gauche (G) du photon.

2. L'opérateur de transition T est invariant dans l'opération parité. En déduire $|a| = |b|$. Si η est le produit des parités du Σ^0 et du Λ^0 , aussi appelé parité relative des deux particules

$$\eta = \eta_{\Sigma^0} \eta_{\Lambda^0}$$

montrer que $a = \eta b$. L'expérience montre que $\eta = 1$, et donc $a = b$.

3. On suppose que la valeur initiale de la projection du spin du Σ^0 est $m = 1/2$. Soit $a_D^{m'}(\theta)$ et $a_G^{m'}(\theta)$ les amplitudes de transition où m' est la projection du spin du Λ^0 sur la direction de \vec{p} : c'est donc la valeur propre de $\vec{S} \cdot \hat{p}$. Calculer $a_D^{m'}$ et $a_G^{m'}$ en fonction de a et θ . Quelles sont les valeurs permises pour m' ?

10.7.18 Opérateurs tensoriels irréductibles

Un opérateur tensoriel irréductible d'ordre k , $T^{(k)}$ possède $(2k + 1)$ composantes $T_q^{(k)}$

$$q = -k, -k + 1, \dots, k - 1, k$$

et se transforme par une rotation \mathcal{R} suivant

$$U(\mathcal{R})T_q^{(k)}U^\dagger(\mathcal{R}) = \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)}(\mathcal{R})T_{q'}^{(k)}$$

Montrer que le vecteur

$$|kjqm\rangle = T_q^{(k)}|jm\rangle$$

se transforme par rotation comme un vecteur $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ avec $j_1 = k, j_2 = j, m_1 = q, m_2 = m$. En passant par l'intermédiaire des vecteurs

$$|k j \tilde{j} \tilde{m}\rangle = \sum_{q+m=\tilde{m}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{kj} |k j q m\rangle$$

montrer la forme générale du théorème de Wigner-Eckart

$$\langle j' m' | T_q^{(k)} | j m \rangle = C_{qm;j' m'}^{kj} \langle j' || T^{(k)} || j m \rangle$$

et en déduire

$$|j - k| \leq j' \leq j + k$$

10.8 Bibliographie

La présentation de ce chapitre, inspirée par celle de de Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitres 17 et 18, met particulièrement l'accent sur les propriétés et l'utilisation des matrices de rotation. Pour une présentation plus classique, on se reportera à Messiah [1959], chapitre XIII, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre VII ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 10. On trouvera de nombreuses applications à la physique des particules élémentaires dans le livre de Gasiorowicz [1966]; le chapitre 4 de ce livre expose aussi l'analyse de Wigner fondée sur l'invariance par le groupe de Poincaré, qui montre en particulier qu'une particule de masse nulle a seulement deux états d'hélicité. Sur ce dernier sujet, voir aussi Weinberg [1995], chapitre 2.

Chapitre 11

Oscillateur harmonique

L'OSCILLATEUR HARMONIQUE est un système d'une grande importance en mécanique classique, car il décrit les petites oscillations de systèmes physiques autour d'une position d'équilibre stable; son importance n'est pas moindre en mécanique quantique. Pour fixer les idées, et afin de prendre l'exemple simple d'un mouvement à une dimension, examinons le cas des vibrations d'une molécule diatomique dont les deux noyaux ont des masses m_1 et m_2 . On prend pour axe des x la droite joignant les deux noyaux et on note $x = x_1 - x_2$ la coordonnée de la particule relative (exercice 8.5.6). À l'équilibre, les deux noyaux se trouvent à une distance $x = x_0$. En physique classique, le hamiltonien de la particule relative s'écrit

$$H_{\text{cl}} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (11.1)$$

où $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ est la masse réduite. Développons $V(x)$ au voisinage de $x = x_0$:

$$V = V(x_0) + (x - x_0)V'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 V''(x_0) + \dots$$

La constante $V(x_0)$ est en général sans intérêt et on peut la prendre égale à zéro par une redéfinition du zéro d'énergie. Comme x_0 est une position d'équilibre, $V'(x_0) = 0$, et si cette position d'équilibre est stable, $V''(x_0) > 0$. Posant

$$q = x - x_0, \quad C = V''(x_0), \quad \omega = \sqrt{\frac{C}{m}}$$

le hamiltonien (11.1) devient

$$H_{\text{cl}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \quad (11.2)$$

où ω est la fréquence des oscillations autour de la position d'équilibre.

Nous venons d'introduire l'exemple le plus simple, celui d'un oscillateur isolé, dont le traitement quantique fera l'objet de la section 11.1 dans une base particulière, celle des états propres de l'énergie. Une autre « base », celle des états cohérents, sera examinée dans la section suivante. Elle trouve de nombreuses applications en optique quantique. L'oscillateur harmonique est à la base de la quantification du champ électromagnétique décrite dans la section 11.3, qui nous permettra de donner un statut théorique au concept de photon. La section 11.4 développe plusieurs applications importantes de cette quantification.

Il peut sembler surprenant de trouver dans la dernière section de ce chapitre l'étude du mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique. Nous verrons que, dans le cas d'un champ magnétique constant, les équations du mouvement se ramènent à celles d'un oscillateur harmonique. L'étude des niveaux d'énergie dans un champ magnétique, ou niveaux de Landau, sera précédée d'une définition de l'invariance de jauge locale, qui fixe la forme de l'interaction d'une particule chargée avec le champ électromagnétique.

11.1 L'oscillateur harmonique simple

11.1.1 Opérateurs de création et d'annihilation

Notre point de départ sera le hamiltonien (11.2). Ce hamiltonien se transpose en mécanique quantique si l'on interprète les quantités p et q comme des opérateurs : $p \rightarrow P$, $q \rightarrow Q$ et si l'on impose les relations de commutation canoniques

$$[Q, P] = i\hbar I \quad (11.3)$$

Comme souvent en physique, il est utile de définir des quantités sans dimensions, et nous introduirons les opérateurs \hat{P} et \hat{Q} par

$$Q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \hat{Q} \quad P = (m\hbar\omega)^{1/2} \hat{P} \quad (11.4)$$

qui obéissent à relation de commutation

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = iI \quad (11.5)$$

Nous allons construire les vecteurs propres de H par une méthode algébrique, suivant l'esprit de celle qui a été utilisée pour le moment angulaire. Le principe de cette méthode consiste à introduire des opérateurs a et a^\dagger , appelés respectivement *opérateur d'annihilation* (ou de destruction) et *opérateur de création* de l'oscillateur harmonique, qui feront passer d'une valeur propre de H à une autre, tout comme J_- et J_+ font passer d'une valeur propre de J_z à

une autre. Nous définissons donc les opérateurs¹

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \quad (11.6)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad (11.7)$$

Un calcul immédiat permet d'établir les relations de commutation de a et a^\dagger

$$\boxed{[a, a^\dagger] = I} \quad (11.8)$$

ainsi que trois expressions utiles de H

$$\boxed{H = \frac{1}{2} \hbar\omega (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)} \quad (11.9)$$

Nous avons introduit l'opérateur N , ou opérateur *nombre de particules*²

$$\boxed{N = a^\dagger a} \quad (11.10)$$

qui vérifie les relations de commutation suivantes avec a et a^\dagger

$$[N, a] = -a \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (11.11)$$

Compte tenu de (11.9), il est équivalent de diagonaliser N ou H .

11.1.2 Diagonalisation du hamiltonien

Supposons que nous ayons trouvé un vecteur propre $|\nu\rangle$ de N , normalisable, mais pas nécessairement unitaire, de valeur propre ν

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

On doit avoir $\nu \geq 0$: en effet

$$0 \leq \|a|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \langle\nu|N|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle$$

ce qui implique que si $\nu = 0$, alors $a|\nu\rangle = 0$. Dans le cas contraire, $a|\nu\rangle$ est un vecteur de norme carrée $\nu\langle\nu|\nu\rangle$, et c'est un vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu - 1)$, car, en utilisant (11.11)

$$Na[|\nu\rangle] = a(N - 1)|\nu\rangle = (\nu - 1)[a|\nu\rangle]$$

1. Afin de nous conformer aux notations usuelles, nous dérogeons à notre règle selon laquelle les opérateurs sont notés par des lettres majuscules.

2. Cette terminologie sera justifiée pour les photons au § 11.3.1 et au chapitre 14 dans le cas général.

Enfin $a^\dagger|\nu\rangle$ est certainement un vecteur non nul, de norme carrée $(\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$, et c'est un vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu+1)$. En effet, d'une part

$$0 \leq \|a^\dagger|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|aa^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$$

et d'autre part

$$N[a^\dagger|\nu\rangle] = a^\dagger(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)[a^\dagger|\nu\rangle]$$

Si $\nu > 0$, nous avons vu que $a|\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu-1)$. Si $(\nu-1) = 0$, $a^2|\nu\rangle = 0$. Si $(\nu-1) > 0$, on peut construire le vecteur non nul $a^2|\nu\rangle$, de valeur propre $(\nu-2)$, et continuer le processus si $(\nu-2) > 0$. La suite des vecteurs

$$a^0|\nu\rangle, a^1|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \dots, a^p|\nu\rangle \dots$$

est une suite de vecteurs propres de N correspondant aux valeurs propres

$$\nu, \nu-1, \dots, (\nu-p) \dots$$

Ceci montre que ν est nécessairement un nombre entier. Sinon, pour p suffisamment grand, $(\nu-p)$ deviendrait négatif et le vecteur $a^p|\nu\rangle$ serait de norme négative. Il est donc nécessaire que la série s'arrête pour une valeur entière $\nu = p$ telle que le vecteur $a^{p+1}|\nu\rangle = 0$.

La suite des vecteurs

$$(a^\dagger)^0|\nu\rangle, (a^\dagger)^1|\nu\rangle, (a^\dagger)^2|\nu\rangle, \dots, (a^\dagger)^p|\nu\rangle \dots$$

forme une suite de vecteurs propres de N correspondant aux valeurs propres

$$\nu, \nu+1, \dots, (\nu+p) \dots$$

En résumé, les valeurs propres de N sont des nombres entiers :

$$n = 0, 1, 2, \dots, n, \dots$$

On note $|n\rangle$ les vecteurs propres de N correspondant à la valeur propre n

$$N|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \quad (11.12)$$

ou de façon équivalente pour H

$$H|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (11.13)$$

Les valeurs propres E_n de l'énergie étiquetées par l'entier n sont de la forme

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (11.14)$$

Contrairement au cas de l'oscillateur classique, le niveau d'énergie E_0 du fondamental n'est pas zéro, ce qui correspondrait à une particule immobile à l'équilibre, mais $E_0 = \hbar\omega/2$: c'est l'énergie de point zéro de l'oscillateur harmonique. On peut en donner une explication qualitative grâce aux inégalités de Heisenberg (exercice 9.6.4). Il ne faut surtout pas confondre le vecteur propre $|0\rangle$ de l'état fondamental et le vecteur nul de l'espace de Hilbert \mathcal{H} , $|\varphi\rangle = 0$! On remarque aussi que les niveaux d'énergie sont équidistants : c'est bien ce que l'on constate expérimentalement, en première approximation, pour les niveaux de vibration d'une molécule.

Les vecteurs $|n\rangle$ sont bien sûr orthogonaux si $n \neq n'$ et nous les supposons désormais unitaires. Il reste à montrer qu'ils ne sont pas dégénérés, qu'ils forment une base de l'espace de Hilbert \mathcal{H} , et avant tout que N a au moins un vecteur propre, ce qui n'est pas garanti pour un opérateur, même hermitien, dans un espace de dimension infinie ! Nous construirons explicitement dans la section suivante le vecteur $|0\rangle$ et nous montrerons qu'il est unique. Cela suffit à montrer que la série de vecteurs

$$|0\rangle, (a^\dagger)^1|0\rangle, (a^\dagger)^2|0\rangle, \dots, (a^\dagger)^n|0\rangle \dots \quad (11.15)$$

est unique. En effet nous pouvons raisonner par récurrence en supposant le vecteur $|n\rangle$ non dégénéré. Soit $|n+1\rangle$ un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $(n+1)$: $N|n+1\rangle = (n+1)|n+1\rangle$. Alors, c étant un nombre complexe $\neq 0$,

$$a|n+1\rangle = c|n\rangle \Rightarrow a^\dagger a|n+1\rangle = ca^\dagger|n\rangle \Rightarrow |n+1\rangle = \frac{ca^\dagger}{n+1}|n\rangle$$

ce qui montre que $|n+1\rangle \propto a^\dagger|n\rangle$: si $|0\rangle$ est unique, le vecteur $|n\rangle$ est aussi unique à un facteur de phase près.

Comme dans le cas de la base standard $|jm\rangle$ du moment angulaire, il est commode de fixer un fois pour toutes la phase relative des vecteurs propres de H . Si $|n\rangle$ est de norme unité, le vecteur $a^\dagger|n\rangle$ est de norme $\sqrt{n+1}$ et par conséquent

$$a^\dagger|n\rangle = e^{i\alpha} \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Le choix de phase le plus simple est $\alpha = 0$ et on a alors

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (11.16)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (11.17)$$

Les équations (11.16) et (11.17) mettent en évidence le rôle de création et de destruction de a^\dagger et a : a^\dagger augmente n d'une unité, a diminue n d'une unité. Les vecteurs $|n\rangle$ se déduisent de $|0\rangle$ par

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle} \quad (11.18)$$

Il reste à montrer que les vecteurs $|n\rangle$ forment une base de \mathcal{H} : nous renvoyons ce point de rigueur à l'exercice 11.6.2.

11.1.3 Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique

En mécanique ondulatoire, le hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \quad (11.19)$$

En définissant comme dans (11.4) la variable sans dimension u

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} u \quad -i\hbar \frac{d}{dq} = -i(\hbar m\omega)^{1/2} \frac{d}{du} \quad (11.20)$$

le hamiltonien (11.19) devient

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \quad (11.21)$$

On aurait pu obtenir directement cette forme de H à partir de la première des équations (11.9) en remarquant que u et $-i\hbar d/du$ ne sont autres que les réalisations dans l'espace $L_u^{(2)}(\mathbb{R})$ des opérateurs \hat{Q} et \hat{P} . Il serait possible de chercher directement les solutions de

$$H\varphi_n(u) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \varphi_n(u) = E_n \varphi_n(u) \quad (11.22)$$

avec $\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle$, mais nous nous limiterons à montrer l'unicité du vecteur $|0\rangle$ dont nous nous sommes servis ci-dessus. Comme $\langle u|0\rangle = \varphi_0(u)$, l'équation $a|0\rangle = 0$ devient

$$\langle u|a|0\rangle = \left[u + \frac{d}{du} \right] \varphi_0(u) = 0$$

qui s'intègre immédiatement en

$$\varphi_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-u^2/2} \quad (11.23)$$

Le facteur $\pi^{-1/4}$ assure que φ_0 est normalisé à l'unité. Cette solution est unique, ce qui prouve que les vecteurs propres donnés par la série (11.15) sont non dégénérés. Il est immédiat de vérifier que $\varphi_0(u)$ obéit à (11.22) avec la valeur propre $\hbar\omega/2$. La fonction $\varphi_0(u)$ vérifie bien la propriété caractéristique de la fonction d'onde d'un état fondamental : elle ne s'annule pas, ou de façon équivalente, elle n'a pas de nœuds.

Déterminons enfin la forme explicite des fonctions d'onde $\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle$. Multiplions à gauche (11.18) écrit sous la forme

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\hat{Q} - i\hat{P} \right)^n |0\rangle$$

par le bra $\langle u|$

$$\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} \quad (11.24)$$

Les fonctions $\varphi_n(u)$ sont orthogonales pour $n \neq n'$ et normalisées à l'unité en raison de $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$. Les fonctions définies dans l'équation (11.24) sont reliées aux *polynômes de Hermite* $H_n(u)$

$$e^{-u^2/2} H_n(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} \quad (11.25)$$

par

$$\varphi_n(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-u^2/2} H_n(u) \quad (11.26)$$

Les premiers polynômes de Hermite sont

$$H_0(u) = 1 \quad H_1(u) = 2u \quad H_2(u) = 4u^2 - 2 \dots$$

En résumé, on peut établir un « dictionnaire » permettant de passer de la « représentation n » du § 11.1.2 à la représentation du § 11.1.3 des états propres de H en termes de fonctions d'onde $\varphi_n(u)$. Dans le résumé ci-dessous, la première équation est écrite dans la base $|n\rangle$, et la seconde est l'équation équivalente en mécanique ondulatoire.

- Équation aux valeurs propres

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) |n\rangle &= \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \\ \iff \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{du^2} + u^2\right) \varphi_n(u) &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \varphi_n(u) \end{aligned}$$

- Relations d'orthonormalisation

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \iff \int_{-\infty}^{\infty} du \varphi_n^*(u) \varphi_m(u) = \delta_{nm}$$

- Relation de fermeture

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I \iff \sum_n \varphi_n(u) \varphi_n^*(v) = \delta(u-v)$$

La conjugaison complexe est en fait superflue car les fonctions $\varphi_n(u)$ sont réelles.

11.2 États cohérents

11.2.1 Définition et propriétés élémentaires

Les *états cohérents*, ou *états semi-classiques*, sont des états quantiques remarquables de l'oscillateur harmonique : dans ces états, les valeurs moyennes des opérateurs position et impulsion ont des propriétés aussi proches que possibles des valeurs classiques de la position $q(t)$ et de l'impulsion $p(t)$. L'exercice 11.6.3 montre que l'expression des états cohérents découle de cette propriété. Nous les définirons ci-dessous *a priori* et nous vérifierons qu'ils ont bien les propriétés annoncées. Soit $z(t)$ un nombre complexe, combinaison de $q(t)$ et $p(t)$

$$z(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q(t) + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q}(t) + \hat{p}(t)) \quad (11.27)$$

si l'on relie (q, p) à (\hat{q}, \hat{p}) de la même manière que (Q, P) à (\hat{Q}, \hat{P}) (11.4) : $z(t)$ est « l'équivalent classique » de $a(t)$. À partir des équations du mouvement classiques

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{1}{m} p(t) \quad \frac{dp(t)}{dt} = -m\omega^2 q(t) \quad (11.28)$$

on montre que $z(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$\frac{dz}{dt} = -i\omega z(t) \quad (11.29)$$

qui a pour solution

$$z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

Le nombre complexe $z(t)$ décrit une trajectoire circulaire dans le plan complexe en z avec une vitesse uniforme. On déduit de $z(t)$ la position $q(t)$, l'impulsion $p(t)$ et l'énergie de l'oscillateur

$$\begin{aligned} q(t) &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} z(t) \\ p(t) &= \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im} z(t) \\ E &= \hbar\omega |z_0|^2 \end{aligned} \quad (11.30)$$

Il est facile de montrer que la valeur moyenne $\langle a \rangle(t)$ de l'opérateur d'annihilation a obéit à la même équation différentielle que $z(t)$ (exercice 11.6.3). Ceci suggère de chercher les vecteurs propres de l'opérateur a , dont nous allons montrer qu'ils existent³, car les valeurs propres correspondantes obéiront

3. Il n'est pas évident *a priori* que a , qui n'est pas un opérateur hermitien, ait des vecteurs propres, et encore moins que ces vecteurs propres forment une base de \mathcal{H} .

alors à (11.29). Ces vecteurs propres sont précisément les états cohérents. Un état cohérent $|z\rangle$ est défini par

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{za^\dagger} |0\rangle \quad (11.31)$$

Énonçons quelques propriétés des états cohérents et vérifions tout d'abord que $|z\rangle$ est vecteur propre de a .

- L'état cohérent $|z\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur d'annihilation (non hermitien) a avec la valeur propre z

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad (11.32)$$

Pour le montrer, on peut utiliser directement (11.31), mais on peut aussi se servir de l'identité (2.53) de l'exercice 2.4.11 qui s'écrit ici

$$\begin{aligned} e^{a^\dagger z} a e^{-a^\dagger z} &= a + z[a^\dagger, a] = a - z \\ e^{a^\dagger z} a &= (a - z)e^{a^\dagger z} \end{aligned}$$

Il suffit d'appliquer les deux membres de cette dernière équation sur le vecteur $|0\rangle$ pour obtenir (11.32).

- Le vecteur $|z\rangle$ est unitaire : $\langle z|z\rangle = 1$ et le module carré du produit scalaire $\langle z|z'\rangle$

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z - z'|^2) \quad (11.33)$$

est une mesure de la « distance » entre les deux états cohérents.

- La distribution des valeurs de n suit une loi de Poisson

$$p(n) = |\langle n|z\rangle|^2 = \frac{|z|^{2n}}{n!} e^{-|z|^2} \quad (11.34)$$

ce qui donne pour la valeur moyenne $\langle n\rangle = |z|^2$ et pour la dispersion $\Delta n = |z|$.

- L'action de $\exp(\lambda N)$ sur un état cohérent, où λ est un nombre imaginaire pur ($|\exp \lambda| = 1$), redonne un état cohérent

$$\begin{aligned} e^{\lambda N} |z\rangle &= e^{\lambda N} e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{\lambda n} |n\rangle \\ &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^\lambda z)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |e^\lambda z\rangle \end{aligned} \quad (11.35)$$

La relation $|\exp \lambda| = 1$ a été utilisée uniquement pour obtenir la dernière égalité.

- Les états cohérents forment une base « surcomplète »

$$\int \frac{d\text{Re } z d\text{Im } z}{\pi} |z\rangle\langle z| = I \quad (11.36)$$

Pour montrer cette identité, on la prend en sandwich entre le bra $\langle n|$ et le ket $|m\rangle$; posant $z = \rho \exp(i\theta)$

$$\begin{aligned} \int \frac{d\text{Re } z d\text{Im } z}{\pi} \langle n|z\rangle\langle z|m\rangle &= \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi} \frac{z^n z^{*m}}{\sqrt{n!m!}} e^{-\rho^2} \\ &= \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi} \frac{\rho^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} e^{i(n-m)\theta} e^{-\rho^2} = \delta_{nm} \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le changement de variables $\rho^2 = u$ et

$$\int_0^\infty du u^n e^{-u} = n!$$

Une conséquence directe de (11.36) est que les « éléments de matrice diagonaux » $\langle z|A|z\rangle$ suffisent à définir complètement un opérateur A (exercice 11.6.3).

Ces propriétés permettent de calculer aisément les valeurs moyennes

$$\begin{aligned} \langle z|Q|z\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle z|(a + a^\dagger)|z\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re } z \\ \langle z|P|z\rangle &= \sqrt{2\hbar m\omega} \text{Im } z \\ \langle z|H|z\rangle &= \hbar\omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (11.37)$$

Ceci est le résultat classique (11.30), si l'on ignore l'énergie de point zéro $\hbar\omega/2$ dans l'expression de $\langle H\rangle$. La valeur moyenne de N est $\langle z|N|z\rangle = |z|^2$, résultat que l'on prouve directement à partir de (11.10) ou de la distribution de Poisson (11.34). De plus, si l'état de l'oscillateur harmonique est un état cohérent au temps $t = 0$, cette propriété est conservée par l'évolution temporelle. Supposons en effet que l'oscillateur se trouve au temps $t = 0$ dans l'état cohérent $|\varphi(t = 0)\rangle = |z_0\rangle$ et calculons $|\varphi(t)\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |z_0\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-i\omega Nt} |z_0\rangle = e^{-i\omega t/2} |z_0 e^{-i\omega t}\rangle \quad (11.38)$$

où nous avons utilisé (11.35). Au facteur de phase $\exp(-i\omega t/2)$ près, on retrouve l'évolution classique $z(t) = z_0 \exp(-i\omega t)$. Si l'on part d'un état cohérent au temps $t = 0$, l'évolution des valeurs moyennes $\langle Q\rangle$, $\langle P\rangle$ et $\langle H\rangle$ suit très exactement l'évolution classique de $q(t)$, $p(t)$ et E . Nous avons donc montré que les valeurs moyennes dans un état cohérent suivent les lois classiques.

Il est également instructif de calculer les dispersions. Évaluons par exemple $\langle Q^2 \rangle$ dans l'état cohérent $|z\rangle$

$$\begin{aligned}\langle Q^2 \rangle_z &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z|a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a|z\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z|a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1|z\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + (z + z^*)^2] = \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + 4(\operatorname{Re} z)^2]\end{aligned}$$

Un calcul analogue (exercice 11.6.3) donne $\langle P^2 \rangle$ et $\langle H^2 \rangle$, d'où l'on déduit les dispersions⁴ dans l'état cohérent $|z\rangle$

$$\boxed{\Delta_z Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad \Delta_z P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \quad \Delta_z H = \hbar\omega|z|} \quad (11.39)$$

La dispersion $\Delta_z H$ peut être obtenue en utilisant $\Delta H = \hbar\omega\Delta_z N$ et $\Delta_z N = \Delta n = |z|$ d'après (11.34) : on peut aussi calculer directement $\langle z|N^2|z\rangle$. On note que *l'inégalité de Heisenberg est saturée dans un état cohérent* : $\Delta_z Q \Delta_z P = \hbar/2$ et que pour $|z| \gg 1$

$$\frac{\Delta_z H}{\langle H \rangle} \simeq \frac{1}{|z|} \rightarrow 0 \quad \text{si } |z| \rightarrow \infty$$

En résumé, pour $|z| \gg 1$, les dispersions autour des valeurs moyennes sont les plus faibles possibles.

11.2.2 Opérateurs de déplacement et de phase

Au lieu de construire les états cohérents à partir de (11.31), il est souvent commode d'utiliser l'opérateur de déplacement $D(z)$ défini par

$$D(z) = \exp(-z^*a + za^\dagger) = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \exp(za^\dagger) \exp(-z^*a) \quad (11.40)$$

où nous avons utilisé (2.54) pour obtenir la seconde expression dans (11.40). Cette seconde expression montre que l'action de $D(z)$ sur l'état $|0\rangle$ donne bien l'état cohérent $|z\rangle$

$$D(z)|0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \exp(za^\dagger)|0\rangle = |z\rangle \quad (11.41)$$

L'opérateur conjugué hermitien de $D(z)$ est $D(-z)$

$$D^\dagger(z) = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \exp(-za^\dagger) \exp(z^*a) = D(-z)$$

ce qui montre que $D(z)$ est unitaire : $D^\dagger(z)D(z) = I$.

4. Nous utilisons indifféremment pour les dispersions les notations $(\Delta P, \Delta Q)$ ou $(\Delta p, \Delta q)$ car aucune ambiguïté n'est possible.

La propriété la plus utile de l'opérateur de déplacement est la suivante : le produit de deux opérateurs $D(z_1)$ et $D(z_2)$ est $D(z_1 + z_2)$ à un facteur de phase près. Pour le montrer, définissons les opérateurs A_1 et A_2 par

$$A_1 = z_1 a^\dagger - z_1^* a \quad A_2 = z_2 a^\dagger - z_2^* a$$

et calculons leur commutateur

$$[A_1, A_2] = z_1 z_2^* - z_1^* z_2 = 2i \operatorname{Im}(z_1 z_2^*)$$

Utilisons cette fois (2.55)

$$\begin{aligned} D(z_1)D(z_2) &= \exp(A_1) \exp(A_2) \\ &= \exp[i \operatorname{Im}(z_1 z_2^*)] \exp[(z_1 + z_2) a^\dagger - (z_1^* + z_2^*) a] \\ &= \exp[i \operatorname{Im}(z_1 z_2^*)] D(z_1 + z_2) \end{aligned} \quad (11.42)$$

Cette propriété permet de montrer simplement le résultat important suivant : si un oscillateur harmonique initialement dans son état fondamental est couplé pendant un intervalle de temps $[t_1, t_2]$ à une force classique $F(t)$, il se trouvera pour $t > t_2$ dans un état cohérent déterminé par la transformée de Fourier $\tilde{F}(\omega)$ de $F(t)$ (exercice 11.6.4)

$$\tilde{F}(\omega) = \int_{t_1}^{t_2} e^{i\omega t} F(t) dt \quad (11.43)$$

Nous allons maintenant préciser la correspondance entre le mouvement classique et la description quantique par un état cohérent. Nous avons déjà vu que la trajectoire classique dans le plan $\{q(t), p(t)\}$ était déterminée par la valeur initiale z_0 de z (cf. (11.27)) ; z_0 est un nombre complexe $|z_0| \exp(i\theta_0)$, où le module $|z_0|$ fixe l'énergie de l'oscillateur dans le cas classique. Dans le cas quantique d'un oscillateur dans un état cohérent $|z_0\rangle$, $|z_0|$ fixe la valeur moyenne de l'énergie. Il serait également intéressant de pouvoir donner une interprétation de la phase $\phi(t) = \theta_0 - \omega t$. Pour ce faire, examinons le portrait de phase de l'oscillateur, c'est-à-dire la trajectoire des valeurs moyennes dans le plan $\{q, p\}$. Dans le cas d'un état cohérent, ce portrait de phase est donné par les valeurs moyennes $\langle Q \rangle(t)$ et $\langle P \rangle(t)$ dans l'état cohérent $|z(t)\rangle$, avec $z(t) = z_0 \exp(-i\omega t)$, et d'après (11.37) en prenant $\theta_0 = 0$ pour simplifier les formules

$$\begin{aligned} \langle z(t) | Q | z(t) \rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |z_0| \cos \omega t \\ \langle z(t) | P | z(t) \rangle &= -\sqrt{2\hbar m\omega} |z_0| \sin \omega t \end{aligned} \quad (11.44)$$

Le point $\{\langle Q \rangle(t), \langle P \rangle(t)\}$ décrit donc une ellipse. Pour se ramener à une trajectoire circulaire, il suffit d'utiliser les opérateurs sans dimension \hat{Q} et \hat{P} (11.4)

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle(t) &= \sqrt{2} |z_0| \cos \omega t \\ \langle \hat{P} \rangle(t) &= -\sqrt{2} |z_0| \sin \omega t \end{aligned} \quad (11.45)$$

Le point $\{\langle \hat{Q} \rangle(t), \langle \hat{P} \rangle(t)\}$ décrit un cercle de rayon $\sqrt{2}|z_0|$ dans le plan $\{\hat{q}, \hat{p}\}$. D'après (11.39), les dispersions $\Delta_z \hat{Q}$ et $\Delta_z \hat{P}$ sont indépendantes de z

$$\Delta_z \hat{Q} = \Delta_z \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

On observe qu'au temps $t = 0$, le point représentatif du mouvement se trouve en $\{\hat{q} = \sqrt{2}|z_0|, \hat{p} = 0\}$, avec une dispersion horizontale et verticale de l'ordre de $1/\sqrt{2}$. Au temps $t = \pi/2\omega$, il se trouve en $\{\hat{q} = 0, \hat{p} = -\sqrt{2}|z_0|\}$ avec la même dispersion (figure 11.1). Le point représentatif fluctue donc autour de la position moyenne définie par (11.45). Ceci correspond à des fluctuations du rayon de la trajectoire et de sa phase : le rayon fluctue autour de sa valeur moyenne $|z_0|\sqrt{2}$ et la phase autour de sa valeur moyenne $\langle \phi \rangle = -\omega t$. Cette fluctuation de phase peut s'écrire

$$\Delta_z \phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{|z_0|\sqrt{2}} = \frac{1}{2|z_0|}$$

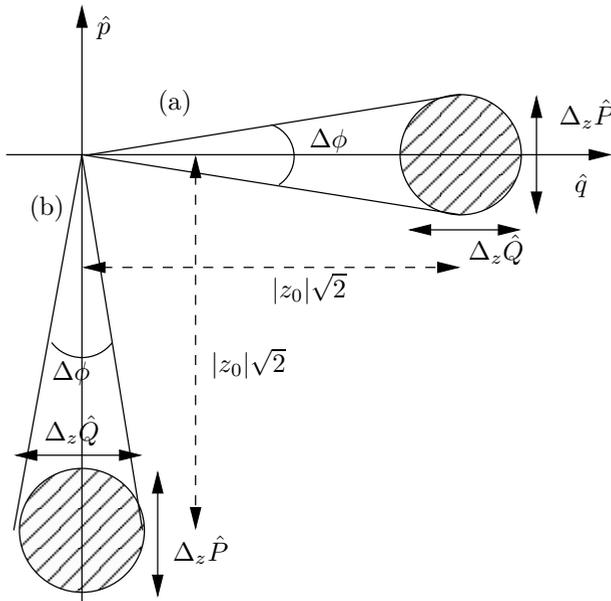


FIG. 11.1 – Représentation d'un état cohérent à $t = 0$ (a) et $t = \pi/2\omega$ (b).

Par ailleurs la loi de Poisson (11.34) relie $|z_0|$ et la fluctuation $\Delta_z N$ de N dans l'état cohérent : comme nous l'avons montré $\Delta_z N = |z_0|$, de sorte que le produit des dispersions $\Delta_z \phi$ et $\Delta_z N$ dans un état cohérent $|z\rangle$ obéit à

$$\Delta_z \phi \Delta_z N \simeq \frac{1}{2} \tag{11.46}$$

Cette relation rappelle bien sûr une inégalité de Heisenberg, et l'analogie avec la relation de commutation canonique $[\hat{Q}, \hat{P}] = iI$ suggère qu'il pourrait exister un opérateur de phase Φ canoniquement conjugué de N et obéissant à $[\Phi, N] = iI$. En fait il est impossible de construire un tel opérateur de phase qui soit auto-adjoint, en raison la périodicité de la variable ϕ (cf. l'exercice 7.4.3). On montre dans l'exercice 11.6.5 que l'opérateur d'annihilation possède une quasi-représentation en module et phase, $a = A \exp(i\Phi)$; cependant si $\exp(i\Phi)$ (non unitaire!) existe, Φ lui-même n'existe pas comme opérateur hermitien (plus exactement auto-adjoint). L'opérateur $\exp(i\Phi)$ sera noté E , avec

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n+1| \quad E^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| \quad (11.47)$$

Les opérateurs E et E^\dagger vérifient

$$EE^\dagger = I \quad E^\dagger E = I - |0\rangle\langle 0| \quad (11.48)$$

Les états de phase $|\phi\rangle$ définis par

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{in\phi} |n\rangle \quad (11.49)$$

sont vecteurs propres de E avec la valeur propre $\exp(i\phi)$

$$E|\phi\rangle = e^{i\phi} |\phi\rangle$$

Comme l'opérateur E n'est pas hermitien, les états $|\phi\rangle$ ne sont pas orthogonaux, mais ils vérifient la relation de fermeture

$$\int \frac{d\phi}{2\pi} |\phi\rangle\langle\phi| = I$$

Compte tenu de la représentation $a = AE$ et de $a|z\rangle = z|z\rangle$, on s'attend à ce que la distribution $\mathbf{p}(\phi)$ de ϕ soit centrée autour de θ pour un état cohérent $|z\rangle$, $z = |z| \exp(i\theta)$. Cherchons cette distribution $\mathbf{p}(\phi)$,

$$\mathbf{p}(\phi) = \frac{1}{2\pi} |\langle\phi|z\rangle|^2$$

où le facteur (2π) assure que $\mathbf{p}(\phi)$ est normalisé à l'unité pour une distribution uniforme dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. L'amplitude $\langle\phi|z\rangle$ est donnée par

$$\langle\phi|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in(\phi-\theta)} \frac{|z|^{n/2}}{\sqrt{n!}}$$

Pour $|z| \gg 1$ on peut utiliser la formule de Stirling (15.10)

$$n! \simeq \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n}$$

et écrire

$$e^{-|z|^2/2} \frac{|z|^{n/2}}{\sqrt{n!}} \simeq \left(\frac{1}{2\pi|z|^2} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{4|z|^2} (n - |z|^2)^2 \right]$$

On peut en outre remplacer la somme sur n par une intégrale. L'amplitude $\langle \phi | z \rangle$ est alors donnée par la transformée de Fourier d'une gaussienne

$$\langle \phi | z \rangle \simeq (8\pi|z|^2)^{1/4} e^{-|z|^2(\phi-\theta)^2}$$

et $p(\phi)$ s'en déduit immédiatement

$$p(\phi) \simeq \sqrt{\frac{2|z|^2}{\pi}} e^{-2|z|^2(\phi-\theta)^2} \quad (11.50)$$

On vérifie que $\int p(\phi) d\phi = 1$. L'équation (11.50) montre que la phase ϕ est bien centrée autour de θ avec une dispersion $\Delta_z \phi = 1/2|z|$, en accord avec (11.46).

11.3 Quantification du champ électromagnétique

Nous avons déjà rencontré à plusieurs reprises le concept de photon. Le photon est associé aux propriétés quantiques du champ électromagnétique, et pour donner un statut théorique au concept de photon, il faut quantifier le champ électromagnétique. Ceci se fera très simplement si l'on reconnaît l'analogie entre un mode du champ et un oscillateur harmonique.

Avant de passer à la quantification du champ électromagnétique, rappelons les équations de Maxwell (1.8)–(1.9) pour le champ électrique \vec{E} et le champ magnétique \vec{B}

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (11.51)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{em}}{\varepsilon_0} \quad c^2 \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}_{em} \quad (11.52)$$

Les deux équations (11.51) sont des équations de *contraintes* sur les champs \vec{E} et \vec{B} , tandis que les deux équations (11.52) dépendent des *sources* du champ électromagnétique, c'est-à-dire de la densité de charge ρ_{em} et de la densité de courant \vec{j}_{em} . On déduit des équations de Maxwell l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho_{em}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{em} = 0 \quad (11.53)$$

11.3.1 Quantification d'un mode

Avant d'examiner le cas général, nous allons d'abord étudier le cas plus simple de la quantification d'un mode du champ électromagnétique. Ceci suffira en pratique pour la plupart des problèmes étudiés par la suite. Nous allons exploiter l'analogie entre ce mode traité classiquement et un oscillateur harmonique classique écrit pour une particule de masse $m = 1$, le hamiltonien étant

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2} [p^2(t) + \omega^2 q^2(t)] \quad (11.54)$$

Les équations de Hamilton sont

$$\frac{\partial H_{\text{cl}}}{\partial p} = p = \dot{q} \quad \frac{\partial H_{\text{cl}}}{\partial q} = \omega^2 q = -\dot{p} \quad (11.55)$$

Les variables q et p étant canoniquement conjuguées, la quantification suit les règles de la section 4.3 : $q \rightarrow Q$, $p \rightarrow P$ avec $[Q, P] = i\hbar I$.

Considérons une cavité métallique parallélépipédique de volume \mathcal{V} , de longueur L suivant la direction Oy et un mode du champ classique dans cette cavité

$$\vec{E}_{\text{cl}} = \hat{z} e(t) \sin ky \quad \vec{B}_{\text{cl}} = \hat{x} b(t) \cos ky \quad (11.56)$$

La dépendance spatiale est en $\sin ky$ ou $\cos ky$ parce que la cavité est un parallélépipède. En général, ce serait celle d'un mode propre de la cavité. La composante transversale de \vec{E}_{cl} doit s'annuler sur les parois de la cavité, ce qui impose $k = n\pi/L$, $n = 1, 2, \dots$. Les fonctions $e(t)$ et $b(t)$ sont liées par les équations de Maxwell⁵

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}_{\text{cl}} = -\frac{\partial \vec{B}_{\text{cl}}}{\partial t} \implies ke(t) = -\frac{db}{dt} \quad (11.57)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}_{\text{cl}} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}_{\text{cl}}}{\partial t} \implies \frac{de}{dt} = c^2 kb(t) \quad (11.58)$$

L'énergie H_{cl} contenue dans la cavité s'obtient à partir de la densité d'énergie du champ électromagnétique

$$\epsilon_{\text{cl}} = \frac{1}{2} \epsilon_0 (\vec{E}_{\text{cl}}^2 + \vec{B}_{\text{cl}}^2) \quad (11.59)$$

5. Combinant les équations (11.57) et (11.58) on obtient aussi, avec $\omega = ck$

$$\frac{d^2 e}{dt^2} + \omega^2 e = 0 \quad \frac{d^2 b}{dt^2} + \omega^2 b = 0$$

La dépendance temporelle est donc

$$e(t) = e_0 \exp(\pm i\omega t) \quad b(t) = b_0 \exp(\pm i\omega t)$$

soit

$$\begin{aligned} H_{\text{cl}} &= \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int_{\mathcal{V}} d^3r [e^2(t) \sin^2 ky + c^2 b^2(t) \cos^2 ky] \\ &= \frac{1}{4} \varepsilon_0 \mathcal{V} [e^2(t) + c^2 b^2(t)] \end{aligned} \quad (11.60)$$

La comparaison entre (11.54) et (11.60) suggère la définition suivante, avec $\omega = ck$

$$q = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mathcal{V}}{2}} e \quad p = c \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mathcal{V}}{2}} b \quad (11.61)$$

Les équations de Maxwell (11.57) et (11.58) deviennent alors identiques à (11.55)

$$\frac{dq}{dt} = p \quad \frac{dp}{dt} = -\omega^2 q \quad (11.62)$$

tandis que (11.60) prend par construction la forme (11.54).

Pour quantifier le champ électromagnétique, on utilise le fait que les variables q et p (11.61) sont canoniquement conjuguées, et on leur fait correspondre des opérateurs Q et P obéissant à $[Q, P] = i\hbar I$. De façon équivalente, on écrit Q et P en fonction d'opérateurs a et a^\dagger obéissant à $[a, a^\dagger] = I$

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (a + a^\dagger) \quad P = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} (a - a^\dagger) \quad (11.63)$$

Les équations (11.56) et (11.61) donnent alors l'expression du champ électromagnétique quantifié (\vec{E}, \vec{B})

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \hat{z} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} (a + a^\dagger) \sin ky \\ \vec{B} &= \hat{x} \frac{1}{ic} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} (a - a^\dagger) \cos ky \end{aligned} \quad (11.64)$$

Le hamiltonien quantique est évidemment identique à (11.13)

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (11.65)$$

Dans le processus de quantification, les champs \vec{E}_{cl} et \vec{B}_{cl} sont devenus des opérateurs hermitiens \vec{E} et \vec{B} , et l'équation (11.64) donne ces opérateurs dans le point de vue de Schrödinger. Pour obtenir une dépendance temporelle comme dans (11.56), il faut passer au point de vue de Heisenberg, et nous avons besoin des opérateurs a et a^\dagger dans ce point de vue. Examinons a ; a^\dagger en sera déduit par conjugaison hermitienne. Par définition

$$a_{\text{H}}(t) = e^{iHt/\hbar} a e^{-iHt/\hbar} \quad (11.66)$$

où H est donné par (11.65). L'opérateur $a_H(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$\frac{da_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} [H, a] e^{-iHt/\hbar} = -i\omega a_H(t) \quad (11.67)$$

où nous avons utilisé le commutateur $[a^\dagger a, a] = -a$. L'équation différentielle (11.67) s'intègre immédiatement, et avec la condition aux limites habituelle $a_H(t=0) = a$

$$\boxed{a_H(t) = a e^{-i\omega t} \quad a_H^\dagger(t) = a^\dagger e^{i\omega t}} \quad (11.68)$$

Ceci donne les champs \vec{E} et \vec{B} dans le point de vue de Heisenberg

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{E}_H(t) &= \hat{z} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}) \sin ky \\ \vec{B}_H(t) &= \hat{x} \frac{1}{ic} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a e^{-i\omega t} - a^\dagger e^{i\omega t}) \cos ky \end{aligned}} \quad (11.69)$$

Le point crucial est l'interprétation physique des opérateurs a et a^\dagger . Les niveaux d'énergie de (11.65) sont donnés par (11.14), et on peut les interpréter de la façon suivante : l'état $|n\rangle$ (11.18) d'énergie $(n + 1/2)\hbar\omega$ est un état à n photons dans le mode de la cavité défini par (11.56), chaque photon ayant une énergie $\hbar\omega$. L'état à zéro photon $|0\rangle$, ou *état du vide*, correspond à une énergie non nulle $\hbar\omega/2$: la cavité, même vide, possède une énergie, appelée *énergie de point zéro*. Par une redéfinition du zéro d'énergie, on peut décider d'annuler cette énergie de point zéro. Cependant, on ne peut pas se débarrasser des fluctuations autour de cette énergie de point zéro, et ces fluctuations donnent lieu à des effets observables, ainsi que nous le verrons ultérieurement.

11.3.2 Cas général

Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, les résultats de la sous-section précédente sont suffisants pour aborder l'essentiel des développements ultérieurs, et cette sous-section peut être omise en première lecture, à partir de (11.74). Avant de procéder à la quantification, revenons un instant sur le cas classique. Les champs⁶ \vec{E} et \vec{B} sont liés par des contraintes, ce qui fait que les six composantes ne sont pas indépendantes. De plus, comme le montre l'effet Aharonov-Bohm (section 12.3.3), l'interaction du champ électromagnétique avec les charges n'est pas locale. Il est souvent préférable de passer par l'intermédiaire des potentiels⁷ scalaire \bar{V} et vecteur \bar{A} dont on déduit les champs

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\bar{V} - \frac{\partial\bar{A}}{\partial t} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \bar{A} \quad (11.70)$$

6. Afin d'alléger les notations, nous abandonnons l'indice cl jusqu'à (11.75), aucune confusion n'étant possible.

7. Nous utilisons la notation \bar{V} pour le potentiel électrique, afin de ne pas créer de confusion avec l'énergie potentielle V : une particule de charge q dans le potentiel \bar{V} a une énergie potentielle $V = q\bar{V}$.

Cette utilisation des potentiels au lieu des champs ne devrait pas surprendre : en effet, en mécanique quantique, nous n'avons jamais utilisé les forces, reliées directement aux champs \vec{E} et \vec{B} par la loi de Lorentz (1.11), mais toujours l'énergie potentielle. En mécanique quantique, ce sont l'énergie et l'impulsion qui jouent le rôle fondamental, car ce sont elles qui influencent directement la phase de la fonction d'onde. En présence d'un champ électrique \vec{E} , c'est le potentiel \bar{V} qui intervient directement dans l'équation de Schrödinger via l'énergie potentielle $V = q\bar{V}$. On ne sera pas surpris qu'en présence d'un champ magnétique \vec{B} , ce soit le potentiel vecteur \vec{A} qui intervienne directement dans l'équation de Schrödinger, et non le champ \vec{B} .

Les potentiels ne sont pas uniques. En effet dans une *transformation de jauge*

$$\boxed{\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda \quad \bar{V} \rightarrow \bar{V}' = \bar{V} + \frac{\partial\Lambda}{\partial t}} \quad (11.71)$$

où $\Lambda(\vec{r}, t)$ est une fonction scalaire de l'espace et du temps, les champs \vec{E} et \vec{B} ne sont pas modifiés. Afin de lever l'arbitraire sur les potentiels (\vec{A}, \bar{V}) , on fait souvent un *choix de jauge* en imposant une condition sur (\vec{A}, \bar{V}) . Un choix fréquent que nous adopterons (mais ce n'est pas le seul possible !) est celui de la *jauge de Coulomb*, ou *jauge de rayonnement*

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0} \quad (11.72)$$

Avec ce choix, le potentiel vecteur est transverse : en effet, si l'on passe dans l'espace de Fourier, la condition (11.72) se traduit par $\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}) = 0$. D'après la première des équations (11.52) et (11.72)

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla}\bar{V} + \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \right) = \nabla^2\bar{V} + \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) = \nabla^2\bar{V} = -\frac{\rho_{\text{em}}}{\varepsilon_0}$$

d'où l'on déduit le potentiel scalaire \bar{V}

$$\bar{V}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho_{\text{em}}(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' \quad (11.73)$$

Cette expression du potentiel scalaire est appelée *potentiel de Coulomb instantané*, car les effets de retard ne sont pas apparents : le temps t dans \bar{V} est le même que celui de la source ρ_{em} . Cette caractéristique pourrait sembler incompatible avec la relativité, mais on doit se souvenir qu'un potentiel n'est pas directement observable, et la contradiction est seulement apparente⁸. La déduction de l'équation donnant \vec{A} en fonction de \vec{j}_{em} est proposée à l'exercice 11.6.6.

8. cf. Weinberg [1995], chapitre 8.

En l'absence de sources : $\rho_{\text{em}} = \vec{j}_{\text{em}} = 0$, la seconde des équations (11.52) s'écrit

$$c^2 \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = c^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - c^2 \nabla^2 \vec{A} = -\frac{\partial(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})}{\partial t} - \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2}$$

et tenant compte de (11.72) et de $\vec{V} = 0$, nous obtenons l'équation d'onde pour \vec{A}

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \vec{A} = 0 \quad (11.74)$$

Enfin, compte tenu de l'expression classique de la densité d'énergie du champ électromagnétique, l'expression du hamiltonien classique est

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int d^3r \left(\vec{E}_{\text{cl}}^2 + c^2 \vec{B}_{\text{cl}}^2 \right) \quad (11.75)$$

Revenons maintenant à la quantification, en partant de de la décomposition de Fourier du potentiel vecteur classique

$$\vec{A}_{\text{cl}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}_s} \left[A_{\vec{k}_s} \vec{e}_s(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + A_{\vec{k}_s}^*(t) \vec{e}_s^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right] \quad (11.76)$$

Nous avons choisi dans cette section des conditions aux limites périodiques dans une boîte parallépipédique de côtés L_x, L_y, L_z , ou quantification dans une boîte

$$\vec{k} = \left(k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z} \right) \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Un des entiers n_x, n_y, n_z doit être non nul. Nous avons introduit des vecteurs $\vec{e}_s(\vec{k})$ dans la décomposition (11.76) car le champ \vec{A} est un champ de vecteurs ; les vecteurs $\vec{e}_s(\vec{k})$ sont choisis unitaires, $\vec{e}_s^*(\vec{k}) \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) = 1$ et ils représentent physiquement la polarisation du champ. Ils sont contraints par la condition de jauge (11.72). En effet, le gradient et le rotationnel sont donnés dans l'espace de Fourier par

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\vec{e}_s(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right] = i[\vec{k} \cdot \vec{e}_s(\vec{k})] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (11.77)$$

$$\vec{\nabla} \times \left[\vec{e}_s(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right] = i[\vec{k} \times \vec{e}_s(\vec{k})] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (11.78)$$

et on déduit de (11.77) la condition d'orthogonalité $\vec{k} \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) = 0$: le vecteur $\vec{e}_s(\vec{k})$ est un vecteur transverse (par rapport à \vec{k}). Le vecteur \vec{e}_s étant situé dans un plan, l'indice s prend seulement deux valeurs. Un choix possible est $\{\vec{e}_x(\vec{k}), \vec{e}_y(\vec{k})\}$, où $\vec{e}_x(\vec{k}), \vec{e}_y(\vec{k})$ et \vec{k} forment un trièdre direct : $s = x, y$. Ceci correspond à la décomposition de \vec{A} sur des états de polarisation linéaire. Un autre choix possible est celui des états de polarisation circulaire

$$\vec{e}_D = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x + i\vec{e}_y) \quad \vec{e}_G = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x - i\vec{e}_y) \quad (11.79)$$

avec $s = D, G$. On note l'identité importante, avec $i, j = x, y, z$

$$\sum_{s=1}^2 e_{si}(\vec{k}) e_{sj}^*(\vec{k}) = \mathcal{P}_{ij} = \delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \quad (11.80)$$

En effet, \mathcal{P}_{ij} n'est autre que le projecteur sur le plan perpendiculaire à \vec{k} , et on vérifie bien que

$$\sum_j \mathcal{P}_{ij} \hat{k}_j = 0 \quad \sum_j \mathcal{P}_{ij} e_{sj}(\vec{k}) = e_{si}(\vec{k})$$

De l'équation d'onde (11.74) on déduit l'équation d'évolution des modes $A_{\vec{k}s}$

$$\frac{\partial^2 A_{\vec{k}s}}{\partial t^2} + c^2 k^2 A_{\vec{k}s} = \frac{\partial^2 A_{\vec{k}s}}{\partial t^2} + \omega_k^2 A_{\vec{k}s} = 0 \quad (11.81)$$

en définissant la fréquence ω_k par $\omega_k = c|\vec{k}|$. On peut choisir comme solution de (11.81) (exercice 11.6.7)

$$A_{\vec{k}s}(t) = A_{\vec{k}s} e^{-i\omega_k t} \quad A_{\vec{k}s}^*(t) = A_{\vec{k}s}^* e^{i\omega_k t} \quad (11.82)$$

où $A_{\vec{k}s} = A_{\vec{k}s}(t=0)$. Ceci donne la dépendance en t de $\vec{A}_{\text{cl}}(\vec{r}, t)$

$$\vec{A}_{\text{cl}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, s} \left[A_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + A_{\vec{k}s}^* \vec{e}_s^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] \quad (11.83)$$

On en déduit les champs \vec{E}_{cl} et \vec{B}_{cl} que nous nous contentons d'écrire au temps $t = 0$

$$\begin{aligned} \vec{E}_{\text{cl}}(\vec{r}, t=0) &= i \sum_{\vec{k}, s} \omega_k \left(A_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) - A_{-\vec{k}s}^* \vec{e}_s^*(-\vec{k}) \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{k}, s} \vec{E}_{\vec{k}s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ \vec{B}_{\text{cl}}(\vec{r}, t=0) &= \frac{i}{c} \sum_{\vec{k}, s} \omega_k \hat{k} \times \left(A_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) - A_{-\vec{k}s}^* \vec{e}_s^*(-\vec{k}) \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{k}, s} \vec{B}_{\vec{k}s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (11.84)$$

Ces expressions permettent de calculer aisément le hamiltonien du champ électromagnétique si l'on utilise la relation de Parseval⁹

$$\sum_s \int d^3r \vec{E}_s^2(\vec{r}) = \mathcal{V} \sum_{\vec{k}, s, s'} \vec{E}_{\vec{k}s} \cdot \vec{E}_{-\vec{k}s'} \quad (11.85)$$

9. Étant donné que ce hamiltonien est indépendant du temps, on peut le calculer à $t = 0$.

On en déduit

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_s \int d^3r \vec{E}_s^2(\vec{r}) &= \varepsilon_0 \mathcal{V} \sum_{\vec{k}, s} \omega_k^2 A_{\vec{k}s}^* A_{\vec{k}s} - R \\ R &= \frac{\varepsilon_0 \mathcal{V}}{2} \sum_{\vec{k}, s, s'} \omega_k^2 \left[A_{\vec{k}s} A_{-\vec{k}s'} \vec{e}_s(\vec{k}) \cdot \vec{e}_{s'}(-\vec{k}) \right. \\ &\quad \left. + A_{-\vec{k}s} A_{\vec{k}s'} \vec{e}_s(-\vec{k}) \cdot \vec{e}_{s'}(\vec{k}) \right] \end{aligned} \quad (11.86)$$

où $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$ est le volume de quantification. Le calcul de la contribution du champ magnétique au hamiltonien s'effectue suivant le même principe, en utilisant l'identité vectorielle

$$(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot (\vec{C} \times \vec{D}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})(\vec{B} \cdot \vec{D}) - (\vec{A} \cdot \vec{D})(\vec{B} \cdot \vec{C})$$

appliquée à

$$\begin{aligned} \left[\hat{k} \times \vec{e}_s(\vec{k}) \right] \cdot \left[\hat{k} \times \vec{e}_{s'}(-\vec{k}) \right] &= \vec{e}_{s'}(\vec{k}) \cdot \vec{e}_s(\vec{k}) = \delta_{ss'} \\ \left[\hat{k} \times \vec{e}_s(\vec{k}) \right] \cdot \left[\hat{k} \times \vec{e}_{s'}(-\vec{k}) \right] &= \vec{e}_s(\vec{k}) \cdot \vec{e}_{s'}(-\vec{k}) \end{aligned}$$

On en déduit la contribution du champ magnétique

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0 c^2 \int d^3r \vec{B}_{cl}(\vec{r}, t=0) = \varepsilon_0 \mathcal{V} \sum_{\vec{k}, s} \omega_k^2 A_{\vec{k}s}^* A_{\vec{k}s} + R \quad (11.87)$$

Combinant (11.86) et (11.87) on obtient la forme finale de H_{cl}

$$H_{cl} = 2\varepsilon_0 \mathcal{V} \sum_{\vec{k}, s} \omega_k^2 A_{\vec{k}s}^* A_{\vec{k}s} \quad (11.88)$$

Il reste à trouver les variables conjuguées $q_{\vec{k}s}$ et $p_{\vec{k}s}$ afin de procéder à la quantification comme dans la sous-section précédente. Ces variables sont

$$\begin{aligned} q_{\vec{k}s} &= (\varepsilon_0 \mathcal{V})^{1/2} \left(A_{\vec{k}s} + A_{\vec{k}s}^* \right) \\ p_{\vec{k}s} &= \frac{\omega_k}{i} (\varepsilon_0 \mathcal{V})^{1/2} \left(A_{\vec{k}s} - A_{\vec{k}s}^* \right) \end{aligned} \quad (11.89)$$

Compte tenu de

$$\dot{A}_{\vec{k}s}(t) = -i\omega_k A_{\vec{k}s}(t) \quad \dot{A}_{\vec{k}s}^*(t) = i\omega_k A_{\vec{k}s}^*(t)$$

on vérifie immédiatement l'analogie de (11.62)

$$\dot{q}_{\vec{k}s} = p_{\vec{k}s} \quad \dot{p}_{\vec{k}s} = -\omega_k^2 q_{\vec{k}s} \quad (11.90)$$

tandis que le facteur commun de normalisation dans (11.80) permet de trouver l'expression de H_{cl} qui généralise (11.54) et montre que H_{cl} (11.75) est une somme de hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques *indépendants*

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, s} \left(p_{\vec{k}s}^2 + \omega_k^2 q_{\vec{k}s}^2 \right) \quad (11.91)$$

Pour quantifier la théorie, on s'inspire à nouveau de (11.63) en définissant des opérateurs $a_{\vec{k}s}$ et $a_{\vec{k}s}^\dagger$ qui vérifient les relations de commutation

$$\boxed{[a_{\vec{k}s}, a_{\vec{k}'s'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{ss'} I} \quad (11.92)$$

Les opérateurs $Q_{\vec{k}s}$ et $P_{\vec{k}s}$ sont alors

$$\begin{aligned} Q_{\vec{k}s} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(a_{\vec{k}s} + a_{\vec{k},s}^\dagger \right) \\ P_{\vec{k}s} &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} \left(a_{\vec{k}s} - a_{\vec{k},s}^\dagger \right) \end{aligned} \quad (11.93)$$

ce qui assure la relation de commutation canonique

$$[Q_{\vec{k}s}, P_{\vec{k}'s'}] = i\hbar \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{ss'} I \quad (11.94)$$

Le hamiltonien s'obtient à partir de (11.91) sous la forme

$$\boxed{H = \sum_{\vec{k}, s} \hbar\omega_k \left(a_{\vec{k}s}^\dagger a_{\vec{k}s} + \frac{1}{2} \right)} \quad (11.95)$$

Tout comme (11.91), ce hamiltonien décrit une collection d'oscillateurs harmoniques *indépendants*. L'opérateur $a_{\vec{k}s}$ ($a_{\vec{k}s}^\dagger$) détruit (créé) un photon de vecteur d'onde \vec{k} et de polarisation s , c'est-à-dire un photon dans le mode (\vec{k}, s) ; $N_{\vec{k}s} = a_{\vec{k}s}^\dagger a_{\vec{k}s}$ est l'opérateur nombre de photons dans ce mode.

On déduit de (11.95) l'énergie (infinie) de point zéro

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, s} \hbar\omega_k \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \hbar ck = \frac{\hbar c \mathcal{V}}{2\pi^2} \int_0^\infty k^3 dk \quad (11.96)$$

où nous avons utilisé (9.133). Dans le rayonnement du corps noir, la mécanique quantique s'était révélée capable de contrôler les *fluctuations thermiques*, qui conduisaient à une énergie infinie en mécanique statistique classique. Mais nous avons éliminé cet infini pour en introduire un autre, cette fois lié aux *fluctuations quantiques*. Ces fluctuations quantiques ont des effets observables,

comme l'effet Casimir (exercice 11.6.13). L'énergie de point zéro est aussi appelée *énergie du vide*, dont les propriétés restent encore aujourd'hui largement débattues, et qui pourrait jouer un rôle important en cosmologie.

Pour obtenir l'expression des champs quantifiés, le plus simple est de remarquer que les amplitudes classiques $A_{\vec{k}s}$ et $A_{\vec{k}s}^*$ sont remplacées par des opérateurs; la comparaison avec (11.89) et (11.93) montre que¹⁰

$$a_{\vec{k}s} \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V} \omega_k}} a_{\vec{k}s} \quad A_{\vec{k}s}^* \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V} \omega_k}} a_{\vec{k}s}^\dagger \quad (11.97)$$

Ceci donne l'expression du potentiel vecteur dans le point de vue de Heisenberg

$$\boxed{\vec{A}_H(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right]} \quad (11.98)$$

On déduit de (11.98) l'expression du champ électrique quantifié $\vec{E}_H = -\partial \vec{A}_H / \partial t$

$$\vec{E}_H(\vec{r}, t) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\omega_k} \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} - a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] \quad (11.99)$$

On remarquera que le facteur de normalisation global diffère de $1/\sqrt{2}$ comparativement à celui figurant en (11.64). Ceci vient de ce que les fonctions d'onde normalisées pour une dimension d'espace (y) sont, soit $\sqrt{1/L_y} \exp(iky)$, soit $\sqrt{2/L} \sin ky$. Pour le champ magnétique on utilise (11.78)

$$\vec{B}_H(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{i}{c} \sqrt{\omega_k} \hat{k} \times \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} - a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] \quad (11.100)$$

Comme dans une onde plane classique, $\vec{B} = (\hat{k}/c) \times \vec{E}$. Il est facile de calculer les commutateurs des diverses composantes du champ à $t = 0$. On trouve les relations de commutation suivantes entre la composante A_i du champ et celle $-\varepsilon_0 E_j$ de son moment conjugué¹¹ (exercice 11.6.8)

$$[A_i(\vec{r}), -\varepsilon_0 E_j(\vec{r}')] = i\hbar \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \left(\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \right) I \quad (11.101)$$

10. Ce remplacement est ambigu dans l'expression (11.88) du hamiltonien, car classiquement $AA^* = A^*A$, et on doit passer par (11.91) pour procéder correctement. En revanche, il n'y a pas de problème pour les champs qui sont linéaires en A et A^* .

11. L'application des principes de la mécanique analytique au champ électromagnétique montre que le moment conjugué de A_i est $-\varepsilon_0 E_i$; voir par exemple Weinberg [1995].

où nous avons utilisé (9.133). On en déduit que E_x commute avec B_x , mais non avec B_y ou B_z : on ne peut pas mesurer simultanément au même point la composante x du champ électrique et la composante y du champ magnétique.

Il est possible d'écrire un couplage du champ quantifié avec une source classique $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ de la forme

$$W(t) = - \int d^3r \vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t) \cdot \vec{A}(\vec{r}) \quad (11.102)$$

Ce couplage généralise celui de l'oscillateur harmonique forcé de l'exercice 11.6.4 : la force $f(t)$ est remplacée par la source \vec{j}_{em} et l'opérateur position Q par le champ quantifié \vec{A} . On peut alors montrer que si l'on part d'un état à zéro photon et si la source agit pendant un temps fini, on obtient un état cohérent du champ électromagnétique, où le nombre de photons dans un mode \vec{k} est donné par une loi de Poisson dont la valeur moyenne est déterminée par $|\vec{j}_{\text{em}}(\vec{k}, \omega_k)|^2$, $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{k}, \omega_k)$ étant la transformée de Fourier quadridimensionnelle¹² de $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t)$.

Le champ quantifié \vec{A} a été écrit dans la jauge de Coulomb. C'est la jauge la plus commode pour traiter les problèmes élémentaires, mais ce n'est pas la jauge qui convient pour traiter l'électrodynamique quantique de façon générale. En effet la condition $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ privilégie un référentiel d'inertie particulier et l'invariance de Lorentz de la théorie n'est pas manifeste. Naturellement il ne s'agit pas d'un défaut rédhibitoire, car il est possible de vérifier tous calculs faits l'invariance de Lorentz des résultats physiques. Le véritable défaut de la jauge de Coulomb est qu'elle conduit à des calculs inextricables car le programme de renormalisation (élimination des infinis) exige que l'on maintienne de façon explicite l'invariance de Lorentz, si l'on veut garder des calculs maniables¹³. Une jauge où l'invariance de Lorentz est manifeste est la jauge de Lorentz¹⁴

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Cependant la jauge de Lorentz introduit des états non physiques, que l'on doit correctement interpréter et éliminer des résultats physiques. Ces états non physiques n'apparaissent pas dans la jauge de Coulomb, qui est un exemple de « jauge physique ». Malheureusement on ne peut pas à la fois utiliser une jauge physique et conserver l'invariance de Lorentz formelle.

12. Voir l'exercice 11.6.4. On trouvera un traitement détaillé par exemple dans Le Bellac [1988], chapitre 9 ou Itzykson et Zuber [1980], chapitre 4.

13. D'un point de vue technique, les contre-termes qui éliminent les infinis sont contraints par l'invariance de Lorentz, si le choix de jauge respecte cette invariance formelle.

14. Cette invariance de Lorentz formelle est manifeste en notation quadridimensionnelle : $\partial_\mu A^\mu = 0$, $A^\mu = (\bar{V}, \vec{A})$.

11.4 États du champ électromagnétique

11.4.1 Fluctuations quantiques du champ électromagnétique

Dans le formalisme de la section précédente, le champ électromagnétique est un opérateur et on doit pouvoir observer ses fluctuations quantiques. Dans l'état à zéro photon, ou état du vide $|0\rangle$, la valeur moyenne des champs électrique (11.99) et magnétique (11.100) est nulle

$$\langle 0 | \vec{E}_H(\vec{r}, t) | 0 \rangle = \langle 0 | \vec{B}_H(\vec{r}, t) | 0 \rangle = 0$$

car $\langle 0 | a_{\vec{k}s} | 0 \rangle = \langle 0 | a_{\vec{k}s}^\dagger | 0 \rangle = 0$, mais la nullité des valeurs moyennes n'implique pas celle des fluctuations ! Ces fluctuations ont des conséquences physiques importantes, et nous allons les examiner successivement dans plusieurs types d'états : le vide, les états à nombre de photons fixé, les états cohérents et les états comprimés. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons à un seul mode (§ 11.3.1) de vecteur d'onde \vec{k} et de polarisation s fixés, $a_{\vec{k}s} \rightarrow a$, $\omega_k \rightarrow \omega$, en nous plaçant de plus à $y = 0$. Cette restriction à un mode unique est souvent une bonne approximation, par exemple pour un laser monomode si l'on peut négliger les effets transverses dus à la diffraction ou pour un mode dans une cavité supraconductrice. Le champ électrique (11.69) s'écrit

$$E(t) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}) \quad (11.103)$$

Nous avons supprimé l'indice H et la notation vectorielle afin d'alléger les notations. Calculons d'abord les fluctuations de E dans l'état du vide en utilisant

$$(a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})^2 = a^2 e^{-2i\omega t} + (a^\dagger)^2 e^{2i\omega t} + 2a^\dagger a + I$$

Seul le dernier terme donne un résultat non nul quand on prend la valeur moyenne sur le vide et

$$\langle 0 | E^2(t) | 0 \rangle = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

d'où la dispersion

$$\Delta_0 E = [\langle 0 | E^2(t) | 0 \rangle - \langle 0 | E(t) | 0 \rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \quad (11.104)$$

Les fluctuations quantiques du champ électromagnétique ont des conséquences physiques importantes : outre l'effet Casimir (exercice 11.6.13), elles sont aussi à l'origine du clivage entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène dégénérés à l'approximation de la théorie relativiste de Dirac (cf. § 15.2.2), et qui est appelé *déplacement Lamb*. Ce déplacement $\simeq 4.38 \times 10^{-6}$ eV est une fraction de l'ordre de 10^{-7} de la différence d'énergie entre les niveaux $1s$ et

$2s$, et il vaut 1 058 MHz en unités de fréquence¹⁵. Ces fluctuations sont aussi responsables du moment magnétique anormal de l'électron : alors que l'invariance galiléenne et la théorie de Dirac prédisent un facteur gyromagnétique de l'électron $\gamma_e = q_e/m_e$, ce facteur est en fait

$$\gamma_e = \frac{q_e}{m_e} \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2) \right)$$

où $\alpha \simeq 1/137$ est la constante de structure fine.

Dans un état à nombre de photons n fixé (dans le mode considéré), aussi appelé *état de Fock*, la valeur moyenne de $\mathbf{E}(t)$ est nulle car $\langle n|a|n\rangle = \langle n|a^\dagger|n\rangle = 0$, tandis que celle de $\mathbf{E}^2(t)$ vaut d'après (11.12)

$$\langle n|\mathbf{E}^2(t)|n\rangle = \frac{\hbar\omega(2n+1)}{\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

d'où la dispersion $\Delta_n \mathbf{E}$ dans l'état $|n\rangle$

$$\Delta_n \mathbf{E} = [\langle n|\mathbf{E}^2|n\rangle - \langle n|\mathbf{E}|n\rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega(2n+1)}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \quad (11.105)$$

Cette dispersion croît comme la racine carrée du nombre de photons lorsque $n \gg 1$. La phase est indéterminée dans un état de Fock, puisque $\Delta N = 0$. Même si le nombre de photons est très grand, un état de Fock est complètement non classique.

Des états plus intéressants en pratique que ceux à nombre de photons fixé sont les états cohérents $|z\rangle$. En effet la grande majorité des sources lumineuses usuelles émettent des états du champ électromagnétique très proches d'un état cohérent (laser), ou d'un mélange statistique d'états cohérents (source classique). Calculons la valeur moyenne de $\mathbf{E}(t)$ dans un état cohérent en posant $z = |z| \exp(i\theta)$

$$\langle z|\mathbf{E}(t)|z\rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (ze^{-i\omega t} + z^*e^{i\omega t}) = 2\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} |z| \cos(\omega t - \theta) \quad (11.106)$$

tandis que

$$\langle z|\mathbf{E}^2(t)|z\rangle = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}} \left[(ze^{-i\omega t} + z^*e^{i\omega t})^2 + 1 \right]$$

La dispersion $\Delta_z \mathbf{E}$ dans un état cohérent est identique à la dispersion dans le vide

$$\Delta_z \mathbf{E} = [\langle z|\mathbf{E}^2(t)|z\rangle - \langle z|\mathbf{E}(t)|z\rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} = \Delta_0 \mathbf{E} \quad (11.107)$$

15. Une faible partie de ce déplacement ($-27 \text{ MHz} \simeq 3\%$) est due, non aux fluctuations du champ électromagnétique, mais à celles du champ électron-positron. La création de paires (virtuelles) électron-positron a un effet d'écran sur le champ coulombien et agit comme une constante diélectrique du vide. L'effet est beaucoup plus important pour les atomes muoniques : cf. l'exercice 15.6.3 et la note 37 du chapitre 1.

Rappelons que le nombre moyen de photons est $\langle N \rangle_z = \langle z|N|z \rangle = |z|^2$ et la dispersion $\Delta_z N = |z|$: lorsque le nombre moyen $\langle N \rangle_z$ de photons augmente, la valeur moyenne du champ électrique croît comme $\sqrt{\langle N \rangle_z}$, mais la dispersion reste constante. La distribution des valeurs de E est de plus en plus piquée relativement à la valeur moyenne, et cette valeur moyenne évolue comme un champ classique.

Définissons les opérateurs hermitiques X_1 et X_2 , ou *opérateurs de quadrature* par

$$X_1 = \frac{1}{2} (a + a^\dagger) \quad X_2 = \frac{1}{2i} (a - a^\dagger) \quad (11.108)$$

qui vérifient la relation de commutation $[X_1, X_2] = i/2$, d'où l'on tire l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta X_1 \Delta X_2 \geq \frac{1}{4} \quad (11.109)$$

Un calcul immédiat montre que

$$E(t) = 2\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} [X_1 \cos \omega t + X_2 \sin \omega t] \quad (11.110)$$

tandis que, suivant (11.39) et (11.108)

$$\langle X_1 \rangle_z = \operatorname{Re} z \quad \langle X_2 \rangle_z = \operatorname{Im} z \quad \Delta_z X_1 = \Delta_z X_2 = \frac{1}{2} \quad (11.111)$$

L'inégalité de Heisenberg (11.109) est donc saturée quand le champ se trouve dans un état cohérent, en conformité avec les résultats du § 11.2. La valeur moyenne $\langle E(t) \rangle_z$ du champ est donnée par (11.106). Nous pouvons maintenant interpréter physiquement les résultats du § 11.2.2 pour le champ électromagnétique dans un état cohérent. Ainsi que nous l'avons vu en (11.46), le champ fluctue en amplitude et en phase autour de sa valeur moyenne (11.106). La fluctuation en amplitude est en valeur relative $\Delta_z E / \langle E \rangle \simeq 1/2|z| = 1/2\langle N \rangle^{1/2}$, où $\langle N \rangle$ est le nombre moyen de photons et $\Delta_z N = \langle N \rangle^{1/2}$, tandis que la fluctuation de phase vérifie (11.46) : $\Delta_z \phi \Delta_z N \simeq 1/2$ (figure 11.2 (a)).

Il existe un autre type d'états intéressants, les *états comprimés*. Définissons l'opérateur unitaire

$$S(\tilde{z}) = \exp \left[\frac{1}{2} (\tilde{z}^* a^2 - \tilde{z} a^{\dagger 2}) \right] = e^X \quad (11.112)$$

où \tilde{z} est un nombre complexe, $\tilde{z} = r \exp(i\theta)$, et calculons $S^\dagger(\tilde{z})aS(\tilde{z})$ en utilisant (2.53) et $X = -X^\dagger$

$$S^\dagger(\tilde{z})aS(\tilde{z}) = a - [X, a] + \frac{1}{2!} [X, [X, a]] + \dots$$

Un calcul immédiat montre que

$$S^\dagger(\tilde{z})aS(\tilde{z}) = a \cosh r - a^\dagger e^{i\theta} \sinh r$$

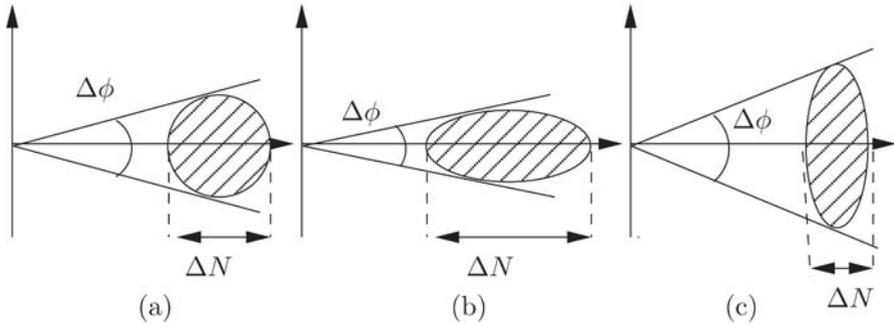


FIG. 11.2 – Représentation de Fresnel du champ électrique. La zone hachurée représente la dispersion sur l’extrémité du champ. (a) État cohérent ; (b) et (c) États comprimés.

On définit l’état comprimé $|\tilde{z}\rangle$ par

$$|\tilde{z}\rangle = S(\tilde{z})|0\rangle \tag{11.113}$$

Les valeurs moyennes de a et a^\dagger dans cet état sont nulles : $\langle \tilde{z}|a|\tilde{z}\rangle = \langle \tilde{z}|a^\dagger|\tilde{z}\rangle = 0$, tandis que

$$\langle \tilde{z}|a^2|\tilde{z}\rangle = \langle \tilde{z}|(a^\dagger)^2|\tilde{z}\rangle^* = -e^{i\theta} \sinh r \cosh r \quad \langle \tilde{z}|a^\dagger a|\tilde{z}\rangle = \sinh^2 r$$

On en déduit les valeurs moyennes et les dispersions des opérateurs X_1 et X_2

$$\Delta_{\tilde{z}}X_1 = \frac{1}{2}(\cosh 2r - \cos \theta \sinh 2r)^{1/2} \quad \Delta_{\tilde{z}}X_2 = \frac{1}{2}(\cosh 2r + \cos \theta \sinh 2r)^{1/2}$$

Ces expressions se simplifient lorsque $\theta = 0$

$$\theta = 0 : \quad \Delta_{\tilde{z}}X_1 = \frac{1}{2}e^{-r} \quad \Delta_{\tilde{z}}X_2 = \frac{1}{2}e^r \tag{11.114}$$

On constate que par rapport à (11.111), la dispersion de X_1 est réduite et celle de X_2 augmentée, mais le produit $\Delta_{\tilde{z}}X_1 \Delta_{\tilde{z}}X_2$ reste constant et égal à $1/4$: les états comprimés, tout comme les état cohérents, saturent l’inégalité de Heisenberg. Les figures 11.2 (b) et (c) montrent schématiquement la représentation de Fresnel du champ électrique dans un état comprimé. On voit que l’on peut, soit diminuer la dispersion sur la phase et augmenter celle sur N , soit inversement diminuer la dispersion sur le nombre de photons et augmenter celle sur ϕ .

11.4.2 Lames séparatrices et détection homodyne

Les opérateurs X_1 et X_2 définis en (11.108) et leur généralisation $X_\theta, X_{[\theta+\pi/2]}$ définis ultérieurement dans cette sous-section peuvent être mesurés grâce à la *détection homodyne*, qui consiste à mélanger le champ à mesurer

avec un signal de référence de même fréquence que celle du champ. Avant de décrire la détection homodyne, il est utile de transposer la discussion du § 1.4.5 sur l'action d'une lame séparatrice dans un formalisme opératoire. Nous allons écrire l'analogie des relations (1.31) pour les opérateurs d'annihilation du champ dans les modes d'entrée et de sortie d'une lame séparatrice, et, comme dans le § 1.4.5, nous appelons (a) et (b) les modes d'entrée, (c) et (d) les modes de sortie; (a) et (b) étiquettent deux modes du champ représentant des paquets d'ondes qui se mélangent dans la lame séparatrice. Nous choisissons une lame séparatrice déséquilibrée en posant

$$t = \cos \lambda \quad r = i \sin \lambda$$

L'équation (1.31) devient

$$\begin{aligned} \bar{c} &= \bar{a} \cos \lambda + i\bar{b} \sin \lambda \\ \bar{d} &= i\bar{a} \sin \lambda + \bar{b} \cos \lambda \end{aligned}$$

Nous supposons que l'extension temporelle $\Delta\tau$ des paquets d'ondes est suffisamment grande de telle sorte que la fréquence ω est bien définie. Cependant $\Delta\tau$ doit être fini, afin que l'on puisse distinguer entre un « avant » ($t < -T$) et un « après » ($t > T$) du mélange par la lame séparatrice qui a lieu pour $t \sim 0$.

Nous recherchons un hamiltonien susceptible de décrire le mélange en terme d'opérateurs de champ a et b , où a et b désignent les opérateurs d'annihilation des modes (a) et (b) . Un opérateur conduisant au résultat recherché est

$$H = -\hbar g(t) (ab^\dagger + a^\dagger b)$$

Dans cette équation, $g(t)$ est une fonction lentement variable du temps, non nulle dans un intervalle de temps $[-T, +T]$, avec $T \gtrsim \Delta\tau$, et choisie telle que son intégrale temporelle soit précisément le paramètre λ qui définit l'action du diviseur de faisceau

$$\int_{-T}^{+T} g(t) dt = \lambda$$

Dans le point de vue de Heisenberg, qui est celui qui se raccorde le plus directement à la description classique, les opérateurs évoluent en fonction du temps, et entre $-T$ et $+T$, $a \rightarrow c$ et $b \rightarrow d$. Cette évolution est donnée par un opérateur unitaire $U(\lambda)$

$$c = U^\dagger(\lambda) a U(\lambda) \quad d = U^\dagger(\lambda) b U(\lambda)$$

avec

$$U(\lambda) = \exp [i\lambda (ab^\dagger + a^\dagger b)] = \exp[i\lambda G] \quad G = ab^\dagger + a^\dagger b \quad (11.115)$$

L'équation (2.53) permet de calculer les opérateurs d'annihilation des modes de sortie c et d

$$\begin{aligned} e^{-iG\lambda} a e^{iG\lambda} &= a - i\lambda[G, a] - \frac{\lambda^2}{2!} [G, [G, a]] + \dots \\ &= a + i\lambda b - \frac{1}{2!} \lambda^2 a + \dots = a \cos \lambda + ib \sin \lambda \end{aligned}$$

En résumé la loi de transformation de a et b est identique à celle des amplitudes ondulatoires

$$\begin{aligned} c &= U^\dagger(\lambda) a U(\lambda) = a \cos \lambda + ib \sin \lambda \\ d &= U^\dagger(\lambda) b U(\lambda) = ia \sin \lambda + b \cos \lambda \end{aligned} \quad (11.116)$$

La forme $\exp(iG\lambda)$ de U montre que $U(\lambda)$ appliqué sur le vide des deux modes $|0_a 0_b\rangle$ redonne $|0_a 0_b\rangle$, car $G|0_a 0_b\rangle = 0$

$$U(\lambda)|0_a 0_b\rangle = |0_a 0_b\rangle$$

et cette forme montre aussi que $U^\dagger(\lambda) = U(-\lambda)$, d'où l'on déduit

$$\begin{aligned} U(\lambda) a^\dagger U^\dagger(\lambda) &= a^\dagger \cos \lambda + ib^\dagger \sin \lambda \\ U(\lambda) b^\dagger U^\dagger(\lambda) &= ia^\dagger \sin \lambda + b^\dagger \cos \lambda \end{aligned} \quad (11.117)$$

Revenons maintenant au point de vue de Schrödinger, où l'état final $|\Psi'\rangle$ est donné en terme de l'état initial $|\Psi\rangle$ par $|\Psi'\rangle = U(\lambda)|\Psi\rangle$, et examinons d'abord le cas d'un photon unique incident dans le mode (a). Nous avons donc

$$|\Psi\rangle = |1_a 0_b\rangle = a^\dagger |0_a 0_b\rangle$$

Il est immédiat d'obtenir $|\Psi'\rangle$

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U(\lambda) a^\dagger |0_a 0_b\rangle = U(\lambda) a^\dagger U^\dagger(\lambda) U(\lambda) |0_a 0_b\rangle \\ &= (a^\dagger \cos \lambda + ib^\dagger \sin \lambda) |0_a 0_b\rangle = \cos \lambda |1_a 0_b\rangle + i \sin \lambda |0_a 1_b\rangle \end{aligned} \quad (11.118)$$

L'amplitude de probabilité pour que le photon sorte dans le mode (a) est $\cos \lambda$, et l'amplitude de probabilité pour que le photon sorte dans le mode (b) est $i \sin \lambda$, ce qui est conforme à (1.31). Pour retrouver le cas classique, examinons l'action de la lame séparatrice sur un état cohérent $|z\rangle$ du mode (a), tandis que le mode (b) est vide. L'état initial est donné par

$$|\Psi\rangle = D_a(z)|0_a 0_b\rangle = |z\rangle_a \otimes |0\rangle_b$$

où $D_a(z)$ est l'opérateur de déplacement (11.40) pour le mode (a). $|\Psi'\rangle$ est donné par

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U(\lambda) D_a(z) |0_a 0_b\rangle = U(\lambda) D_a(z) U^\dagger(\lambda) U(\lambda) |0_a 0_b\rangle \\ &= \exp(a^\dagger z \cos \lambda - az^* \cos \lambda) \exp(ib^\dagger z \sin \lambda + ibz^* \sin \lambda) |0_a 0_b\rangle \\ &= D_a(z \cos \lambda) D_b(iz \sin \lambda) |0_a 0_b\rangle = |z \cos \lambda\rangle_a \otimes |iz \sin \lambda\rangle_b \end{aligned} \quad (11.119)$$

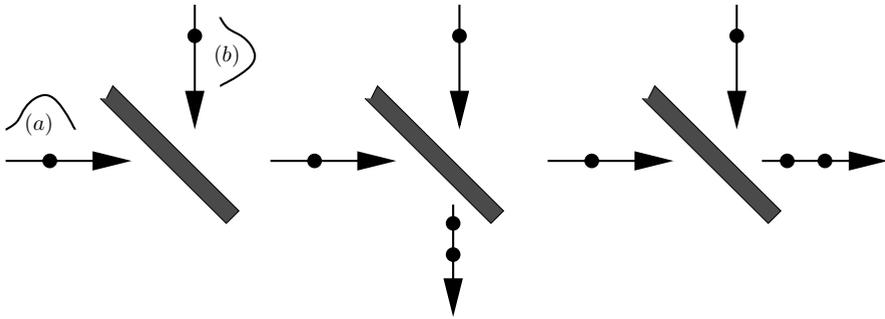


FIG. 11.3 – lame séparatrice et interférences à deux photons.

où nous avons explicité le produit tensoriel : le résultat est un produit tensoriel de deux états cohérents. On retrouve manifestement l'action de la lame séparatrice sur une onde classique, avec une répartition de l'intensité ($|t|^2 = \cos^2 \lambda$, $|r|^2 = \sin^2 \lambda$) dans les deux voies de sortie.

Supposons maintenant que nous partions d'un état $|1_a 1_b\rangle$, où un photon arrive dans le mode a et l'autre dans le mode b de part et d'autre de la lame séparatrice (figure 11.3)

$$|1_a 1_b\rangle = a^\dagger b^\dagger |0_a 0_b\rangle$$

La lame séparatrice transforme cet état en

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= U(\lambda) a^\dagger b^\dagger |0_a 0_b\rangle = U(\lambda) a^\dagger b^\dagger U^\dagger(\lambda) |0_a 0_b\rangle \\ &= (a^\dagger \cos \lambda + i b^\dagger \sin \lambda) (i a^\dagger \sin \lambda + b^\dagger \cos \lambda) |0_a 0_b\rangle \\ &= \frac{i \sin 2\lambda}{\sqrt{2}} (|2_a 0_b\rangle + |0_a 2_b\rangle) + \cos 2\lambda |1_a 1_b\rangle \end{aligned} \quad (11.120)$$

où nous avons utilisé $(a^\dagger)^2 |0\rangle = \sqrt{2} |2\rangle$ (*c.f.* (11.18)). Si la lame séparatrice est équilibrée, avec $\lambda = \pi/4$

$$|\Psi\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|2_a 0_b\rangle + |0_a 2_b\rangle) \quad (11.121)$$

Les deux photons quittent simultanément la lame séparatrice soit par une des deux voies de sortie, soit par l'autre (figure 11.3). La probabilité jointe de détecter un photon dans chaque voie est nulle. Ce résultat peut s'interpréter en terme de statistique de Bose-Einstein pour les photons (chapitre 14). L'expérience a été réalisée par Santori *et al.* [2002]; voir également Grangier [2002].

Nous avons défini en (11.111) les opérateurs X_1 et X_2 . De façon générale les opérateurs de quadrature X_θ et $X_{[\theta+\pi/2]}$ sont définis par

$$\begin{aligned} X_\theta &= \frac{1}{2} (a e^{-i\theta} + a^\dagger e^{i\theta}) \\ X_{[\theta+\pi/2]} &= \frac{1}{2i} (a e^{-i\theta} - a^\dagger e^{i\theta}) \end{aligned} \quad (11.122)$$

On a donc $X_1 = X_{\theta=0}$ et $X_2 = X_{\theta=\pi/2}$. Le champ électrique à $t = 0$ étant proportionnel à X_1 , X_θ représente un champ obtenu par une rotation d'angle θ . Le point important est que l'on peut mesurer son amplitude par détection homodyne. Le signal (a) est mélangé avec un oscillateur local (b) à l'aide d'une lame séparatrice équilibrée ($|r| = |t| = 1/\sqrt{2}$, figure 11.3). Dans ces conditions

$$c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + ib^\dagger) \quad d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (ia^\dagger + b^\dagger) \quad (11.123)$$

Les opérateurs nombre de photons dans les modes c et d sont respectivement

$$\begin{aligned} N_c &= c^\dagger c = \frac{1}{2} [a^\dagger a + b^\dagger b + i(b^\dagger a - ab^\dagger)] \\ N_d &= d^\dagger d = \frac{1}{2} [a^\dagger a + b^\dagger b - i(b^\dagger a - ab^\dagger)] \end{aligned} \quad (11.124)$$

Les deux premiers termes du crochet représentent respectivement les opérateurs nombre de photons du signal et de l'oscillateur local, tandis que les deux derniers sont des termes d'interférence. La différence ($N_c - N_d$) compte la différence entre le nombre de photons reçus par le détecteur D_c et celui reçu par D_d

$$R(= R^\dagger) = N_c - N_d = i(b^\dagger a - ab^\dagger)$$

Comme le signal et l'oscillateur local ne sont pas corrélés, nous avons $\langle a^\dagger b \rangle = \langle a^\dagger \rangle \langle b \rangle$. Si l'oscillateur local est un état cohérent $|z\rangle$, alors

$$\langle b \rangle = |z|e^{i\theta} \quad \langle b^\dagger \rangle = |z|e^{-i\theta}$$

On suppose que l'oscillateur local est le champ d'un laser avec $|z| \gg 1$; les fluctuations de l'oscillateur local sont alors négligeables, car cet oscillateur se comporte approximativement comme un champ classique. Dans ces conditions R devient

$$R \simeq -i|z| (a^\dagger e^{i\theta} - a e^{-i\theta}) = 2|z|X_{[\theta+\pi/2]} \quad (11.125)$$

Le détecteur homodyne mesure donc la quadrature $X_{[\theta+\pi/2]}$. L'expérience est faite en envoyant une série de signaux identiques, ce qui permet de déterminer la distribution de probabilité $p(X_\theta)$, puis en faisant varier la phase θ de l'oscillateur local. On remonte ensuite à la distribution de Wigner (section 12.5) du champ électromagnétique quantifié. Une autre méthode (exercice 11.6.9) consiste à utiliser une lame séparatrice très déséquilibrée : $|t| \gg |r|$.

11.4.3 Hamiltonien de Jaynes-Cummings

Le hamiltonien de Jaynes-Cummings décrit de façon approchée l'interaction d'un atome à deux niveaux avec le champ électromagnétique quantifié. Son principal mérite est que l'opérateur d'évolution correspondant peut se calculer explicitement, car il se ramène à celui d'un système à deux niveaux. Nous décrirons à la fin de cette section une application aux oscillations de Rabi

du vide, qui permettent de mettre directement en évidence la quantification du champ dans une cavité résonante.

Nous considérons un atome possédant un niveau fondamental (ou un niveau métastable de vie moyenne très longue) $|g\rangle$, et un niveau excité $|e\rangle$. On peut associer à la base $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ deux vecteurs colonne d'un espace à deux dimensions

$$|g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |e\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (11.126)$$

Soit $\hbar\omega_0 = E^e - E^g$ la différence d'énergie entre le niveau excité et le niveau fondamental. Nous allons étudier l'interaction de l'atome avec un mode (11.69) du champ électrique quantifié dans une cavité

$$\vec{E}_H(y, t) = \hat{z} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}) \sin ky \quad (11.127)$$

pour une fréquence $\omega \simeq \omega_0$: nous nous plaçons donc au voisinage de la résonance, en définissant comme au chapitre 5 le désaccord par $\delta = \omega - \omega_0$. Soit $|\varphi_n^g\rangle$ (resp. $|\varphi_n^e\rangle$) l'état où l'atome est dans son niveau fondamental (resp. excité) et où la cavité contient exactement $n + 1$ (n) photons

$$|\varphi_n^g\rangle = |g \otimes (n + 1)\rangle \quad |\varphi_n^e\rangle = |e \otimes n\rangle \quad (11.128)$$

Les états $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$ ont pour énergies respectives, en prenant comme zéro d'énergie la valeur moyenne de E^g et E^e

$$\begin{aligned} E_n^g &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_0 + (n + 1)\hbar\omega \\ E_n^e &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + n\hbar\omega = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0 + (n + 1)\hbar\omega - \hbar\delta \end{aligned} \quad (11.129)$$

Ces états sont donc quasi-dégénérés car $\delta \ll \omega_0$. Cette propriété va nous permettre de nous restreindre à l'espace de Hilbert de dimension 2 sous-tendu par les vecteurs $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$.

Le couplage de l'atome au champ se fait par le moment dipolaire électrique de transition \vec{D} , le hamiltonien d'interaction étant

$$\begin{aligned} W &= -\vec{D} \cdot \vec{E}_H(t = 0) = -(\vec{D} \cdot \hat{z}) \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a + a^\dagger) \sin ky \\ &= -(\vec{D} \cdot \hat{z})g(y) (a + a^\dagger) \end{aligned} \quad (11.130)$$

où nous avons défini $g(y)$ par

$$g(y) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \sin ky \quad (11.131)$$

Ainsi que nous le montrerons dans la section 15.3, l'atome dans l'état $|g\rangle$ ou $|e\rangle$ ne peut pas posséder de moment dipolaire

$$\langle g|\vec{D}|g\rangle = \langle e|\vec{D}|e\rangle = 0$$

et seuls les éléments de matrice non diagonaux peuvent être non nuls

$$\langle g | \vec{D} \cdot \hat{z} | e \rangle = \langle e | \vec{D} \cdot \hat{z} | g \rangle^* = d$$

Sans perte de généralité, nous pouvons supposer d réel, ce qui permet d'écrire

$$\vec{D} \cdot \hat{z} = d(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|) \quad (11.132)$$

Il sera commode d'introduire les matrices de Pauli σ_+ et σ_-

$$\sigma_+ = |g\rangle\langle e| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_- = \sigma_+^\dagger = |e\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (11.133)$$

ainsi que σ_3

$$\sigma_3 = |g\rangle\langle g| - |e\rangle\langle e| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11.134)$$

ce qui permet de récrire le hamiltonien d'interaction sous la forme

$$W = \frac{1}{2} \hbar \lambda(y) (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \quad \lambda(y) = \frac{2dg(y)}{\hbar} \quad (11.135)$$

Le hamiltonien total est

$$H = H_0 + W = H_{\text{at}} + H_{\text{em}} + W = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3 + \hbar \omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar \lambda(y) (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \quad (11.136)$$

où H_{at} est le hamiltonien de l'atome, H_{em} celui du champ et W l'interaction atome-champ. Comme au chapitre 5, nous allons nous placer dans le point de vue de l'interaction en définissant pour un opérateur A

$$\tilde{A}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} = e^{i(H_{\text{at}} + H_{\text{em}})t/\hbar} A e^{-i(H_{\text{at}} + H_{\text{em}})t/\hbar} \quad (11.137)$$

Nous avons montré en (5.57) que l'évolution de $\tilde{\sigma}_\pm(t)$ est donnée par

$$\tilde{\sigma}_\pm(t) = e^{iH_{\text{at}}t/\hbar} \sigma_\pm e^{-iH_{\text{at}}t/\hbar} = \sigma_\pm e^{\mp i\omega_0 t} \quad (11.138)$$

tandis que celles de $\tilde{a}(t)$ et $\tilde{a}^\dagger(t)$ sont données par (11.67). Les dépendances temporelles approchées des opérateurs qui apparaissent dans W sont donc

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_- \tilde{a} &\propto e^{-i\delta t} & \tilde{\sigma}_+ \tilde{a}^\dagger &\propto e^{i\delta t} \\ \tilde{\sigma}_+ \tilde{a}^\dagger &\propto e^{i(\omega + \omega_0)t} & \tilde{\sigma}_- \tilde{a} &\propto e^{-i(\omega + \omega_0)t} \end{aligned} \quad (11.139)$$

Les deux derniers termes de (11.140) oscillent rapidement en fonction du temps et correspondent à des transitions qui ne conservent pas l'énergie : par exemple $\sigma_- a^\dagger$ correspond à l'émission d'un photon alors que l'atome passe de l'état fondamental à l'état excité. Au voisinage de la résonance, nous pouvons utiliser l'approximation séculaire et négliger ces termes. Il ne reste que les termes $\sigma_- a$ et $\sigma_+ a^\dagger$. Nous obtenons ainsi le *hamiltonien de Jaynes-Cummings*

$$H_{\text{JC}} = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3 + \hbar \omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar \lambda(y) (\sigma_- a + \sigma_+ a^\dagger) \quad (11.140)$$

Ce hamiltonien couple uniquement les niveaux $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$, et nous sommes donc ramenés à un système à deux niveaux.

En pratique, on envoie l'atome dans la cavité suivant une certaine trajectoire, et nous allons supposer que $\sin ky = 1$ le long de cette trajectoire. La fréquence de Rabi du vide Ω_R sera définie par

$$\Omega_R = \frac{2d}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \quad (11.141)$$

Les éléments de matrice non diagonaux de W se déduisent de

$$\langle\varphi_n^g|\sigma_+a^\dagger|\varphi_n^e\rangle = \langle g \otimes (n+1)|\sigma_+a^\dagger|e \otimes n\rangle = \sqrt{n+1}$$

où nous avons utilisé (11.16), et la forme matricielle de H est

$$H = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \delta & \Omega_R\sqrt{n+1} \\ \Omega_R\sqrt{n+1} & -\delta \end{pmatrix} \quad (11.142)$$

Les vecteurs propres et valeurs propres de ce hamiltonien sont λ , à une constante additive commune près,

$$\begin{aligned} E_n^- &= -\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2} & |\chi_n^-\rangle &= -\sin\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \cos\theta_n|\varphi_n^e\rangle \\ E_n^+ &= \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2} & |\chi_n^+\rangle &= \cos\theta_n|\varphi_n^g\rangle + \sin\theta_n|\varphi_n^e\rangle \end{aligned} \quad (11.143)$$

où l'angle θ_n est donné par

$$\tan 2\theta_n = \frac{\Omega_R\sqrt{n+1}}{\delta} \quad (11.144)$$

Les vecteurs $|\chi_n^-\rangle$ et $|\chi_n^+\rangle$ sont les vecteurs propres de *l'atome habillé* (par le champ électromagnétique). Supposons que l'atome dans l'état excité $|e\rangle$ entre dans la cavité au temps $t = 0$, et que celle-ci soit vide ($n = 0$). On se place à la résonance $\delta = 0$, $\sin\theta_0 = \cos\theta_0 = 1/\sqrt{2}$. L'état $|\varphi_0^e\rangle$ se décompose sur $|\chi_0^\pm\rangle$

$$|\varphi_0^e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi_0^+\rangle + |\chi_0^-\rangle) \quad (11.145)$$

et le vecteur d'état est donné au temps t par

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\Omega_R t/2} |\chi_0^+\rangle + e^{i\Omega_R t/2} |\chi_0^-\rangle \right) \quad (11.146)$$

La probabilité de trouver au temps t l'atome dans son état excité est

$$|\langle\varphi_0^e|\varphi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4} \left| e^{-i\Omega_R t/2} + e^{i\Omega_R t/2} \right|^2 = \cos^2 \frac{\Omega_R t}{2} \quad (11.147)$$

Cette probabilité oscille en fonction de t avec la fréquence de Rabi du vide Ω_R (11.141). Ces oscillations proviennent de l'interaction entre l'atome et le champ électromagnétique quantifié, puisque la cavité est initialement vide, et ces oscillations sont appelées à juste titre *oscillations de Rabi du vide*. Ces oscillations ont été observées expérimentalement, ce qui fournit une preuve directe de la quantification du champ électromagnétique. L'expérience a été réalisée par Brune *et al.* [1996a] avec les données numériques suivantes

$$d = 1.1 \times 10^{-26} \text{ c.m} \quad \frac{\omega}{2\pi} = 5.0 \times 10^{10} \text{ Hz} \quad \mathcal{V} = 1.87 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

La valeur théorique calculée à partir de ces données est en bon accord avec la valeur mesurée expérimentalement à partir des oscillations $\Omega_R/(2\pi) = 47 \text{ kHz}$.

11.5 Mouvement dans un champ magnétique

11.5.1 Invariance de jauge locale

Nous revenons maintenant au champ électromagnétique *classique* (\vec{E}, \vec{B}) : notre objectif est d'établir la forme de l'interaction de ce champ avec une particule quantique chargée de charge q . En électrodynamique classique, la densité de charge électrique $\rho_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ et la densité de courant

$$\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t) = \rho_{\text{em}}(\vec{r}, t)\vec{v}(\vec{r}, t) \quad (11.148)$$

vérifient l'équation de continuité (11.53). Nous souhaitons généraliser l'expression de ce courant à la physique quantique. Nous avons établi au chapitre 9 l'expression du courant de particules (9.123)

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= \text{Re} \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{\nabla} \right] \varphi(\vec{r}, t) \right) \\ &= \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \right] \varphi(\vec{r}, t) - \varphi(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \right] \varphi^*(\vec{r}, t) \right) \end{aligned} \quad (11.149)$$

Le courant électromagnétique créé par le mouvement d'une particule quantique chargée de charge q devrait être *a priori* $j_{\text{em}} = q\vec{j}$, la densité de charge ρ_{em} étant $q|\varphi|^2$. Cette forme du courant de particules obéit à l'équation de continuité lorsque la fonction d'onde $\varphi(\vec{r}, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \varphi$$

et le courant électromagnétique associé

$$\rho_{\text{em}} = q|\varphi|^2, \quad \vec{j}_{\text{em}} = q\vec{j}$$

obéit à (11.53). Cependant nous allons voir que l'expression (11.149) du courant doit être modifiée en présence d'un potentiel vecteur. L'expression (11.149) du courant est invariante dans une *transformation de jauge globale*, qui consiste à multiplier φ par un facteur de phase

$$\boxed{\varphi(\vec{r}, t) \rightarrow \varphi'(\vec{r}, t) = \exp\left(-i\frac{q}{\hbar}\Lambda\right)\varphi(\vec{r}, t) = \Omega\varphi(\vec{r}, t)} \quad (11.150)$$

où Λ est un nombre réel. Lorsque Λ est une fonction de \vec{r} et de t , on a affaire à une *transformation de jauge locale* : le lien avec (11.71) sera fait bientôt. Nous allons déduire la forme du courant d'un principe d'invariance de jauge locale, qui pourra sembler *a priori* arbitraire. En fait ce principe est très général, car on pense aujourd'hui que toutes les interactions fondamentales de la physique se déduisent d'un tel principe (exercice 11.6.12). Une transformation de jauge locale s'obtient en remplaçant la constante Λ dans (11.150) par une *fonction* de \vec{r} et de t

$$\boxed{\varphi(\vec{r}, t) \rightarrow \varphi'(\vec{r}, t) = \exp\left(-i\frac{q}{\hbar}\Lambda(\vec{r}, t)\right)\varphi(\vec{r}, t) = \Omega(\vec{r}, t)\varphi(\vec{r}, t)} \quad (11.151)$$

Cette transformation est manifestement unitaire. Il est immédiat de vérifier que le courant (11.149) n'est pas invariant dans une transformation de jauge locale, car le gradient agit sur $\exp(iq\Lambda/\hbar)$. Nous allons modifier l'expression du courant en substituant au gradient $\vec{\nabla}$ la *dérivée covariante* \vec{D}

$$\boxed{-i\hbar\vec{D} = -i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}} \quad (11.152)$$

Contrairement à la dérivée ordinaire, la dérivée covariante a une action simple lorsque l'on effectue une transformation de jauge locale (11.151)

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{D}\varphi &= -i\hbar\vec{D}(\Omega^{-1}\varphi') = (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Lambda(\vec{r}, t)\right)\varphi'(\vec{r}, t) \\ &= \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A} + q\vec{\nabla}\Lambda)\varphi' \\ &= \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}')\varphi' = \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{D}'\varphi') \end{aligned} \quad (11.153)$$

où \vec{D}' est la dérivée covariante calculée avec le potentiel vecteur transformé (11.71). Les dérivées covariantes \vec{D} et \vec{D}' sont physiquement équivalentes car \vec{A} est \vec{A}' le sont. L'expression du courant devient invariante par transformation de jauge locale si au lieu de la dérivée ordinaire on se sert de la dérivée covariante

$$\boxed{\vec{j}(\vec{r}, t) = \text{Re}\left(\varphi^*(\vec{r}, t)\left[\frac{-i\hbar}{m}\vec{\nabla} - \frac{q}{m}\vec{A}\right]\varphi(\vec{r}, t)\right) = \text{Re}\left(\varphi^*(\vec{r}, t)\left[\frac{-i\hbar}{m}\vec{D}\varphi\right]\right)} \quad (11.154)$$

En effet, si l'on exprime φ en fonction de φ' en utilisant (11.152) et (11.154)

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= \text{Re} \left(\varphi'^*(\vec{r}, t) \Omega \Omega^{-1} \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{D}' \varphi' \right] \right) \\ &= \text{Re} \left(\varphi'^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{D}' \varphi' \right] \right) = \vec{j}'(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Ceci suggère que l'opérateur vitesse $d\vec{R}/dt$ n'est pas simplement $d\vec{R}/dt = \vec{P}/m = -(i\hbar/m)\vec{\nabla}$ mais plutôt

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{D} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} - \frac{q}{m} \vec{A} \quad (11.155)$$

Sachant que l'opérateur vitesse est donné par le commutateur de \vec{R} avec le hamiltonien, examinons sa composante x . D'après (8.61) et l'expression (11.155) de $d\vec{R}/dt$

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] = \frac{1}{m} (P_x - qA_x)$$

ce qui donne, en reprenant le raisonnement de la section 8.4, la forme la plus générale de H

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\vec{V} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + q\vec{V} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 + q\vec{V} \quad (11.156)$$

où $V = q\vec{V}$ est une fonction arbitraire de \vec{R} et t . Exiger l'invariance de jauge locale du courant permet de retrouver la forme générique (8.73) du hamiltonien compatible avec l'invariance galiléenne. La substitution $-i\hbar\vec{\nabla} \rightarrow -i\hbar\vec{D}$ dans l'équation de Schrödinger, écrite dans un premier temps en l'absence de champ électromagnétique, et qui permet d'écrire cette équation en présence d'un tel champ est appelée *couplage minimal*¹⁶. La prescription du couplage minimal s'étend aux théories de jauge non abéliennes (exercice 11.6.12) et permet d'écrire toutes les interactions du modèle standard de la physique des particules élémentaires entre les particules de spin 1/2 (« particules de matière ») et celles de spin 1 (bosons de jauge) définies au § 1.1.3.

En mécanique analytique (exercice 8.5.8), on montre que le hamiltonien dont se déduit la force de Lorentz (1.11) est

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\vec{V}$$

16. Nous avons montré au § 8.4.2 que l'interaction $W = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}$ entre un moment magnétique de spin et un champ magnétique découlait du couplage minimal appliqué à une équation d'onde invariante de Galilée, avec $\gamma = q_e/m_e$. Cette interaction se déduit aussi de l'équation relativiste de Dirac et de l'application de la prescription du couplage minimal à cette équation, qui donne le même le facteur gyromagnétique γ . Les corrections de type moment magnétique anormal se déduisent du couplage minimal appliqué à l'électrodynamique quantique.

Un autre façon d'obtenir (11.156) est de partir de cette forme classique et d'utiliser le principe de correspondance pour remplacer \vec{p} et \vec{r} par des opérateurs : $\vec{p} \rightarrow \vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$, $\vec{r} \rightarrow \vec{R}$.

Si φ est solution de l'équation de Schrödinger dans le potentiel (\vec{A}, \vec{V}) , alors φ' en sera solution dans le potentiel transformé de jauge (\vec{A}', \vec{V}') (11.71). En effet l'équation de Schrödinger pour φ s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \varphi + q\vec{V}\varphi$$

Mais d'une part

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp \left(\frac{iq\Lambda}{\hbar} \right) \varphi' \right) = \Omega^{-1} \left(\frac{iq}{\hbar} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \varphi' + \frac{\partial \varphi'}{\partial t} \right)$$

et d'autre part

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \varphi = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \Omega^{-1} \varphi' = \Omega^{-1} \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D}')^2 \varphi'$$

ce qui donne, en mettant Ω^{-1} en facteur dans les deux membres de l'équation de Schrödinger pour φ'

$$i\hbar \frac{\partial \varphi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D}')^2 \varphi' + q\vec{V}'\varphi'$$

On vérifie également (exercice 11.6.11) que \vec{j} obéit à l'équation de continuité

$$\frac{\partial |\varphi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (11.157)$$

11.5.2 Champ magnétique uniforme : niveaux de Landau

Comme application, étudions le mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique uniforme et constant. Nous ignorons les effets de spin : l'interaction d'un moment magnétique lié au spin a déjà été étudiée au § 3.2.5. Nous supposons \vec{B} dirigé suivant Oz , et afin de simplifier la discussion, nous supposons également que le mouvement est confiné au plan xOy . Ce cas est d'ailleurs d'un grand intérêt pratique, car on sait réaliser des structures bi-dimensionnelles, avec des applications importantes comme l'effet Hall quantique¹⁷. Le mouvement d'une particule classique sous l'action de la force

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$$

se fait alors sur un cercle¹⁸ de rayon $\rho = mv/(|q|B)$ avec une fréquence $\omega = |q|B/m$, ou fréquence de Larmor (cf. (3.61)). Si $q < 0$, ce que nous supposons

17. cf. Taylor et Heinonen [2002], chapitre 10.

18. Si le mouvement est à trois dimensions, la trajectoire est une hélice qui se projette suivant un cercle de rayon ρ parcouru à la fréquence ω dans le plan xOy .

pour fixer les idées, le cercle est parcouru dans le sens trigonométrique. Le mouvement est donc

$$\begin{aligned}x(t) &= x_0 + \rho \cos \omega t \\y(t) &= y_0 + \rho \sin \omega t\end{aligned}\tag{11.158}$$

où x_0 et y_0 sont les coordonnées du centre du cercle. La projection de ce mouvement circulaire uniforme sur les axes Ox et Oy donne deux oscillateurs harmoniques, que l'on retrouvera en mécanique quantique. Un choix possible pour le potentiel vecteur est

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}\tag{11.159}$$

et donc $A_x = -yB/2$, $A_y = xB/2$, $A_z = 0$. Ce choix n'est évidemment pas unique et un autre choix fréquent¹⁹ est $A_x = A_z = 0$, $A_y = xB$. Calculons le commutateur des composantes de la vitesse

$$\begin{aligned}[\dot{X}, \dot{Y}] &= \frac{1}{m^2} \left[P_x + \frac{q}{2} YB, P_y - \frac{q}{2} XB \right] \\&= \frac{1}{m^2} \frac{qB}{2} \left(-[P_x, X] + [Y, P_y] \right) = -\frac{i\hbar\omega}{m} I\end{aligned}\tag{11.160}$$

Comme l'expression de H peut s'écrire

$$H = \frac{1}{2} m \left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 \right)\tag{11.161}$$

on se ramène à (11.9) en définissant

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}} \dot{Y} \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}} \dot{X}$$

et

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right)\tag{11.162}$$

Les niveaux d'énergie sont étiquetés par un entier n

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots\tag{11.163}$$

Ces niveaux sont appelés *niveaux de Landau*. Par analogie avec le cas classique, on définit un opérateur R^2 qui est l'analogue du rayon carré ρ^2 de la trajectoire circulaire

$$R^2 = \frac{1}{\omega^2} \left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 \right) = \frac{2H}{m\omega^2}\tag{11.164}$$

19. C'est par exemple le choix de Landau et Lifschitz [1966], § 111.

La valeur moyenne de R^2 dans l'état $|n\rangle$ est

$$\langle R^2 \rangle_n = \frac{2}{m\omega^2} \langle n|H|n\rangle = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Si la particule est dans un état propre de H , la dispersion sur R^2 est nulle. Le flux Φ du champ magnétique à travers une orbite est quantifié en unités de $h/|q|$. En effet

$$\Phi = \pi \langle R^2 \rangle_n B = \frac{h}{|q|} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

La deuxième caractéristique du mouvement est la position du centre du cercle. Suivant (11.158) on définit les opérateurs X_0 et Y_0 par

$$X_0 = X - \frac{1}{\omega} \dot{Y} \quad Y_0 = Y + \frac{1}{\omega} \dot{X} \quad (11.165)$$

Compte tenu de $[X, \dot{X}] = [Y, \dot{Y}] = i\hbar I/m$ et de (11.160) le commutateur $[X_0, Y_0]$ vaut

$$[X_0, Y_0] = \frac{i\hbar}{m\omega} I$$

On vérifie immédiatement que

$$[X_0, \dot{X}] = [X_0, \dot{Y}] = [Y_0, \dot{X}] = [Y_0, \dot{Y}] = 0$$

et donc que $[H, X_0] = [H, Y_0] = 0$. L'opérateur R_0^2

$$R_0^2 = X_0^2 + Y_0^2 \quad (11.166)$$

commute avec R^2 : R^2 et R_0^2 sont hermitiens et simultanément diagonalisables. Posant

$$\hat{Q}_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X_0 \quad \hat{P}_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Y_0$$

conduit à

$$R_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\hat{Q}_0^2 + \hat{P}_0^2 \right)$$

et les valeurs propres r_0^2 de R_0^2 sont

$$r_0^2 = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(p + \frac{1}{2} \right) \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (11.167)$$

Nous avons retrouvé les deux oscillateurs harmoniques ; le premier donne la valeur n du niveau de Landau, c'est-à-dire le rayon de l'orbite, et le second la position du centre de l'orbite. Supposons que la particule se trouve dans le plan à l'intérieur d'un cercle de rayon r_0 et que $\rho^2 \ll r_0^2$; les valeurs de p sont alors limitées par

$$p \leq \frac{m\omega}{2\hbar} r_0^2 = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} \mathcal{S}$$

où $\mathcal{S} = \pi r_0^2$ est l'aire du cercle. La dégénérescence g d'un niveau de Landau n est donnée par le nombre de valeurs possibles de p

$$g = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} \mathcal{S} = \frac{|q|B}{2\pi\hbar} \mathcal{S} \quad (11.168)$$

Il faut multiplier ce résultat par un facteur 2 si l'on veut tenir compte du spin. En toute rigueur, il faudrait s'assurer qu'il n'y a pas de dégénérescence supplémentaire, en montrant que tout opérateur commutant avec H (ou R^2) et R_0^2 est une fonction de H et de R_0^2 : on ne peut pas trouver de propriétés physiques supplémentaires compatibles et indépendantes. La démonstration suit le même canevas que celle donnée pour l'oscillateur harmonique simple (exercice 11.6.2).

Il n'est pas difficile de généraliser au cas d'un mouvement à trois dimensions. En effet, comme $A_z = 0$, il suffit de rajouter au hamiltonien un terme en $P_z^2/(2m)$ dont les valeurs propres sont $p_z^2/(2m)$. L'énergie totale est une fonction de n et de p_z

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (11.169)$$

Si le mouvement vertical de la particule est limité par $0 \leq z \leq L_z$, le nombre de niveaux de Landau dans $[p_z, p_z + \Delta p_z]$ est

$$g = \frac{L_z}{2\pi\hbar} \frac{|q|B}{2\pi\hbar} \mathcal{S} \Delta p_z \quad (11.170)$$

11.6 Exercices

11.6.1 Éléments de matrice de Q et de P

1. Calculer les éléments de matrice $\langle n|Q|m\rangle$ et $\langle n|P|m\rangle$ des opérateurs Q et P dans la base $|n\rangle$.
2. Calculer la valeur moyenne $\langle n|Q^4|n\rangle$ de Q^4 dans l'état $|n\rangle$. Suggestion : calculer

$$|\varphi_n\rangle = (a + a^\dagger)^2 |n\rangle$$

et $\|\varphi_n\|^2$.

11.6.2 Propriétés mathématiques

1. Montrer les relations de commutation

$$[N, a^p] = -pa^p \quad \text{et} \quad [N, a^{\dagger p}] = pa^{\dagger p}$$

En déduire que les seules fonctions de a et de a^\dagger qui commutent avec N sont des fonctions de N , et que les valeurs propres de N sont non dégénérées.

2. Soit \mathcal{H}' le sous-espace de \mathcal{H} sous-tendu par les vecteurs $|n\rangle$ et \mathcal{H}'_\perp l'espace orthogonal : $\mathcal{H} = \mathcal{H}' \oplus \mathcal{H}'_\perp$. On appelle \mathcal{P}' le projecteur sur \mathcal{H}' . Montrer que \mathcal{P}' commute avec a et a^\dagger et en déduire, en utilisant le théorème de von Neumann du § 8.3.2, que soit $\mathcal{P}' = 0$, soit $\mathcal{P}' = I$. La première éventualité étant exclue, $\mathcal{P}' = I$ et les vecteurs $|n\rangle$ forment une base de \mathcal{H} .

11.6.3 États cohérents

1. Calculer $\langle z|P^2|z\rangle$ et $\langle z|H^2|z\rangle$ et en déduire les dispersions (11.39).

2. On se propose de rechercher les états $|\varphi(t)\rangle$ tels que les valeurs moyennes de a et de H aient des propriétés identiques aux propriétés classiques. En premier lieu, si $\langle a(t)\rangle = \langle \varphi(t)|a|\varphi(t)\rangle$, montrer que

$$i\frac{d}{dt}\langle a(t)\rangle = \omega\langle a(t)\rangle$$

et $\langle a(t)\rangle$ vérifie donc la même équation différentielle (11.29) que $z(t)$. On définit le nombre complexe z_0 par

$$z_0 = \langle a(t=0)\rangle = \langle \varphi(0)|a|\varphi(0)\rangle$$

et on aura donc comme solution de l'équation différentielle pour $\langle a(t)\rangle$

$$\langle a(t)\rangle = z_0 e^{-i\omega t}$$

3. La deuxième condition concerne la valeur moyenne du hamiltonien. On exige, en suivant (11.30) et en ajoutant l'énergie de point zéro

$$\langle \varphi(0)|H|\varphi(0)\rangle = \hbar\omega \left(|z_0|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

ou, de façon équivalente

$$\langle a^\dagger a \rangle = \langle \varphi(0)|a^\dagger a|\varphi(0)\rangle = |z_0|^2$$

Soit l'opérateur $b(z_0) = a - z_0$. Montrer que

$$\langle \varphi(0)|b^\dagger(z_0)b(z_0)|\varphi(0)\rangle = 0$$

et en déduire

$$a|\varphi(0)\rangle = z_0|\varphi(0)\rangle$$

L'état $|\varphi(0)\rangle$ est donc l'état cohérent $|z_0\rangle$.

4. *Fonction d'onde d'un état cohérent.* Exprimer l'opérateur de déplacement $D(z)$ (11.40) en fonction des opérateurs P et Q et calculer la fonction d'onde $\psi_z(q) = \langle q|z\rangle$. Suggestion : écrire $D(z)$ sous la forme

$$D(z) = f(z, z^*) \exp[c(z - z^*)Q] \exp[ic'(z + z^*)P]$$

déterminer les constantes c et c' et utiliser le fait que P est le générateur infinitésimal des translations (cf. § 9.1.1)

$$\exp\left(-i\frac{Pl}{\hbar}\right)|q\rangle = |q+l\rangle$$

Exprimer $\psi_z(q)$ en fonction de la fonction d'onde $\varphi_0(q)$ (11.23) de l'état fondamental.

5. Montrer qu'un opérateur A est entièrement déterminé par ses « éléments diagonaux » $\langle z|A|z\rangle$. Suggestion : utiliser

$$\langle z|A|z\rangle = e^{-|z|^2} \sum_{n,m} \frac{A_{nm} z^n z^{*m}}{\sqrt{n!m!}}$$

11.6.4 Couplage à une force classique

Les états cohérents permettent de traiter simplement la version quantique de l'oscillateur harmonique forcé. En mécanique classique élémentaire, l'action d'une force externe $F(t)$ sur un oscillateur harmonique

$$m\ddot{q}(t) = -m\omega^2 q + F(t)$$

se traduit dans le hamiltonien par un couplage $-qF(t)$ entre l'élongation q et la force $F(t)$. Dans la version quantique, au hamiltonien de l'oscillateur harmonique simple (11.9) s'ajoute un terme de couplage $-QF(t)$ entre l'élongation Q et la force externe $F(t)$, que l'on appelle conventionnellement *force classique* ou aussi *source classique*

$$W(t) = -Q\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)F(t) = -\hbar(a + a^\dagger)f(t)$$

Dans cette expression $f(t)$ est un nombre ayant la dimension d'une fréquence. Nous noterons H_0 le hamiltonien (11.9) de l'oscillateur harmonique simple et $H(t)$ le hamiltonien total

$$H(t) = H_0 + W(t) = H_0 - \hbar(a + a^\dagger)f(t) \tag{11.171}$$

1. Le problème est très semblable à celui rencontré au § 9.6.3 (cf. (9.138)), et nous pourrions tenter de le traiter par une méthode de perturbations. Cependant, il se trouve que l'on peut calculer exactement l'évolution temporelle grâce à l'opérateur de déplacement $D(z)$ (11.40). On commence par passer dans le point de vue de l'interaction (§ 4.2.5). Montrer que

$$\tilde{W}(t) = -\hbar(a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})f(t)$$

et que l'opérateur d'évolution dans ce point de vue vérifie l'équation différentielle ($\tilde{U}(t) = \tilde{U}(t, 0)$)

$$i \frac{d\tilde{U}(t)}{dt} = - (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}) f(t) \tilde{U}(t) \quad \tilde{U}(t=0) = I$$

2. On divise l'intervalle $[0, t]$ en n intervalles infinitésimaux Δt et on part de

$$\tilde{U}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\Delta t \tilde{W}(t_j)/\hbar}$$

Pour calculer ce produit, on utilise la propriété (11.42) de l'opérateur de déplacement avec $z_j = if(t_j) \exp[i\omega t_j]$. Montrer que

$$\tilde{U}(t) = e^{i\Phi} \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^t dt' dt'' f(t') f(t'') e^{-i\omega(t'-t'')}\right) \exp[z(t)a^\dagger] \exp[-z^*(t)a] \tag{11.172}$$

avec

$$z(t) = i \int_0^t dt' e^{i\omega t'} f(t')$$

Le facteur de phase $\exp(i\Phi)$ peut être ignoré, mais il est facile de le calculer

$$i\Phi = -\frac{1}{2} \int_0^t dt' dt'' f(t') f(t'') e^{-i\omega(t'-t'')} \varepsilon(t' - t'')$$

où $\varepsilon(t)$ est la fonction signe de t : $\varepsilon(t) = 1$ si $t > 0$, $\varepsilon(t) = -1$ si $t < 0$. Vérifier que le membre de droite de cette équation est bien un nombre imaginaire pur. En déduire l'expression de $\tilde{U}(t)$ sous la forme

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t) &= e^{i\Phi} e^{-|z|^2/2} e^{a^\dagger z(t)} e^{-az^*(t)} = e^{-Y} e^{a^\dagger z(t)} e^{-az^*(t)} \\ Y &= \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\omega(t'-t'')} f(t') f(t'') \theta(t' - t'') \end{aligned} \quad (11.173)$$

où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside : $\theta(t) = 1$ si $t > 0$, $\theta(t) = 0$ si $t < 0$. Dans la suite du problème on se servira de la forme (11.172) de $\tilde{U}(t)$.

3. On examine le cas où l'état initial à $t = 0$ est un état propre $|n\rangle$ de H_0 en supposant que la force agit seulement pendant un intervalle de temps fini $[t_1, t_2]$, et en choisissant d'observer l'oscillateur à un temps $t > t_2$: $0 < t_1 < t_2 < t$. On définit la transformée de Fourier $\tilde{f}(\omega)$ de $f(t)$

$$\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega t'} f(t') = \int_{t_1}^{t_2} dt' e^{i\omega t'} f(t')$$

Montrer que le résultat final pour $\tilde{U}(t)$ est indépendant de t pour $t > t_2$

$$\tilde{U}(t) = \exp(i\Phi) \exp\left(ia^\dagger \tilde{f}(\omega)\right) \exp\left(ia \tilde{f}^*(\omega)\right) \exp\left(-\frac{1}{2} |\tilde{f}(\omega)|^2\right) \quad (11.174)$$

Montrer que si l'oscillateur est dans son état fondamental au temps $t = 0$, le vecteur d'état final est un état cohérent

$$\tilde{U}(t)|0\rangle = e^{i\Phi} |\tilde{f}(\omega)\rangle$$

Montrer que la probabilité d'observer un état final $|m\rangle$ est donnée par une loi de Poisson (11.34)

$$p(m) = \frac{(|\tilde{f}(\omega)|^2)^m \exp(-|\tilde{f}(\omega)|^2)}{m!}$$

5. Généraliser les résultats précédents au couplage (11.102) d'un champ électromagnétique quantifié à une source classique $\vec{j}_{em}(\vec{r}, t)$ en écrivant la perturbation sous la forme

$$W(t) = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{A}_{\vec{k}} \cdot \vec{j}_{em}(\vec{k}, t)$$

11.6.5 Opérateur de phase

1. Afin d'essayer de définir un opérateur de phase Φ , on écrit l'opérateur d'annihilation a sous la forme d'une quasi-représentation module et phase

$$a = A e^{i\Phi} \quad A = A^\dagger$$

En déduire $a^\dagger a + I = A^2$ et

$$A = \sqrt{N+1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \sqrt{n+1} \langle n|$$

On a donc $\exp(i\Phi) = A^{-1}a$. Montrer que $\exp(i\Phi)$ est identique à l'opérateur E défini en (11.47), et n'est donc pas unitaire : Φ n'existe pas comme opérateur hermitien.

2. Montrer que les opérateurs C et S définis par

$$C = \frac{1}{2} (E + E^\dagger) \quad S = \frac{1}{2i} (E - E^\dagger)$$

sont les analogues de $\cos \phi$ et $\sin \phi$. Calculer les commutateurs $[C, S]$, $[C, N]$, $[S, N]$ et la somme $C^2 + S^2$. Quelles inégalités de Heisenberg peut-on déduire de ces commutateurs ?

3. Calculer les valeurs moyennes et les dispersions de C et S dans un état cohérent $|z\rangle$, $z = |z| \exp(i\theta)$.

11.6.6 Potentiels scalaire et vecteur en jauge de Coulomb

On écrit formellement la relation (11.73) donnant le potentiel de Coulomb instantané

$$\bar{V} = -\frac{1}{\varepsilon_0} (\nabla^2)^{-1} \rho_{\text{em}}$$

qui est la relation inverse de $\nabla^2 \bar{V} = -\rho_{\text{em}}/\varepsilon_0$. Utiliser la seconde équation de Maxwell (11.52) sous la forme

$$c^2 \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \bar{V} \right) + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}_{\text{em}}$$

pour montrer que \vec{A} vérifie

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \vec{j}_{\text{em}}^T$$

où le « courant électromagnétique transverse » \vec{j}_{em}^T vaut

$$\vec{j}_{\text{em}}^T = \vec{j}_{\text{em}} - \vec{\nabla} \cdot [(\nabla^2)^{-1} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{\text{em}})]$$

11.6.7 Dépendance temporelle du coefficient de Fourier classique

On écrit la décomposition de Fourier du potentiel électromagnétique classique

$$A_{\text{cl}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \left(A_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\omega_k t} + A'_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\omega_k t} \right) + \text{c.c.}$$

où nous avons omis la dépendance vectorielle qui ne joue aucun rôle dans l'argument ; c.c. = complexe conjugué. En utilisant

$$\sum_{\vec{k}} = \sum_{-\vec{k}} = \frac{1}{2} \left(\sum_{\vec{k}} + \sum_{-\vec{k}} \right)$$

montrer que l'on peut faire en sorte que $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ soit toujours associé à $\exp(-i\omega_k t)$, comme dans (11.83).

11.6.8 Relations de commutation du champ électromagnétique

1. En se plaçant à $t = 0$, évaluer le commutateur (11.101)

$$[A_i(\vec{r}), -\varepsilon_0 E_j(\vec{r}')] = i\hbar \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}'')}$$

Montrer que ces relations sont aussi valables pour le commutateur à *temps égaux*

$$[A_{Hi}(\vec{r}, t), -\varepsilon_0 E_{Hj}(\vec{r}', t)]$$

2. En déduire les relations de commutation entre E_{Hi} et B_{Hj} .

11.6.9 Détection homodyne et lame séparatrice déséquilibrée

1. On reprend l'interféromètre du § 1.4.5, en supposant qu'un seul photon dans le mode a arrive dans l'interféromètre. Le mode b est le vide, et l'état initial est donc $|1_a 0_b\rangle$. Montrer que l'état final est

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} (-1 + e^{i\delta}) |1_a 0_b\rangle + \frac{i}{2} (1 + e^{i\delta}) |0_a 1_b\rangle$$

En déduire les taux de comptage S_a et S_b des détecteurs D_a et D_b et retrouver les résultats du § 1.4.5

$$S_a \propto \langle \Psi | a^\dagger a | \Psi \rangle \quad S_b \propto \langle \Psi | b^\dagger b | \Psi \rangle$$

Répéter le raisonnement pour un état de Fock initial à n photons $|n_a 0_b\rangle$, et montrer que le résultat pour n photons est le même que pour n photons successifs. Que se passe-t-il si l'état initial est un état cohérent $|z_a 0_b\rangle$?

2. On utilise une détection homodyne avec un diviseur de faisceau déséquilibré, l'oscillateur local étant dans un état $|z\rangle$. Montrer que le taux de détection S_a du détecteur D_a est

$$S_a \propto \langle z | b^\dagger b | z \rangle \sin^2 \lambda + \text{Tr}(\rho_s a^\dagger a) \cos^2 \lambda + i \text{Tr}[\rho_s |z\rangle \langle z| (a^\dagger b - ab^\dagger)] \sin \lambda \cos \lambda$$

où ρ_s est l'opérateur statistique du signal. Donner l'interprétation physique des trois termes. Montrer que le dernier terme est un terme de battement entre le signal et l'oscillateur local et qu'il peut s'écrire

$$S_a^{\text{bat}} \propto 2\sqrt{t(1-t)} |z\rangle \langle X_{[\theta+\pi/2]} |$$

avec $z = |z\rangle \exp(i\theta)$.

11.6.10 Oscillations de Rabi dans une cavité

1. Dans le cadre de la section 11.4.3, calculer la probabilité $p(t)$ de trouver l'atome au temps t dans l'état excité hors résonance, et montrer que la fréquence des oscillations est maintenant (toujours dans le cas où il n'y a pas de photons dans la cavité)

$$\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_R^2}$$

Montrer que pour un désaccord δ tel que $\Omega_R \ll |\delta| \ll \omega_0$, l'atome reste pratiquement toujours dans son état excité. Comment doit-on modifier les résultats si la cavité contient exactement n photons ?

2. On suppose que la cavité contient un état cohérent du champ $|z\rangle$ et on revient au cas de la résonance : $\delta = 0$. Montrer que la probabilité $p(t)$ est

$$p(t) = \frac{1}{2} - \frac{e^{-|z|^2}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} \cos(\Omega_n t) \quad \Omega_n = \sqrt{n+1} \Omega_R$$

Expérimentalement, la transformée de Fourier de $p(t)$ exhibe des pics à des fréquences $\nu_0 = 47$ kHz, $\nu_1 = 65$ kHz et $\nu_2 = 81$ kHz. En déduire le nombre moyen de photons $n_0 = |z|^2$ de l'état cohérent sachant que le rapport de la hauteur des pics à r_0 et à r_1 est $\simeq 0.9$.

3. Montrer que si $n_0 \gg 1$, alors il semble raisonnable de traiter n comme une variable continue et $p(t)$ se met sous la forme

$$p(t) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\Omega_{n_0} t) e^{-t^2/\tau^2}$$

Donner l'expression du temps de relaxation τ des oscillations. En fait il n'est pas correct de traiter n comme une variable continue : l'étude numérique de la somme discrète montre que les oscillations commencent par disparaître pour $t \gtrsim \tau$, mais qu'elles réapparaissent au bout d'un certain temps. C'est le phénomène de résurgence. Estimer le temps τ_1 au bout duquel les oscillations correspondant à $n_0 - \sqrt{n_0}$ et $n_0 + \sqrt{n_0}$ sont déphasées de π , et montrer que $\tau \simeq \tau_1$. Pourquoi les oscillations réapparaissent-elles après $2\tau_1$ pour disparaître ensuite ?

11.6.11 Conservation du courant en présence d'un champ magnétique

En utilisant l'équation de Schrödinger dans un champ magnétique, montrer que le courant \vec{j} (11.154) obéit à l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

11.6.12 Transformations de jauge non abéliennes

Les interactions fondamentales sont toutes fondées sur les théories de jauge non abéliennes, que nous allons définir dans un cas élémentaire en généralisant la transformation de jauge (11.151). En omettant la dépendance par rapport au temps afin de simplifier la discussion, nous allons supposer que la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ est un vecteur à deux composantes $\Phi(\vec{r}) = [\varphi_1(\vec{r}), \varphi_2(\vec{r})]$ dans un espace de Hilbert complexe à deux dimensions, et qu'il existe dans cet espace une opération de symétrie, dite de *symétrie interne*, qui laisse la physique invariante,

$$\Phi(\vec{r}) \rightarrow \Phi'(\vec{r}) = \Omega \Phi \quad \text{ou} \quad \varphi'_\alpha = \sum_{\beta=1}^2 \Omega_{\alpha\beta} \varphi_\beta$$

généralisant (11.150). Ω est une matrice 2×2 unitaire et de déterminant unité, ou en d'autres termes une matrice du groupe $SU(2)$. La symétrie est appelée *symétrie de jauge* et le groupe $SU(2)$ est le *groupe de jauge*. En général le groupe de jauge est un groupe de Lie compact. Le groupe de jauge de l'électromagnétisme est le groupe des transformations de phase (11.150), noté $U(1)$, qui est abélien : l'électromagnétisme est une théorie de jauge abélienne. Lorsque le groupe de jauge est non abélien, la théorie de jauge sera dite non abélienne. Les groupes de jauge du modèle standard de la physique des particules élémentaires sont le groupe produit direct $SU(2) \times U(1)$ pour les interactions électrofaibles et $SU(3)$ pour la chromodynamique quantique, qui sont des groupes non abéliens.

Suivant les résultats de l'exercice 3.3.6, la matrice Ω peut s'écrire en fonction des matrices de Pauli

$$\Omega = \exp \left(-i q \sum_{a=1}^3 \Lambda_a \frac{1}{2} \sigma_a \right)$$

Lorsque les fonctions Λ_a sont indépendantes de \vec{r} , on a affaire à une symétrie de jauge *globale*, et si les Λ_a sont fonctions de \vec{r} , à une symétrie de jauge *locale*. Afin d'alléger les notations, on se placera dans un système d'unités où $\hbar = m = 1$.

1. L'analogie du potentiel vecteur de l'électromagnétisme est un champ vectoriel de composantes \vec{A}_a dans l'espace de symétrie interne. On définit la matrice $\vec{\mathbf{A}}$ par

$$\vec{\mathbf{A}} = \sum_{a=1}^3 \vec{A}_a \frac{1}{2} \sigma_a$$

$\vec{\mathbf{A}}$ a à la fois des composantes ordinaires $i = (x, y, z)$ et des composantes a dans l'espace de symétrie interne : $\vec{\mathbf{A}} = \{A_{ia}\}$. L'expression du courant \vec{j} généralise (11.154)

$$\vec{j} = \text{Re} \left[\Phi^\dagger (-i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}})\Phi \right] = \text{Re} \left[\Phi^\dagger (-i\vec{\mathbf{D}})\Phi \right]$$

où

$$\vec{\mathbf{D}} = -i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}}$$

est la dérivée covariante. Montrer que la transformation de jauge $\Phi \rightarrow \Phi'$ laisse \vec{j} invariant si cette transformation de jauge est globale à condition de transformer aussi $\vec{\mathbf{A}}$ en $\vec{\mathbf{A}}'$

$$\vec{\mathbf{A}}' = \Omega \vec{\mathbf{A}} \Omega^{-1}$$

Si la transformation de jauge est locale, montrer que l'invariance du courant

$$\vec{j} = \vec{j}' = \text{Re} \left[\Phi'^\dagger (-i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}}')\Phi' \right]$$

implique la loi de transformation $\vec{\mathbf{A}} \rightarrow \vec{\mathbf{A}}'$

$$\vec{\mathbf{A}}' = \Omega \vec{\mathbf{A}} \Omega^{-1} - \frac{i}{q} (\vec{\nabla} \Omega) \Omega^{-1}$$

Retrouver la loi de transformation (11.71) dans le cas abélien.

2. On choisit une transformation de jauge infinitésimale : $|q\Lambda_a(\vec{r})| \ll 1$. En déduire la loi de transformation de \vec{A}_a

$$\delta \vec{A}_a = \vec{A}'_a - \vec{A}_a = -\vec{\nabla} \Lambda_a + q \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \Lambda_b \vec{A}_c$$

La différence (cruciale !) avec le cas abélien est que le *champ de jauge* \vec{A}_a dépend de façon non triviale de l'indice de symétrie interne a du groupe de jauge²⁰. En électromagnétisme les photons ne transportent pas de charge, mais les bosons de jauge d'une théorie non abélienne sont « chargés » : ils transportent les nombres quantiques de la symétrie interne.

3. Montrer que si Φ obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{1}{2} \left(-i\nabla - q\vec{\mathbf{A}} \right)^2 \Phi = \frac{1}{2} (-i\hbar\vec{\mathbf{D}})^2 \Phi = E\Phi$$

il en est alors de même pour Φ' à condition d'utiliser le champ $\vec{\mathbf{A}}'$.

20. Comme le champ \vec{A} est un champ vectoriel, les particules associées sont, comme le photon, des particules de spin 1, appelées *bosons de jauge* : bosons Z^0 et W^\pm pour les interactions électrofaibles, gluons pour la chromodynamique.

11.6.13 Effet Casimir

En raison des fluctuations quantiques du champ électromagnétique, il existe une force attractive entre deux plaques conductrices parallèles distantes de L , même si ces deux plaques sont disposées dans le vide et sont électriquement neutres : c'est l'*effet Casimir*²¹. On suppose que les dimensions des plaques sont très grandes par rapport à L .

1. Par un argument dimensionnel, montrer que la force P sur une plaque par unité de surface est de la forme

$$P = A \frac{\hbar c}{L^4}$$

où A est un coefficient numérique. La surprise est que $A \neq 0$!

2. Les deux plaques sont des rectangles parallèles au plan xOy distants de L , de côtés L_x et L_y , de surface $\mathcal{S} = L_x L_y$ avec $L_x, L_y \gg L$. On choisira des conditions périodiques suivant les axes Ox et Oy et on définira le vecteur d'onde \vec{k} de xOy par

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi n_x}{L_x}, \frac{2\pi n_y}{L_y} \right)$$

où n_x et n_y sont des entiers relatifs, $n_x, n_y \in \mathbb{Z}$. Montrer que si les plaques sont des conducteurs parfaits, les valeurs possibles des fréquences des ondes stationnaires sont de la forme

$$\omega_n(\vec{k}) = c \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + \vec{k}^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

On rappelle que pour un conducteur parfait la composante transverse du champ électrique s'annule à la surface du métal²². Expliquer pourquoi pour $n = 0$ il n'existe qu'un seul mode de polarisation possible.

3. Montrer que l'énergie de point zéro (11.96) est

$$E_0(L) = \frac{\hbar}{2} \left(2 \sum'_{n, \vec{k}} \omega_n(\vec{k}) \right)$$

où

$$\sum'_{n, \vec{k}} = \frac{1}{2} \sum_{n=0, \vec{k}} + \sum_{n \geq 1, \vec{k}}$$

4. On doit tenir compte de ce que le conducteur n'est jamais parfait : l'approximation du conducteur parfait est excellente à basse fréquence, mais à haute fréquence tout conducteur réel devient transparent. On doit donc modifier l'énergie de point zéro en tenant compte d'un facteur de coupure $\chi(\omega/\omega_c)$, $\chi(0) = 1$ et $\lim_{u \rightarrow \infty} \chi(u) = 0$: $\chi(u)$ est une fonction régulière, décroissant de la valeur un à $u = 0$ à la valeur zéro pour $u \rightarrow \infty$. En déduire

$$\begin{aligned} E_0(L) &= \frac{\hbar \mathcal{S}}{(2\pi)^2} \sum'_{n=0} \int d^2 k \omega_n(\vec{k}) \chi \left(\frac{\omega_n(\vec{k})}{\omega_c} \right) \\ &= \frac{\hbar \mathcal{S}}{2\pi c^2} \sum'_{n=0} \int_{\omega_n}^{\infty} d\omega \omega^2 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right) \quad \omega_n = \frac{\pi c n}{L} \end{aligned}$$

21. Cet exercice est adapté d'une présentation de B. Duplantier, Séminaire H. Poincaré, mars 2002.

22. Voir par exemple Jackson [2001], section 8.1.

Grâce au facteur de coupure, cette énergie est finie.

5. Calculer la pression exercée sur la plaque de droite

$$P_{\text{int}} = -\frac{1}{S} \frac{dE_0}{dL} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \sum_n' g(n)$$

où

$$g(n) = n^3 \chi \left(\frac{\omega_n}{\omega_c} \right)$$

Pour obtenir la pression totale sur cette plaque, il faut retrancher la pression en sens contraire exercée par le vide à l'extérieur de l'espace entre les deux plaques. Calculer l'énergie correspondante et en déduire la pression

$$P_{\text{ext}} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \int_0^\infty dn g(n)$$

La pression totale sur la plaque est $P_{\text{tot}} = P_{\text{int}} - P_{\text{ext}}$. Utiliser la formule d'Euler-MacLaurin

$$\sum_{n=0}^\infty' g(n) - \int_0^\infty g(n) = -\frac{1}{12} g'(0) + \frac{1}{6!} g'''(0) + \dots$$

pour montrer que le résultat à la limite où le facteur de coupure devient égal à un est

$$P_{\text{tot}} = -\frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{L^4}$$

Cette pression est attractive, et surtout elle est finie! En tenant compte soigneusement de tous les effets physiques, nous avons déduit d'une quantité *a priori* infinie, l'énergie de point zéro, une *quantité finie et mesurable*²³.

11.6.14 Calcul quantique avec des ions piégés

1. Les ions piégés sont peut-être une solution d'avenir pour la construction d'un ordinateur quantique. Dans une expérience réalisée par un groupe d'Innsbruck (Schmid-Kaler *et al.* [2003], Blatt [2004]), des ions $^{40}\text{Ca}^+$ sont confinés dans un piège approximativement unidimensionnel et harmonique. L'état fondamental $S_{1/2} = |g\rangle$ est identifié à l'état $|0\rangle$ du calcul quantique (§ 6.5.2), et l'état excité $D_{5/2} = |e\rangle$ avec $|1\rangle$. L'état excité est métastable, de vie moyenne très longue (~ 1 s) parce que la transition $D_{5/2} \rightarrow S_{1/2}$ est quadrupolaire électrique. Considérons d'abord un ion unique dans le piège. Son hamiltonien approché est

$$H_{\text{trap}} = \frac{1}{2M} p_z^2 + \frac{1}{2} M \omega_z^2 z^2,$$

où M est la masse de l'ion et ω_z la fréquence du piège. En absence d'un champ appliqué, le hamiltonien est la somme du hamiltonien des états internes de l'ion et de l'oscillateur harmonique du piège

$$H_0 = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z + \hbar \omega_z a^\dagger a$$

où ω_0 est la fréquence de la transition $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. On applique à l'ion le champ d'un laser lors que $t > 0$

$$\vec{E} = E_1 \hat{x} \cos(\omega t - kz - \phi)$$

23. Une référence récente est Mohiden et Roy [1998]. La précision des mesures de l'effet Casimir est actuellement de l'ordre de 1 %, et les mesures confirmer la validité de la formule théorique.

La fréquence de Rabi est notée ω_1 . Le couplage entre le champ et l'ion est

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \hbar \sigma_x \cos(\omega t - kz - \phi)$$

Ce hamiltonien s'écrit dans le point de vue de l'interaction (§ 4.2.5)

$$\tilde{H}_{\text{int}}(t) = e^{iH_0 t} H_{\text{int}}(t) e^{-iH_0 t}$$

Montrer que l'approximation séculaire conduit au hamiltonien

$$\tilde{H}_{\text{int}} \simeq -\frac{1}{2} \omega_1 \left[\sigma_+ e^{i(\delta t - \phi)} e^{-ikz} + \sigma_- e^{-i(\delta t - \phi)} e^{ikz} \right]$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord. Si $\delta = 0$, ce hamiltonien est indépendant du temps

$$\tilde{H}_1 \simeq -\frac{1}{2} \omega_1 \left[\sigma_+ e^{-i\phi} e^{-ikz} + \sigma_- e^{i\phi} e^{ikz} \right]$$

Comme

$$z = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}} (a + a^\dagger)$$

$\exp(\pm ikz)$ couple les niveaux internes $|0\rangle$ and $|1\rangle$ aux niveaux de vibration dans le piège. Les niveaux internes seront étiquetés n , $n = 0, 1$, les niveaux de vibration m , $m = 0, 1, 2, \dots$, et l'état produit $|n, m\rangle$

2. Définissons le paramètre sans dimension de Lamb-Dicke η par

$$\eta = k \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}}$$

Quelle est l'interprétation physique de η ? Soit m et $m + m'$ deux niveaux de l'oscillateur harmonique. Montrer que la fréquence de Rabi $\omega_1^{m \rightarrow m+m'}$ est donnée par

$$\omega_1^{m \rightarrow m+m'} = \omega_1 \langle m + m' | e^{i\eta(a+a^*)} | m \rangle$$

où η est le paramètre de Lamb-Dicke. Les transitions correspondant aux fréquences $\omega = \omega_0 + \omega_z$ (resp. $\omega = \omega_0 - \omega_z$) sont appelées bande latérale bleue (resp. bande latérale rouge), tandis que les transitions avec $\omega = \omega_0$ sont appelées transitions porteuses. Nous supposons aussi que $\eta \ll 1$ et nous nous plaçons au premier ordre en η . Montrer qu'à cette approximation et pour $m' = \pm 1$, on a pour les bandes latérales bleues et rouges

$$\begin{aligned} \omega_1^{m \rightarrow m+1} &\simeq \eta \sqrt{m+1} \omega_1 = \omega_1^+ \quad (\text{bleue}) \\ \omega_1^{m \rightarrow m-1} &\simeq \eta \sqrt{m} \omega_1 = \omega_1^- \quad (\text{rouge}) \end{aligned}$$

Écrire l'expression de \tilde{H}_{int} pour les deux bandes latérales, et montrer que pour la bande latérale bleue

$$\tilde{H}_{\text{int}}^+ = \frac{i}{2} \eta \omega_1 \sqrt{m+1} \left[\sigma_+ a_b e^{-i\phi} - \sigma_- a_b^\dagger e^{i\phi} \right]$$

tandis que pour la bande latérale rouge

$$\tilde{H}_{\text{int}}^- = \frac{i}{2} \eta \omega_1 \sqrt{m} \left[\sigma_+ a_r^\dagger e^{-i\phi} - \sigma_- a_r e^{i\phi} \right]$$

Les opérateurs $a_b \cdots a_r^*$ sont définis de façon à conserver la norme des vecteurs d'état

$$a_b = \frac{a}{\sqrt{m+1}} \quad a_b^* = \frac{a^*}{\sqrt{m+1}} \quad a_r = \frac{a}{\sqrt{m}} \quad a_r^* = \frac{a^*}{\sqrt{m}}$$

On se limite au cas $m = 1$. Quels sont les opérateurs de rotation sur les deux bandes $R^\pm(\theta, \phi)$, où $\theta = -\omega^\pm t$?

3. En plus des niveaux $|0,0\rangle$, $|0,1\rangle$, $|1,0\rangle$ et $|1,1\rangle$, on utilise également le niveau $|1,2\rangle$. Dessiner le schéma des niveaux et identifier les transitions de bande latérale bleue $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,1\rangle$ et $|0,1\rangle \leftrightarrow |1,2\rangle$. Montrer que l'opérateur de rotation $R_{\alpha\beta}^+$ défini par

$$R_{\alpha\beta}^+ = R^+(\alpha, \pi/2) R^+(\beta, 0) R^+(\alpha, \pi/2) R^+(\beta, 0)$$

est égal à $-I$ pour $\alpha = \pi$, β quelconque, ou $\beta = \pi$, α quelconque. $R^\pm(\theta, \phi)$ est une rotation d'angle θ autour d'un axe situé dans le plan xOy , faisant un angle ϕ avec l'axe Ox et utilisant la bande latérale bleue (+) ou rouge (-). Compte tenu de ce que la fréquence de Rabi pour la transition $|0,1\rangle \leftrightarrow |1,2\rangle$ vaut $\sqrt{2}$ fois celle pour la transition $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,1\rangle$, comment peut-on choisir α et β de telle sorte que $R_{\alpha\beta}^+ = -I$ pour les deux transitions ? En déduire la séquence des 4 impulsions et leur durée de telle sorte que le résultat net soit

$$|00\rangle \leftrightarrow -|0,0\rangle \quad |0,1\rangle \leftrightarrow -|0,1\rangle \quad |1,0\rangle \leftrightarrow +|1,0\rangle \quad |1,1\rangle \leftrightarrow -|1,1\rangle$$

On a donc fabriqué une porte cZ (au signe près)²⁴.

4. Il faut maintenant « transférer » la porte cZ vers la base de calcul des états $|n_1, n_2\rangle$, $n_1, n_2 = 0, 1$ étant les états fondamentaux et excités des deux ions. Montrer que l'on obtient le résultat souhaité en prenant en sandwich l'opérateur de rotation $R_{\alpha\beta}^{+(1)}$ sur l'ion numéro 1 utilisant la bande latérale bleue entre deux rotations de π sur l'ion numéro 2 utilisant la bande latérale rouge

$$[R^{-(2)}(\pi, \pi/2)] R_{\alpha\beta}^{+(1)} [R^{-(2)}(-\pi, \pi/2)]$$

Une opération un peu plus complexe permet de construire une porte $cNOT$.

11.6.15 L'expérience de Badurek *et al.*

L'expérience de Badurek *et al.* [1985]²⁵ montre qu'un champ classique ne s'intrique pas avec le système quantique avec lequel il interagit. Le schéma de l'expérience est donné sur la figure 11.4 : il s'agit d'un interféromètre à neutrons où arrivent des neutrons polarisés spin up. Chaque bras de l'interféromètre contient une cavité où règnent un champ magnétique constant \vec{B}_0 parallèle à Oz et un champ de radiofréquences $\vec{B}_1(t)$ polarisé suivant Ox de fréquence $\omega \simeq \omega_0$, où ω_0 est la fréquence de Larmor dans \vec{B}_0 , qui fait basculer les spins. Si le champ classique $\vec{B}_1(t)$ s'intriquait avec le spin, une trace du passage du neutron dans le bras supérieur (1) ou inférieur (2) de l'interféromètre serait laissée dans l'environnement, et les interférences seraient détruites. L'expérience montre que les interférences persistent, et donc qu'un champ classique ne s'intrique pas avec le système quantique avec lequel il interagit.

1. Pour une étude quantitative, on écrit le vecteur d'état initial

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 + |\uparrow\rangle_2) \otimes |z(t=0)\rangle$$

^{24.} La porte cZ se déduit de la porte $cNOT$ (6.125) par $\sigma_x \rightarrow \sigma_z$. En fait $cNOT = H^{\otimes 2} cZH^{\otimes 2}$, où H est la porte de Hadamard (6.122).

^{25.} Voir par exemple Omnès [1994], chapitre 11.

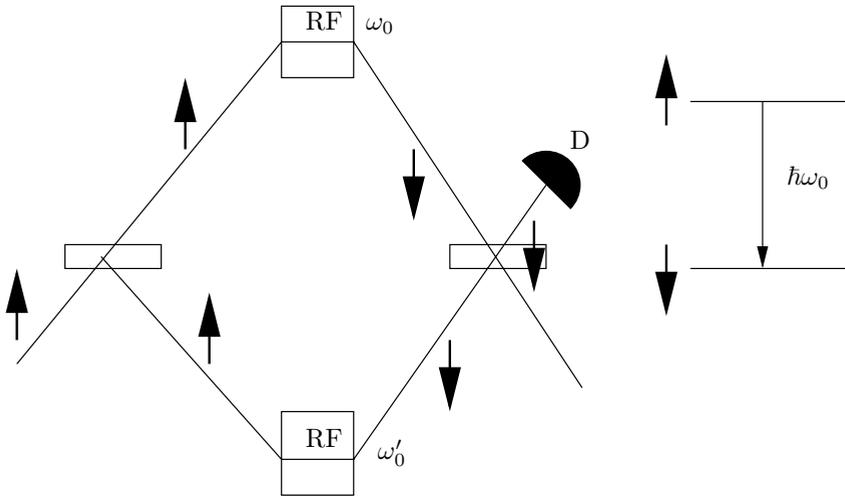


FIG. 11.4 – Schéma de l’expérience de Badurek *et al.* Les deux faisceaux sont recombinaés par la lame horizontale de droite et les neutrons sont détectés en D.

où $|\uparrow\rangle_i$ représente un spin up incident dans le bras (i) de l’interféromètre et $|z(t=0)\rangle$ l’état cohérent du champ engendré par la source de radiofréquences à l’entrée de la cavité. Le champ magnétique quantifié \vec{B} est dans le point de vue de Schrödinger (α est une constante)

$$\vec{B}_1 = \alpha (a + a^\dagger) \hat{x}$$

L’état cohérent du champ est supposé de la forme

$$|z(t)\rangle = ||z|e^{-i(\omega t - \phi)}\rangle$$

Montrer que la valeur moyenne du champ est

$$\langle \vec{B}_1 \rangle(t) = 2\alpha|z| \cos(\omega t - \phi) \hat{x}$$

et en déduire $2\alpha|z| = B_1$.

2. On se place dans le point de vue de l’interaction, avec pour hamiltonien H_0

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger a - \frac{1}{2} \hbar\omega_0 \sigma_z$$

Montrer qu’à l’approximation séculaire le hamiltonien d’interaction W s’écrit dans le point de vue de l’interaction

$$\tilde{W} = -\frac{1}{2} \alpha \gamma \hbar \left[\sigma_+ a e^{-i\delta t} + \sigma_- a^\dagger e^{i\delta t} \right]$$

où γ est le facteur gyromagnétique du neutron et $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord.

3. On définit le vecteur $|\varepsilon\rangle$ par

$$a^\dagger |z\rangle = z^* |z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

Montrer que $\langle z|\varepsilon\rangle = 0$ et que $\|\varepsilon\|^2 = \langle\varepsilon|\varepsilon\rangle = 1$: ajouter un photon à un état cohérent le modifie de façon négligeable si $|z| \gg 1$. En déduire que \tilde{W} appliqué sur un état cohérent peut s'écrire sous la forme

$$\tilde{W} \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_1 \left[\sigma_+ e^{i\phi} e^{-i\delta t} + \sigma_- e^{-i\phi} e^{i\delta t} \right] |z\rangle\langle z| - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega_1}{|z|} \sigma_- e^{i\delta t} |\varepsilon\rangle\langle z|$$

où $\omega_1 = \gamma B_1$ est la fréquence de Rabi. Le premier terme de \tilde{W} est le hamiltonien d'interaction avec un champ classique, le deuxième terme est négligeable si $|z| \gg 1$, ce qui est le cas pour un champ classique. L'interaction avec le champ classique maintient la cohérence entre les états de spin $|\uparrow\rangle_1$ et $|\uparrow\rangle_2$, et les interférences ne sont pas détruites.

11.7 Bibliographie

La diagonalisation du hamiltonien de l'oscillateur harmonique à une dimension par une méthode algébrique est classique et se trouve dans tous les manuels de mécanique quantique. La théorie des états cohérents est développée par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément G_V ou Gerry et Knight [2005], chapitre 3. Pour des compléments sur la quantification du champ électromagnétique, on pourra se reporter à Itzykson et Zuber [1980], chapitre 3, Le Bellac [1988], chapitre 9, Grynberg *et al.* [1997], chapitre V, Gerry et Knight [2005], chapitre 2 ou Weinberg [1995], chapitre 8. Les fluctuations du champ électromagnétique et les états comprimés sont traités par Grynberg *et al.* [1997] chapitre V et complément V.1, par Gerry et Knight [2005], chapitres 4, 6 et 7, ou par Mandel et Wolf [1995], chapitres 10, 11 et 12. L'électrodynamique en cavité et la détection homodyne sont traitées en détail par Gerry et Knight [2005], chapitres 6 et 10 et par Haroche et Raimond [2006], chapitre 3. Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 21 donnent une discussion physique de la différence entre la vitesse et \vec{p}/m en présence d'un champ électromagnétique. Les niveaux de Landau sont traités dans Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément E_{V1} et les applications à la physique du solide par Huang [1963] chapitre 11.

Chapitre 12

Méthodes semi-classiques

IL ARRIVE SOUVENT EN PHYSIQUE qu'une théorie (ou un modèle) \mathcal{S} soit la limite d'une théorie (ou un modèle) plus complexe \mathcal{C} , lorsqu'un paramètre sans dimension δ tend vers zéro : $\lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{C} = \mathcal{S}$. L'exemple emblématique d'une telle limite est la limite non relativiste (NR) de la mécanique relativiste (R). Le petit paramètre est alors le rapport de la vitesse caractéristique v du problème à la vitesse de la lumière : $\delta = v/c$, et $R \implies NR$ si $v/c \rightarrow 0$. L'exemple de l'énergie cinétique K illustre cette limite

$$K = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - mc^2 = \frac{1}{2}mv^2 \left[1 + O\left(\frac{v}{c}\right)^2 \right]$$

Cependant, ce cas simple n'est pas générique : le plus souvent la limite $\mathcal{C} \implies \mathcal{S}$ est singulière lorsque $\delta \rightarrow 0$. Un exemple important est donné par l'hydrodynamique : si δ est l'inverse du nombre de Reynolds, la limite $\delta \rightarrow 0$ de l'équation de Navier-Stokes est l'équation d'Euler des fluides non visqueux. Mais cette limite, qui est encore loin d'être bien comprise, passe par la phase du régime turbulent. Alors que l'on s'attendrait à ce que la dissipation disparaisse progressivement lorsque la viscosité s'annule, elle se concentre dans des régions de plus en plus irrégulières et qui deviennent fractales lorsque $\delta \rightarrow 0$.

Une autre limite, qui elle aussi est loin d'être bien comprise et qui nous intéresse particulièrement dans ce chapitre, est la limite classique de la mécanique quantique. Si S_{car} est une action caractéristique du problème physique considéré, par exemple $S_{\text{car}} = m\omega a^2$ pour un mouvement circulaire de rayon a et de fréquence ω , on pourrait espérer que les effets quantiques deviennent négligeables lorsque le paramètre sans dimension $\delta = \hbar/S_{\text{car}} \ll 1^1$. Cependant cette limite se heurte à deux difficultés (au moins!). La première difficulté est qu'il existe une différence conceptuelle fondamentale entre

1. Ce que l'on exprime souvent de façon cavalière comme : la limite $\hbar \rightarrow 0$ de la physique quantique est la physique classique. Bien sûr un tel énoncé est formellement incorrect, car \hbar est dimensionné, ce qui ne nous empêchera pas d'utiliser cette formulation !

les descriptions classique et quantique de la réalité physique², et la limite $\hbar/S_{\text{car}} \rightarrow 0$ n'a pas de signification évidente. Ainsi que nous l'avons expliqué, on ne peut pas par exemple attribuer une trajectoire à une particule quantique, alors que cette notion est essentielle dans la description classique. La limite quantique \implies classique ne peut pas se résumer à faire tendre un petit paramètre vers zéro. Au contraire, la limite $v/c \rightarrow 0$ de la mécanique relativiste ne pose pas problème parce que la description de la réalité physique est la même dans les deux cas : dans les deux cas les particules possèdent des positions et des vitesses bien déterminées simultanément et des trajectoires³. La mécanique classique a été établie pour le mouvement d'objets macroscopiques que l'on suppose souvent isolés, mais dans une description quantique, ainsi que nous l'avons vu au chapitre 6, on ne peut pas négliger l'interaction d'un objet macroscopique avec son environnement. Le mouvement de cet objet nous apparaît classique, avec une trajectoire déterminée, mais le caractère macroscopique de l'objet ne suffit pas en soi à assurer l'existence d'une description classique, où l'on n'observe pas de superpositions linéaires d'états macroscopiquement distincts.

La deuxième difficulté vient de ce que la limite $\hbar \rightarrow 0$ est singulière. À titre d'exemple, considérons une expérience de fentes d'Young réalisée avec des particules quantiques à la limite $\hbar \rightarrow 0$. L'intensité sur l'écran est

$$I(x) \propto \cos^2 \frac{px}{\hbar}$$

Il existe au moins deux raisons pour lesquelles les franges d'interférences vont disparaître en pratique.

- (i) L'interaction avec l'environnement va rendre incohérents les paquets d'ondes issus des deux fentes (voir § 15.3.5 pour une étude détaillée).
- (ii) Les franges d'interférences sont de plus en plus resserrées quand $\hbar \rightarrow 0$, les autres quantités étant maintenues fixes, et l'interfrange devient plus petite que la résolution du détecteur.

Dans les deux cas on observera le résultat classique de l'addition des intensités, et non des amplitudes. La présence de $1/\hbar$ dans l'expression de $I(x)$ est un exemple du caractère singulier de la limite $\hbar \rightarrow 0$. Une des conséquences les plus frappantes concerne le chaos : en physique quantique, un système fini ne peut avoir que des fréquences de Bohr discrètes, et le mouvement est quasi-périodique, même si son analogue classique (dont le hamiltonien est formellement identique) est chaotique. La raison en est que les limites $t \rightarrow \infty$

2. L'auteur ne souhaite en aucun cas imposer au lecteur le point de vue philosophique d'une « réalité externe » indépendante. « Réalité physique » est ici une expression commode pour désigner un concept utilisé spontanément par les physiciens.

3. La limite non relativiste de la mécanique est simple, mais il n'en va pas de même pour la limite non relativiste de l'électromagnétisme, qui n'a rien d'évident si l'on veut respecter l'invariance galiléenne, voir Le Bellac et Lévy-Leblond [1973].

et $\hbar \rightarrow 0$ ne commutent pas. Si le système est macroscopique, l'interaction avec l'environnement détruit les délicates relations de phase assurant la quasi-périodicité de la dynamique quantique, et le mouvement *apparaît* chaotique si le hamiltonien classique est de type chaotique. Un exemple standard est celui du mouvement de rotation chaotique du satellite de Saturne, Hypérioron (Zurek [2003]), qui apparaît classique en raison, en particulier, de son interaction avec le rayonnement solaire.

Dans ce chapitre, nous allons négliger l'environnement en supposant les systèmes parfaitement isolés, et étudier dans ce cadre la limite $\hbar \rightarrow 0$. En fait, dans cette optique, la question centrale est la suivante : quelle est l'empreinte laissée sur le problème quantique, et en particulier sur son spectre de niveaux, par les propriétés du problème classique associé ? La réponse à cette question complexe constitue toujours aujourd'hui un domaine de recherches très actif. Un des problèmes est de comprendre les relations entre les propriétés chaotiques d'un mouvement classique et le spectre de niveaux du problème quantique correspondant. Nous n'aborderons pas ce sujet en raison de sa trop grande technicité ; nous renvoyons le lecteur aux livres cités dans la bibliographie, et nous nous limiterons à des sujets plus élémentaires.

Ce chapitre a pour objectif de montrer que l'on peut recourir dans certains cas à des concepts classiques comme celui de trajectoire ou d'espace de phase pour obtenir des résultats approchés à la limite $\hbar \rightarrow 0$: les méthodes d'approximation correspondantes sont appelées *semi-classiques*. Les trois premières sections sont consacrées à l'intégrale de Feynman, ou intégrale de chemin et à quelques-unes de ses applications. L'intégrale de Feynman permet d'écrire des amplitudes de probabilité comme une somme sur des trajectoires, ou chemins. *Cette formulation est exacte*⁴, *équivalente au formalisme de l'espace de Hilbert*. C'est une formulation alternative de la mécanique quantique, qui n'introduit que des fonctions à valeurs numériques et se passe complètement des opérateurs. L'intégrale de chemin présente un intérêt considérable pour traiter de problèmes formels : théorie des perturbations, relations entre mécanique quantique et mécanique statistique, théorie quantique des champs... , mais elle est peu performante pour la résolution de problèmes concrets standard comme le calcul du spectre de l'oscillateur harmonique ou de l'atome d'hydrogène. En revanche, elle est d'un grand intérêt comme point de départ d'une série d'approximations semi-classiques fondées sur l'approximation de la phase stationnaire. Toutefois, les calculs correspondants sont complexes, et les méthodes semi-classiques fondées sur l'intégrale de chemin sortent du cadre de ce livre ; nous renvoyons donc le lecteur aux références données en fin de chapitre.

La section 12.4 est consacrée à une méthode datant des débuts de la mécanique quantique, la méthode BKW. Elle permet, entre autres, de donner une expression approchée des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde des états liés dans un puits de potentiel et de calculer la probabilité de transmission à

4. Dans la limite de nos connaissances actuelles !

travers une barrière de potentiel. Dans la section 12.5, nous nous plaçons dans l'espace de phase (q, p) de la mécanique analytique. L'objectif est d'essayer de définir une densité de probabilité dans l'espace de phase qui soit la plus proche possible de celle de la mécanique statistique classique. Nous verrons qu'un tel objectif n'est pas facile à atteindre, mais qu'une pseudo-densité de probabilité due à Wigner présente néanmoins des caractéristiques intéressantes. Le lien de la section 12.6 : théorème adiabatique et phases géométriques, avec les sections précédentes est assez ténu. Toutefois, ce lien sera fait grâce à l'effet Aharonov-Bohm.

12.1 Propagateurs et fonctions de Green

12.1.1 Propagateur de l'équation de Schrödinger

Notre objectif est de décrire l'évolution au cours du temps d'un système quantique de N particules dont la fonction d'onde est connue au temps t' . Soit $U(t, t')$ l'opérateur d'évolution (4.14) de ce système, qui vérifie l'équation différentielle (4.17)

$$[i\hbar\partial_t - H(t)]U(t, t') = 0 \quad (12.1)$$

et $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \equiv \langle \vec{r} | \varphi(t) \rangle = \varphi(\vec{r}, t)$ sa fonction d'onde. On peut l'écrire en terme de la fonction d'onde au temps t' , $\varphi(\vec{r}, t')$, grâce à la relation de fermeture $\int d^3r' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'| = I$

$$\langle \vec{r} | \varphi(t) \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \varphi(t') \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \varphi(\vec{r}', t') \quad (12.2)$$

avec $d^3r = d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N$. L'équation (12.2) met en évidence le *propagateur* $K(\vec{r}, t | \vec{r}', t')$

$$\boxed{K(\vec{r}, t | \vec{r}', t') := \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \theta(t - t')} \quad (12.3)$$

La fonction de Heaviside $\theta(t - t')$ ($\theta(t) = 0$ si $t < 0$, $\theta(t) = 1$ si $t > 0$) assure que la propagation se fait uniquement vers le futur, alors que l'ordre des temps t et t' est quelconque dans $U(t, t')$: l'équation (12.3) définit le *propagateur retardé*, mais il existe d'autres types de propagateur, qui sont étudiés dans l'exercice 12.7.4. La propriété $U(t, t) = I$ implique la condition aux limites suivante pour K

$$\lim_{t \rightarrow t'^+} K(\vec{r}, t | \vec{r}', t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (12.4)$$

La définition (12.3) montre que le propagateur est l'amplitude de probabilité pour trouver le système au point \vec{r} au temps t sachant qu'il était en \vec{r}' au temps t' . Ceci rappelle la définition d'une probabilité conditionnelle (voir la section 12.2.1), d'où le choix de la notation $K(\bullet | \bullet)$: le propagateur est une sorte d'amplitude de probabilité de présence conditionnelle. Lorsque H est

indépendant du temps, $U(t, t') = \exp[-iH(t - t')/\hbar]$, et définissant $|\vec{r}, t\rangle$ et $|\vec{r}', t'\rangle$ par

$$|\vec{r}, t\rangle = e^{iHt/\hbar} |\vec{r}\rangle \quad |\vec{r}', t'\rangle = e^{iHt'/\hbar} |\vec{r}'\rangle$$

le propagateur K s'écrit aussi

$$K(\vec{r}, t|\vec{r}', t') \equiv \langle \vec{r}, t|\vec{r}', t'\rangle \theta(t - t') \tag{12.5}$$

Cette notation est fréquemment utilisée de façon conventionnelle même lorsque H dépend du temps.

Compte tenu de la définition (12.3) et de l'identité

$$\frac{d}{dt} \theta(t - t') = \delta(t - t')$$

on peut calculer la dérivée par rapport au temps de K

$$i\hbar \partial_t K = HK + i\hbar \langle \vec{r}|U(t, t')|\vec{r}'\rangle \delta(t - t')$$

Comme $U(t, t) = I$, on en déduit que le propagateur K vérifie l'équation différentielle inhomogène

$$[i\hbar \partial_t - H(t)]K(\vec{r}, t|\vec{r}', t') = i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \tag{12.6}$$

où $H(t)$ est écrit en représentation \vec{r} . Cette équation ne spécifie pas le propagateur de façon unique, puisque l'on peut toujours ajouter à une solution de (12.6) une solution de l'équation homogène correspondante. Ainsi que nous l'avons déjà noté, c'est la fonction $\theta(t - t')$ dans (12.3) qui fixe la solution de façon unique et définit le propagateur retardé.

Utilisant la propriété de groupe (4.15) de l'opérateur d'évolution et la relation de fermeture $\int d^3r_1 |\vec{r}_1\rangle \langle \vec{r}_1| = I$ écrite pour un temps $t' < t_1 < t$, on déduit l'équation suivante, qui est l'analogie de l'équation de Chapman-Kolmogorov (12.28) valable pour les probabilités conditionnelles des processus markoviens

$$K(\vec{r}, t|\vec{r}', t') = \int d^3r_1 K(\vec{r}, t|\vec{r}_1, t_1) K(\vec{r}_1, t_1|\vec{r}', t') \tag{12.7}$$

12.1.2 Fonctions de Green

Nous allons maintenant nous restreindre au cas où le hamiltonien est indépendant du temps et où l'opérateur d'évolution dépend seulement de la différence $(t - t')$

$$U(t, t') = \exp[-iH(t - t')/\hbar]$$

Il sera commode de choisir $t' = 0$ et de récrire le propagateur sous la forme

$$K(\vec{r}, t|\vec{r}', t' = 0) = K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \langle \vec{r}| \exp[-iHt/\hbar] |\vec{r}'\rangle \tag{12.8}$$

Soit $\{\varphi_{ns}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_{ns} \rangle\}$ un système complet de fonctions propres du hamiltonien H d'énergie E_n

$$H\varphi_{ns}(\vec{r}) = E_n\varphi_{ns}(\vec{r}) \quad (12.9)$$

où s est un indice de dégénérescence éventuelle des niveaux d'énergie. Compte tenu de ces définitions on peut récrire le propagateur en utilisant la relation de fermeture des vecteurs propres de H , $\sum_{n,s} |\varphi_{ns}\rangle \langle \varphi_{ns}| = I$

$$\begin{aligned} K(\vec{r}, \vec{r}'; t) &= \theta(t) \sum_{n,s} \sum_{m,u} \langle \vec{r} | \varphi_{ns} \rangle \langle \varphi_{ns} | e^{-iHt/\hbar} | \varphi_{mu} \rangle \langle \varphi_{mu} | \vec{r}' \rangle \\ &= \theta(t) \sum_{n,s} e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_{ns}(\vec{r}) \varphi_{ns}^*(\vec{r}') \end{aligned} \quad (12.10)$$

La transformée de Fourier temporelle de (12.10) introduit une fonction intéressante, la *fonction de Green* $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$. Pour calculer cette transformée de Fourier, évaluons l'intégrale

$$I(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt/\hbar} \theta(t) e^{-iE_n t/\hbar} = \int_0^{\infty} dt e^{i(E-E_n)t/\hbar}$$

L'intégrand oscille à l'infini, et pour rendre l'intégrale convergente, nous remplaçons E par $E + i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$. Ceci équivaut à prendre la transformée de Fourier d'une fonction $\theta(t)$ comme celle d'une distribution. Nous obtenons pour $I(E)$

$$I(E) = \frac{i\hbar}{E - E_n + i\eta}$$

Le lecteur pourra vérifier le résultat en calculant la transformée de Fourier inverse à l'aide d'une intégration dans le plan complexe en E . Nous pouvons maintenant écrire la transformée de Fourier du propagateur

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int dt e^{iEt/\hbar} K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \sum_{n,s} \frac{\varphi_{ns}(\vec{r}) \varphi_{ns}^*(\vec{r}')}{E - E_n + i\eta} \quad (12.11)$$

où le facteur $-i/\hbar$ a été introduit par convention. La transformation de Fourier inverse est

$$K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = i \int \frac{dE}{2\pi} e^{-iEt/\hbar} G(\vec{r}, \vec{r}'; E) \quad (12.12)$$

La fonction $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ est appelée *fonction de Green* de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, car elle vérifie

$$(E - H)G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (12.13)$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier temporelle de (12.6). Pour justifier directement (12.13) on utilise (12.11)

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \sum_{n,s} \langle \vec{r} | \varphi_{ns} \rangle \frac{1}{E - E_n + i\eta} \langle \varphi_{ns} | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | \frac{1}{E - H + i\eta} | \vec{r}' \rangle$$

ce qui montre que $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ est l'élément de matrice $\langle \vec{r}' | G(E) | \vec{r} \rangle$ de l'opérateur $G(E)$

$$G(E) = \frac{1}{E - H + i\eta} \tag{12.14}$$

et à l'évidence $(E - H)G(E) = I$. Il est parfois commode de considérer des valeurs complexes z de l'énergie, et $G(z) = (z - H)^{-1}$ est la résolvante (voir (2.46)) de H , la fonction de Green $G(E)$ étant obtenue en choisissant $z = E + i\eta$. La résolvante $G(z)$ a des pôles pour les valeurs propres $z = E_n$ du spectre discret de H , et le résidu R_n du pôle à $z = E_n$ est relié aux fonctions propres de la valeur propre E_n

$$R_n = \sum_s \varphi_{ns}(\vec{r}) \varphi_{ns}^*(\vec{r}') \tag{12.15}$$

Dans le cas du spectre continu, $G(z)$ est singulier si z appartient au spectre de H et $G(z)$ présente une coupure sur l'axe réel. La connaissance de la fonction de Green pour un problème quantique indépendant du temps est équivalente à celle des fonctions propres et valeurs propres de H , c'est-à-dire à la solution complète du problème quantique. C'est cette observation qui rend la fonction de Green particulièrement utile.

12.1.3 Propagateur libre

L'exemple le plus simple de propagateur est celui de l'équation de Schrödinger libre : $V = 0$. Pour des raisons de simplicité d'écriture, nous allons nous limiter au cas d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace à une dimension, mais la plupart des résultats qui vont suivre se généralisent sans difficulté à N particules dans un espace à trois dimensions. En notant $K_0(x, x'; t)$ le propagateur libre, nous obtenons à partir de (12.8), avec $H = H_0 = P^2/2m$

$$\begin{aligned} K_0(x, x'; t) &= \langle x | e^{-iP^2t/(2m\hbar)} | x' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} e^{-ip^2t/(2m\hbar)} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \exp \left[-\frac{itp'^2}{2m\hbar} \right] \end{aligned}$$

où nous avons introduit un système complet d'états de l'opérateur impulsion P pour obtenir la seconde équation de la première ligne, et le changement de variables $p' = p - m(x - x')/t$ pour la seconde ligne. L'intégrale de la seconde ligne se ramène à l'intégrale gaussienne

$$I(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-au^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \tag{12.16}$$

lorsque a est réel et strictement positif. Pour a complexe, $a = |a| \exp(i\theta)$, on utilise un prolongement analytique

$$I(a) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{-i\theta/2}$$

ce qui donne l'expression explicite de K_0

$$\boxed{K_0(x, x'; t) = \theta(t) \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left[\frac{im(x - x')^2}{2\hbar t}\right]} \quad (12.17)$$

Comme le propagateur libre ne dépend que de la différence $(x - x')$, il sera commode de choisir par la suite $x' = 0$. La transformée de Fourier temporelle $\overline{G}_0(x; E)$ de $K_0(x; t)$ vérifie d'après (12.13)

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \overline{G}_0(x; E) = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(x)$$

Au lieu de \overline{G}_0 , il est plus commode d'utiliser la fonction de Green $G_0(x; k) = (\hbar^2/2m)\overline{G}_0(x; E)$, avec $E = \hbar^2 k^2/2m$, qui vérifie

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) G_0(x, k) = \delta(x) \quad (12.18)$$

Une solution possible de cette équation est

$$G_0(x; k) = \frac{1}{2ik} e^{ik|x|} \quad (12.19)$$

En effet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} e^{ik|x|} \right] &= \frac{d}{dx} \left[ik\epsilon(x) e^{ik|x|} \right] \\ &= 2ik\delta(x) e^{ik|x|} - k^2 e^{ik|x|} \end{aligned}$$

où $\epsilon(x) = \theta(x) - \theta(-x)$ est la fonction signe de x . La généralisation de (12.18) à trois dimensions

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}; \vec{k}) = \delta(\vec{r}) \quad (12.20)$$

sera étudiée chapitre suivant.

12.2 L'intégrale de Feynman-Kač

12.2.1 Mouvement brownien et diffusion

Dans la section précédente, nous avons vu apparaître des intégrands qui oscillent à l'infini. Ces oscillations constituent un sérieux handicap pour un

traitement mathématiquement rigoureux de l'intégrale de chemin que nous allons introduire ci-dessous en exploitant une correspondance remarquable entre problèmes de physique quantique et problèmes de physique statistique. En plus de son utilité dans la discussion de l'intégrale de chemin, cette correspondance peut aussi servir à la compréhension qualitative et même à la résolution quantitative, en particulier numérique de certains problèmes. Partons de l'équation de Schrödinger pour la particule libre à une dimension

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi(x, t) = 0 \quad (12.21)$$

et effectuons la transformation (passage au *temps imaginaire* ou *temps euclidien*)⁵ $t \rightarrow -i\tau$

$$\left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi(x, \tau) = 0$$

Cette équation a la forme d'une équation de diffusion (parce que l'on a choisi $t \rightarrow -i\tau$ et non $t \rightarrow +i\tau$!)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \quad (12.22)$$

où l'on identifie $\hbar/2m$ à un coefficient de diffusion D . Par une transformation de Fourier spatiale, cette équation devient

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{\varphi}(k, \tau) = -Dk^2 \tilde{\varphi}(k, \tau) \quad (12.23)$$

qui a pour solution évidente

$$\tilde{\varphi}(k, \tau) = C e^{-Dk^2 \tau} \quad (12.24)$$

où C est une constante arbitraire. Revenant à l'espace des x , on en déduit par une transformée de Fourier de gaussienne

$$\varphi(x, \tau) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{-Dk^2 \tau} e^{ikx} = \frac{\theta(\tau)}{\sqrt{4\pi D\tau}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D\tau}\right) \quad (12.25)$$

La constante C de (12.24) a été fixée à un, de sorte que

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \varphi(x, \tau) = \delta(x) \quad (12.26)$$

L'interprétation physique de $\varphi(x, \tau)$ est la suivante : si une particule (classique !) diffuse à partir de l'origine au temps $\tau = 0$, elle sera au point x au

5. La terminologie « temps euclidien » vient de la théorie quantique des champs. La métrique de Minkowski $x_M^2 = x_0^2 - \vec{r}^2$, avec $x_0 = ct$, se transforme au signe près dans la métrique euclidienne $x_E^2 = \vec{r}^2 + x_4^2$ avec $x_4 = c\tau$. Le passage au temps euclidien est aussi très utile dans la discussion de l'équation de Fokker-Planck, qui peut se ramener à une équation de Schrödinger en temps imaginaire : voir par exemple Parisi [1989], chapitre 19, ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 9. On trouvera dans le livre de Parisi [1989], chapitre 13, une excellente discussion du prolongement analytique du temps réel au temps imaginaire.

temps τ avec une probabilité $\varphi(x, \tau)$. Plus généralement on peut définir la *probabilité conditionnelle*

$$\mathbf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D |\tau_b - \tau_a|}} \exp\left(-\frac{|x_b - x_a|^2}{4D |\tau_b - \tau_a|}\right) \quad \tau_b > \tau_a \quad (12.27)$$

C'est la probabilité de trouver la particule en x_b au temps τ_b sachant qu'elle est partie de x_a au temps τ_a . Le processus de diffusion étant *markovien*, cette probabilité obéit à une *équation de Chapman-Kolmogorov*

$$\mathbf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \int dx_1 \mathbf{p}(x_b, \tau_b | x_1, \tau_1) \mathbf{p}(x_1, \tau_1 | x_a, \tau_a) \quad (12.28)$$

Pour prouver directement (12.28), on remarque que la transformée de Fourier spatiale de \mathbf{p} est donnée par

$$\tilde{\mathbf{p}}(k, \tau_b - \tau_a) = e^{-Dk^2(\tau_b - \tau_a)} \theta(\tau_b - \tau_a)$$

et que le produit dans l'espace des k se transforme en convolution dans l'espace des x . Nous allons maintenant itérer l'équation (12.28) en divisant l'intervalle $[\tau_a, \tau_b]$ en n intervalles de longueur $\varepsilon = (\tau_b - \tau_a)/n$. Aux temps intermédiaires $\tau_j = \tau_a + j\varepsilon$ correspondent des positions $x(\tau_j) = x_j, j = 1, 2, \dots, n-1$, les positions initiale et finale étant $x_0 = x(\tau_a) = x_a, x_n = x(\tau_b) = x_b$ (figure 12.1). L'itération de (12.28) donne

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) &= \int \prod_{j=1}^{n-1} dx_j \mathbf{p}(x_b, \tau_b | x_{n-1}, \tau_{n-1}) \cdots \mathbf{p}(x_{j+1}, \tau_{j+1} | x_j, \tau_j) \\ &\quad \cdots \mathbf{p}(x_1, \tau_1 | x_a, \tau_a) \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi D \varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{dx_j}{\sqrt{4\pi D \varepsilon}} \exp\left[-\frac{1}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon}\right] \end{aligned} \quad (12.29)$$

On peut donner une interprétation intuitive de cette formule rigoureuse à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$: dans cette limite, la trajectoire en zig-zag de la figure 12.1 représente un « chemin » $x(\tau)$ allant de (x_a, τ_a) à (x_b, τ_b) en passant par les points intermédiaires (τ_j, x_j) . Ce chemin est affecté d'un poids statistique

$$\exp\left[-\frac{\varepsilon}{4D} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon^2}\right] \rightarrow \exp\left[-\frac{1}{4D} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 d\tau\right]$$

si l'on admet avec un certain optimisme (*cf.* section 12.3.2) que l'on peut remplacer la somme de Riemann par une intégrale à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. On écrit formellement cette somme sur les chemins

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi D \varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{dx_j}{\sqrt{4\pi D \varepsilon}} \rightarrow \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \quad (12.30)$$

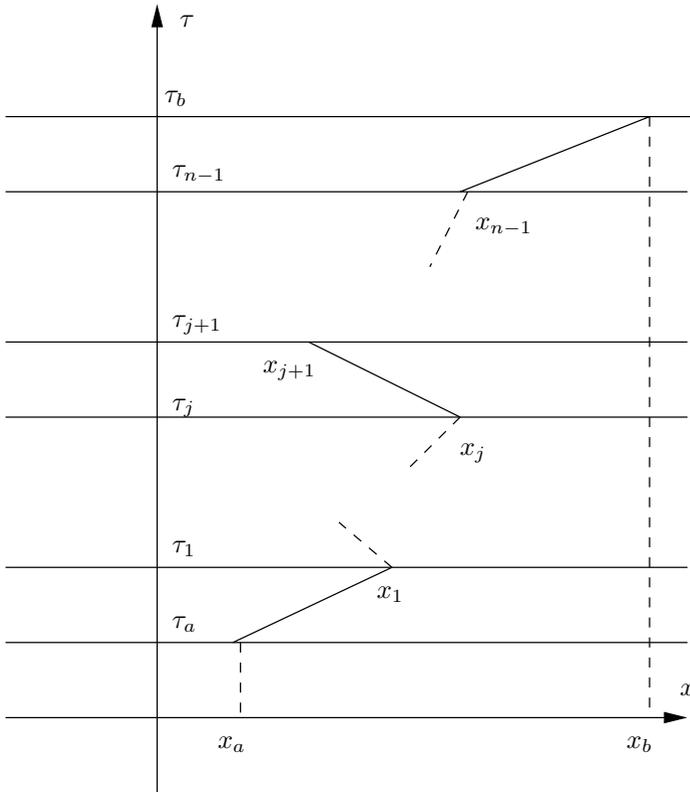


FIG. 12.1 – Découpage de l’intervalle d’intégration $[\tau_a, \tau_b]$ en n intervalles de longueur $\varepsilon = (\tau_b - \tau_a)/n$.

et (12.29) devient avec cette notation

$$p(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{4D} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 d\tau \right] \quad (12.31)$$

Ce type d’intégrale est appelé *intégrale fonctionnelle* ou *intégrale de chemin*. Il faut souligner que l’écriture de (12.31) est purement formelle, et que pour toute évaluation concrète on doit se ramener à (12.29). En réalité le passage d’une somme de Riemann à une intégrale n’est pas justifié parce que $dx/d\tau$ n’existe pas pour les chemins qui donnent la contribution principale à (12.31). En effet, on déduit de (12.25) l’écart quadratique moyen de la position au temps τ

$$\langle x^2 \rangle = 2D\tau$$

ce qui est la relation classique pour un processus de diffusion. Un chemin correspondant à un processus markovien et qui vérifie cette équation pour

$\tau \rightarrow 0$ sera appelé *chemin brownien*. En raison du caractère markovien, les positions successives x_j aux temps τ_j vérifient la relation suivante

$$\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle = 2D(\tau_{j+1} - \tau_j) = 2D\varepsilon \quad (12.32)$$

de sorte que $[\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle]^{1/2} \propto \sqrt{\varepsilon}$, ce qui entraîne que le chemin $x(\tau)$ est une fonction continue, mais non dérivable : on ne peut pas définir la vitesse d'une particule brownienne. En dépit de cette difficulté, Wiener a pu définir rigoureusement une mesure (12.31) sur les chemins browniens.

12.2.2 Propagateur euclidien et fonction de partition

Notre objectif est de généraliser (12.31) lorsque l'on transpose au cas euclidien une équation de Schrödinger avec potentiel $V(x)$ différent de zéro. Remarquons tout d'abord que le propagateur libre (12.17) se ramène au propagateur en temps imaginaire (12.25) si l'on effectue dans (12.17) les substitutions $t \rightarrow -i\tau$ et $\hbar/2m \rightarrow D$, et par conséquent, la probabilité $\rho(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a)$ s'écrit comme un élément de matrice dans la représentation position

$$\rho(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \langle x_b | e^{-H_0(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | x_a \rangle \quad (12.33)$$

Nous avons vu que nous pouvions écrire (12.33) sous la forme de l'intégrale de chemin (12.31), et nous voulons généraliser ce résultat lorsque l'on ajoute un potentiel $V(x)$ à H_0

$$H_0 \rightarrow H = H_0 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

en évaluant le *propagateur euclidien*

$$K_E(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \langle x_b | e^{-H(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | x_a \rangle \quad (12.34)$$

Comme ci-dessus, nous divisons l'intervalle $[\tau_b, \tau_a]$ en n sous-intervalles de longueur ε , $(\tau_b - \tau_a) = n\varepsilon$, et nous utilisons la formule de Trotter pour deux opérateurs A et B

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n \quad (12.35)$$

Cette formule est facile à montrer dans le cas où A et B sont des opérateurs bornés (exercice 12.7.1). Choisisant

$$A = -(\tau_b - \tau_a)H_0/\hbar \quad B = -(\tau_b - \tau_a)V/\hbar$$

nous obtenons

$$e^{-H(\tau_b - \tau_a)/\hbar} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-\varepsilon H_0/\hbar} e^{-\varepsilon V/\hbar} \right)^n$$

L'étape suivante consiste à écrire (exercice 12.7.1)

$$e^{-\varepsilon H_0/\hbar} e^{-\varepsilon V/\hbar} = e^{-\varepsilon V/2\hbar} e^{-\varepsilon H_0/\hbar} e^{-\varepsilon V/2\hbar} + O(\varepsilon^3)$$

On introduit aux temps euclidiens $\tau_j = \tau_a + j\varepsilon$, $j = 1, 2, \dots, n-1$, $\tau_0 = \tau_a, \tau_n = \tau_b$ un ensemble complet de vecteurs propres de l'opérateur position X

$$\int dx_j |x_j\rangle\langle x_j| = I$$

ce qui conduit à des éléments de matrice

$$\langle x_{j+1} | e^{-\varepsilon V/2\hbar} e^{-\varepsilon H_0/\hbar} e^{-\varepsilon V/2\hbar} | x_j \rangle = e^{-\varepsilon[V(x_{j+1})+V(x_j)]/2} \langle x_{j+1} | e^{-\varepsilon H_0/\hbar} | x_j \rangle$$

Le second élément de matrice a déjà été évalué, car c'est tout simplement un propagateur euclidien libre (12.27) avec $D = \hbar/2m$

$$\langle x_{j+1} | e^{-\varepsilon H_0/\hbar} | x_j \rangle = \mathbf{p}(x_{j+1}, \tau_{j+1} | x_j, \tau_j) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left[-\frac{m(x_{j+1} - x_j)^2}{2\hbar\varepsilon}\right]$$

et l'on trouve pour K_E

$$K_E(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} dx_j \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon}} \times \exp\left[-\sum_{j=1}^{n-1} \frac{m(x_{j+1} - x_j)^2}{2\hbar\varepsilon}\right] \exp\left[-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=1}^{n-1} V(x_j)\right] \quad (12.36)$$

La présence de x_j comme argument de V n'est pas essentielle : ainsi que nous le verrons dans la section 12.3.2, x_{j+1} , $(x_{j+1} + x_j)/2$, ou tout point intermédiaire entre x_{j+1} et x_j feraient l'affaire ; voir également l'exercice 12.7.5. Comme précédemment, on simplifie l'écriture en passant formellement à une intégrale de chemin

$$K_E(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right) d\tau\right] \quad (12.37)$$

L'interprétation intuitive de (12.37) est la suivante : dans le calcul du propagateur, chacun des chemins $x(\tau)$ partant de x_a au temps euclidien τ_a et arrivant en x_b au temps euclidien τ_b est affecté du poids statistique

$$\exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} H(x(\tau)) d\tau\right]$$

et le propagateur s'obtient en sommant sur tous les chemins possibles compte tenu des conditions aux limites. Le point clé pour comprendre (12.37) est le suivant : quel que soit $V(x)$ le comportement aux temps courts du mouvement de la particule est dominé par la diffusion, $\langle(\Delta x)^2\rangle \propto \Delta\tau$ pour $\Delta\tau \rightarrow 0$. La

mesure d'intégration, celle qui définit les chemins dominants dans le calcul de (12.37) est la *mesure de Wiener*

$$\mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 \right) \right]$$

qui peut être traitée de façon mathématiquement rigoureuse. Il est instructif de vérifier directement (exercice 12.7.5) que $K_E(x, \tau | x_0, \tau_0)$ obéit à l'équation de Schrödinger en temps euclidien

$$\frac{\partial K_E}{\partial \tau} = - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) K_E = -H K_E \quad (12.38)$$

L'équation (12.37) permet d'obtenir la fonction de partition à la température T d'une particule quantique de hamiltonien H sous forme d'intégrale de chemin. En effet, cette fonction de partition $Z(\beta)$, $\beta = 1/k_B T$, est donnée par une trace

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta H} = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad (12.39)$$

d'où l'expression de $Z(\beta)$ sous forme d'intégrale de chemin⁶

$$Z(\beta) = \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right) d\tau \right] \quad (12.40)$$

L'intégrale porte sur tous les chemins périodiques : $x(0) = x(\beta\hbar)$. Comme l'opérateur statistique de l'ensemble canonique est $\rho = \exp(-\beta H)/Z(\beta)$, le propagateur euclidien est un élément de matrice $\rho(x_b, x_a; \beta\hbar)$ de l'opérateur statistique dans la représentation x , au facteur $Z(\beta)$ près

$$\langle x_b | e^{-\beta H} | x_a \rangle = Z(\beta) \rho(x_b, x_a; \beta\hbar) \quad (12.41)$$

Enfin on peut donner une interprétation du propagateur euclidien cette fois en termes de mécanique statistique *classique*, en considérant $x(\tau)$ comme un champ aléatoire classique, le poids statistique de Boltzmann de la configuration $x(\tau)$ étant donné par (12.37). La limite $\tau_a \rightarrow -\infty$, $\tau_b \rightarrow +\infty$ conduit à une remarque intéressante. En introduisant l'opérateur $X(\tau)$ dans la « représentation de Heisenberg euclidienne »

$$X_H(\tau) = e^{H\tau/\hbar} X e^{-H\tau/\hbar} \quad (12.42)$$

et en étudiant les éléments de matrice du produit $X_H(\tau_1)X_H(\tau_2)$ on peut montrer (exercice 12.7.2) que la longueur de corrélation du système classique est directement liée à la différence entre le niveau fondamental E_0 et le premier niveau excité E_1 du système quantique associé. C'est là un exemple de correspondance remarquable entre une propriété d'un problème de mécanique statistique et une propriété d'un problème de mécanique quantique associé.

6. Cette équation est fondamentale en mécanique statistique quantique. Elle est par exemple à la base de la méthode numérique dite de Monte-Carlo quantique, exposée par exemple dans Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 7.

12.2.3 Intégrale de chemin de Feynman

En substituant au temps euclidien τ le temps ordinaire t , on passe du propagateur euclidien (12.34) au propagateur quantique K

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \langle x | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | x_a \rangle \tag{12.43}$$

Compte tenu de

$$d\tau = i dt \quad \frac{d}{d\tau} = -i \frac{d}{dt}$$

la représentation de K sous forme d'une intégrale de chemin se déduit immédiatement de (12.37)

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \right] \tag{12.44}$$

où $\mathcal{D}x(t)$ doit se comprendre comme dans (12.30)

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \int \prod_{j=1}^{n-1} dx_j \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \tag{12.45}$$

La quantité qui apparaît dans l'intégrand de l'exponentielle de (12.44) est le *lagrangien* \mathcal{L} de la particule (on notera le signe moins devant le potentiel!)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \tag{12.46}$$

dont l'intégrale sur le temps est l'*action* S

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \tag{12.47}$$

On peut donc récrire K sous la forme

$$K(x_b, t_b | x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) e^{iS[x(t)]/\hbar} \tag{12.48}$$

où $S[x(t)]$ est l'action classique⁷ pour le chemin $x(t)$: un chemin $x(t)$ est donc affecté d'un poids $\exp(iS/\hbar)$ dans l'intégrale de chemin. L'action correspondant à un élément de chemin $x_j \rightarrow x_{j+1}$ de la figure 12.1 est

$$\Delta S = \frac{1}{2} m \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(x_j)$$

7. S est une *fonctionnelle* du chemin. La notation entre crochets $S[x(t)]$ indique que l'on a affaire à une fonctionnelle de $x(t)$.

Si $|x_{j+1} - x_j| \gg (\hbar\varepsilon/m)^{1/2}$, le facteur $\exp(iS/\hbar)$ oscille un grand nombre de fois quand on passe d'un chemin à un chemin voisin : les contributions principales viennent des chemins browniens. Il faut souligner que dans (12.45) ou (12.48) on intègre sur tous les chemins possibles tels que $x(t_a) = x_a$ et $x(t_b) = x_b$, et pas seulement sur les trajectoires classiques, celles qui obéissent aux équations du mouvement ! *Le formalisme de l'intégrale de chemin fait intervenir uniquement des quantités classiques, des nombres et des fonctions. Il offre une formulation alternative de la mécanique quantique, où n'interviennent ni les espaces de Hilbert, ni les opérateurs.*

Les trajectoires classiques $x_{cl}(t)$ (il peut y en avoir plusieurs) sont celles qui rendent l'action stationnaire

$$\left. \frac{\delta S}{\delta x(t)} \right|_{x(t)=x_{cl}(t)} = 0 \quad (12.49)$$

Considérons un chemin $x(t)$, soit S l'action correspondante et supposons $S \gg \hbar$. Si $|S - S_{cl}| \gg \hbar$, alors le facteur $\exp(iS/\hbar)$ oscille un grand nombre de fois quand on passe de $x_{cl}(t)$ à $x(t)$, et un tel chemin va contribuer de façon négligeable au propagateur K . Lorsque l'action classique est grande par rapport à \hbar , l'intégrale de chemin est dominée par les trajectoires proches des trajectoires classiques, et on pourra envisager un développement en puissances de \hbar autour de ces trajectoires. En physique statistique, l'approximation correspondante est l'approximation de Landau.

Une application importante des intégrales de chemin est l'écriture des *produits ordonnés dans le temps d'opérateurs*, aussi appelés *produits-T d'opérateurs*. Considérons l'élément de matrice suivant pour $t > t'$

$$F(x_b, t_b; t, t'; x_a, t_a) := \langle x_b | e^{-iH(t_b-t)/\hbar} X e^{-iH(t-t')/\hbar} X e^{-iH(t'-t_a)/\hbar} | x_a \rangle \quad t > t' \quad (12.50)$$

où X est l'opérateur position, et choisissons le chemin en zig-zag de la figure 12.1 pour évaluer cet élément de matrice. Comme x_j est la position de la particule au temps t_j , $x_j = x(t_j)$, nous obtenons en introduisant un système complet d'états propres de X

$$\int dx_j X |x_j\rangle \langle x_j| = \int dx_j x_j |x_j\rangle \langle x_j| = \int dx_j x(t_j) |x_j\rangle \langle x_j|$$

Mais nous pouvons exprimer F en terme de l'opérateur position dans la représentation de Heisenberg

$$X_H(t) = e^{iHt/\hbar} X e^{-iHt/\hbar} \quad (12.51)$$

en définissant $|x, t\rangle$ par

$$|x, t\rangle = e^{iHt/\hbar} |x\rangle \quad (12.52)$$

Lorsque $t > t'$, F s'écrit

$$F = \langle x_b, t_b | X_H(t) X_H(t') | x_a, t_a \rangle$$

tandis que pour $t < t'$

$$F = \langle x_b, t_b | X_H(t') X_H(t) | x_a, t_a \rangle$$

Nous allons tenir compte des deux ordres possibles de t et t' en définissant le produit- T d'opérateurs position X dans la représentation de Heisenberg par

$$\begin{aligned} T(X_H(t)X_H(t')) &= X_H(t)X_H(t') & t > t' \\ &= X_H(t')X_H(t) & t' > t \end{aligned} \tag{12.53}$$

Nous obtenons la représentation de l'élément de matrice du produit- T sous forme d'intégrale de chemin de F , valable quel que soit l'ordre des temps t et t'

$$\langle x_b, t_b | T(X_H(t)X_H(t')) | x_a, t_a \rangle = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) x(t)x(t') \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \right] \tag{12.54}$$

Cette équation se généralise facilement à la *fonctionnelle génératrice* des produits- T , $Z[j(t)]$ (cf. la note 7), où $j(t)$ est appelé *source* (exercice 12.7.3)

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[x(t)] + i \int_{t_a}^{t_b} j(t)x(t)dt \right] \tag{12.55}$$

qui permet de calculer les éléments de matrice de produits- T par différentiation fonctionnelle, par exemple

$$\langle x_b, t_b | T(X_H(t)X_H(t')) | x_a, t_a \rangle = \frac{(-i)^2}{Z([j = 0]; x_b, t_b; x_a, t_a)} \left. \frac{\delta^2 Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a)}{\delta j(t)\delta j(t')} \right|_{j=0} \tag{12.56}$$

où la valeur moyenne du produit- T a été normalisée en divisant par $Z([j = 0]; x_b, t_b; x_a, t_a)$.

12.3 Applications de l'intégrale de chemin

12.3.1 Oscillateur harmonique

Le cas de l'oscillateur harmonique est instructif car on peut mener jusqu'au bout des calculs analytiques. Afin de simplifier les formules, nous utiliserons

(uniquement dans cette sous-section) un système d'unités où $\hbar = m = 1$. En présence d'une source $j(t)$, le lagrangien est

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + j(t)x(t) \quad (12.57)$$

l'équation du mouvement correspondante étant

$$\ddot{x} + \omega^2 x = j(t) \quad (12.58)$$

L'expression explicite de la fonctionnelle génératrice est

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp \left[i \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + j(t)x(t) \right) \right] \quad (12.59)$$

En procédant de façon un peu cavalière, on effectue une intégration par parties dans l'intégrale sur t

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp \left[i \int_{t_a}^{t_b} dt \left(-\frac{1}{2} x \left[\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right] x + j(t)x(t) \right) \right] \quad (12.60)$$

L'intégrale dans (12.60) est une intégrale gaussienne que l'on calcule explicitement⁸

$$Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) = Z([j=0]; x_b, t_b; x_a, t_a) \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt dt' j(t) D(t-t') j(t') \right] \quad (12.61)$$

où $D(t)$ est une fonction de Green de l'oscillateur harmonique (à un facteur $-i$ près)

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) D(t) = -i\delta(t) \quad (12.62)$$

$D(t)$ est « l'inverse » de l'opérateur $i(d^2/dt^2 + \omega^2)$. Toutefois, comme nous l'avons déjà remarqué, l'équation (12.62) ne définit pas $D(t)$ de façon unique, et cette équation doit être complétée par des conditions aux limites choisies en fonction du problème posé (exercice 12.7.4). Le calcul explicite de Z est

8. L'exercice 2.4.7, eq. (2.52), montre que, pour calculer une intégrale gaussienne, il faut inverser la matrice A qui intervient dans l'exposant de (12.61). Cet inverse est donné par la solution de (12.62).

possible (exercice 12.7.6), et l'on trouve

$$\begin{aligned}
 Z([j]; x_b, t_b; x_a, t_a) &= \left(\frac{\omega}{2i\pi \sin \omega t} \right)^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{i\omega}{2 \sin \omega t} [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega t - 2x_a x_b] \right. \\
 &+ \frac{i x_a}{\sin \omega t} \int_{t_a}^{t_b} \sin[\omega(t_b - t')] j(t') dt' + \frac{i x_b}{\sin \omega t} \int_{t_a}^{t_b} \sin[\omega(t' - t_a)] j(t') dt' \\
 &\left. - \frac{i}{\omega \sin \omega t} \iint dt' dt'' j(t') \theta(t' - t'') \sin[\omega(t_b - t')] \sin[\omega(t'' - t_a)] j(t'') \right\}
 \end{aligned} \tag{12.63}$$

12.3.2 Intégrale de chemin en présence d'un champ magnétique

Le lagrangien d'une particule chargée de charge q dans un champ magnétique \vec{B} , supposé indépendant du temps pour simplifier, s'écrit en fonction du potentiel vecteur \vec{A} (exercice 8.5.8)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - V(\vec{r}(t)) + q\vec{A} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \tag{12.64}$$

Suivant (12.44), le propagateur prend la forme d'une intégrale de chemin

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b | \vec{r}_a, t_a) &= \\
 &\int_{\vec{r}(t_a)=\vec{r}_a}^{\vec{r}(t_b)=\vec{r}_b} \mathcal{D}\vec{r}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - V(\vec{r}(t)) + q\vec{A} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} \right) dt \right]
 \end{aligned} \tag{12.65}$$

Nous allons examiner l'action d'une transformation de jauge sur cette expression, ce qui va nous permettre de découvrir une subtilité du découpage de la figure 12.1 que nous avons passée sous silence jusqu'à présent. Effectuons une transformation de jauge (11.71) sur \vec{A}

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} \Lambda$$

Dans ces conditions on obtient une contribution supplémentaire à l'intégrale de l'exponentielle dans (12.65)

$$\frac{-iq}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right) \cdot \vec{\nabla} \Lambda = \frac{-iq}{\hbar} \int_{\vec{r}_a}^{\vec{r}_b} \vec{\nabla} \Lambda \cdot d\vec{r} = \frac{-iq}{\hbar} [\Lambda(\vec{r}_b) - \Lambda(\vec{r}_a)] \tag{12.66}$$

Ainsi que nous allons le voir bientôt, le passage de la seconde à la troisième expression de (12.66) qui semble pourtant évident, est en fait purement formel. En admettant pour l'instant la validité de cette manipulation formelle, la transformation de jauge agit donc de la façon suivante sur le propagateur

$$K(\vec{r}_b, t_b | \vec{r}_a, t_a) \rightarrow K'(\vec{r}_b, t_b | \vec{r}_a, t_a) = e^{-iq\Lambda(\vec{r}_b)/\hbar} K(\vec{r}_b, t_b | \vec{r}_a, t_a) e^{iq\Lambda(\vec{r}_a)/\hbar} \tag{12.67}$$

Vérifions que cette loi de transformation du propagateur est bien compatible avec la transformation de jauge (11.151). En effet, d'après (12.10)

$$K(\vec{r}_b, t_b | \vec{r}_a, t_a) = \sum_{n,s} \varphi_{ns}(\vec{r}_b) \varphi_{ns}^*(\vec{r}_a) e^{-iE_n(t_b - t_a)/\hbar}$$

et l'action de la transformation de jauge (11.151) est

$$\varphi_{ns}(\vec{r}) \rightarrow \varphi'_{ns}(\vec{r}) = e^{-iq\Lambda(\vec{r})/\hbar} \varphi_{ns}(\vec{r})$$

Rappelons que si φ obéit à une équation de Schrödinger où figure le potentiel \vec{A} , alors φ' obéit à une équation de Schrödinger où \vec{A} est remplacé par le potentiel vecteur transformé de jauge \vec{A}' , et la loi de transformation (12.67) de K est bien celle que l'on déduit de la transformation des fonctions d'onde. La conclusion de cette étude de l'invariance de jauge est que la manipulation formelle (12.66) doit être correcte, ce que nous allons justifier.

Venons-en donc à la justification de (12.66). Afin de simplifier l'argument, revenons provisoirement au cas unidimensionnel et à la version euclidienne de l'intégrale de chemin. Nous avons à évaluer une intégrale du type

$$\int_{x_a}^{x_b} \frac{d\varphi}{dx} dx$$

le long de chemins browniens. Le résultat remarquable observé pour la première fois par Itô est que, en règle générale,

$$\int_{x_a}^{x_b} \frac{d\varphi}{dx} dx \neq \varphi(x_b) - \varphi(x_a)$$

Ce résultat surprenant vient de ce que pour un chemin brownien $(\Delta x)^2 \propto \Delta\tau$ si $\Delta\tau \rightarrow 0$. Choisissons un chemin en zig-zag de la figure 12.1 avec des points $x_0 = x_a, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n = x_b$ et partons de l'identité

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \sum_{j=0}^{n-1} [\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)] \quad (12.68)$$

Supposant la fonction φ suffisamment régulière, effectuons un développement de Taylor en puissances de $(x_{j+1} - x_j)$ de $[\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)]$ autour du point

$$u_{\lambda j} = x_j + \lambda(x_{j+1} - x_j)$$

avec $0 \leq \lambda \leq 1$. Ce développement permet de récrire la somme dans (12.68) à l'ordre $(x_{j+1} - x_j)^2$

$$\begin{aligned} \varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \sum_{j=0}^{n-1} \left[(x_{j+1} - x_j) \varphi'(u_{\lambda j}) + \frac{1}{2} (x_{j+1} - x_j)^2 (1 - 2\lambda) \varphi''(u_{\lambda j}) \right] \\ + O((x_{j+1} - x_j)^3) \end{aligned}$$

Mais nous avons vu que pour un chemin brownien

$$\langle (x_{j+1} - x_j)^2 \rangle = 2D(\tau_{j+1} - \tau_j) = 2D\varepsilon$$

et par conséquent, en prenant la somme sur les chemins browniens

$$\begin{aligned} \varphi(x_b) - \varphi(x_a) &= \sum_{j=0}^{n-1} [(x_{j+1} - x_j)\varphi'(u_{\lambda_j}) + D(1 - 2\lambda)(\tau_{j+1} - \tau_j)\varphi''(u_{\lambda_j})] \\ &\quad + O((x_{j+1} - x_j)^3) \end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant prendre la limite $(x_{j+1} - x_j) \rightarrow 0$, car les termes $O((x_{j+1} - x_j)^3)$ sont d'ordre $(\tau_{j+1} - \tau_j)^{3/2} \propto \varepsilon^{3/2}$ et ne contribuent pas dans cette limite. On obtient alors le résultat d'Itô

$$\varphi(x_b) - \varphi(x_a) = \int_{x_a}^{x_b} \frac{d\varphi}{dx} dx + D(1 - 2\lambda) \int_{\tau_a}^{\tau_b} \frac{d^2\varphi(x(\tau))}{dx^2} d\tau \quad (12.69)$$

Pour éliminer le second terme du membre de droite de (12.69), il faut choisir $\lambda = 1/2$, ou, en d'autres termes, il faut choisir dans le découpage de l'intégrale de chemin l'argument de φ au point $(x_{j+1} + x_j)/2$, au milieu de l'intervalle $[x_j, x_{j+1}]$. L'argument exposé ci-dessus permet également de comprendre pourquoi le calcul de l'intégrale de $V(x(\tau))$ dans l'exponentielle de (12.40) ne dépend pas du choix de λ : on peut choisir $V(x_j)$, $V(x_{j+1})$ ou $V[(x_j + x_{j+1})/2]$

$$\varepsilon \sum_j V(u_{\lambda_j}) = \varepsilon \sum_j V(x_j) + \varepsilon \lambda \sum_j (x_{j+1} - x_j) V'(x_j) + \dots$$

Comme $\varepsilon \lambda (x_{j+1} - x_j) \propto \varepsilon^{3/2}$, le deuxième terme de la somme ne contribue pas à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Les ambiguïtés ne peuvent se produire que pour des potentiels dépendant de la vitesse.

Revenant au propagateur en présence d'un champ magnétique, nous voyons que l'invariance de jauge ne sera satisfaite que si l'on peut écrire (12.66), c'est-à-dire si on choisit comme argument de \vec{A} le vecteur $(\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_j)/2$

$$\int_{t_a}^{t_b} \vec{A} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_j \varepsilon \vec{A} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} + \vec{r}_j}{2} \right) \cdot \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\varepsilon} \right) \quad (12.70)$$

Une démonstration plus directe de ce résultat s'inspire de de la méthode utilisée dans l'exercice 12.7.5 : comme l'algèbre est un peu fastidieuse, nous renvoyons le lecteur au livre de Schulman [1980], chapitre 4, où l'on montre que le choix effectué dans (12.70) est nécessaire si l'on veut que φ obéisse à l'équation de Schrödinger en présence d'un potentiel vecteur.

12.3.3 L'effet Aharonov-Bohm

En physique classique, on considère que les potentiels scalaire \bar{V} et vecteur \bar{A} sont des intermédiaires de calcul, certes extrêmement utiles, mais qu'en dernière analyse seuls les champs \vec{E} et \vec{B} ont une signification physique car l'action sur les particules chargées décrite par la loi de Lorentz (1.11) ne dépend que de \vec{E} et \vec{B} . Comme dans la section précédente, nous nous limitons pour simplifier à un champ magnétique indépendant du temps. Si une particule chargée traverse une région d'espace où $\vec{B} = 0$, elle ne subit aucun effet puisque la force de Lorentz est nulle. Comme nous allons le voir sur l'exemple de l'effet Aharonov-Bohm (A-B), la situation est plus subtile en physique quantique. Reprenons la discussion de l'expérience des fentes d'Young en la réalisant avec des particules chargées, et en disposant derrière les fentes un solénoïde très fin tel que \vec{B} s'annule dans toute région de l'espace où la probabilité de présence des particules est non nulle (figure 12.2). Cette région est fixée par le diagramme de diffraction des deux fentes. On pourrait s'attendre à ce que la présence du solénoïde n'ait aucun effet observable, en particulier il ne devrait pas affecter le diagramme d'interférences sur l'écran E . Nous allons montrer qu'il n'en est rien. Soit $\varphi_1(\vec{r}_b, t_b)$ et $\varphi_2(\vec{r}_b, t_b)$ les amplitudes de probabilité de trouver au temps t_b la particule au point \vec{r}_b de l'écran quand elle est passée par la fente 1 (φ_1) ou par la fente 2 (φ_2). En l'absence de champ magnétique, les amplitudes $\varphi_1(\vec{r}_b, t_b)$ et $\varphi_2(\vec{r}_b, t_b)$ peuvent être calculées à partir de (12.2) par une intégrale de chemin en fonction de l'amplitude de probabilité à la source $\varphi(\vec{r}_a, t_a)$

$$\varphi_i(\vec{r}_b, t_b) = \int d^3r_a \int_{a(i)}^b \mathcal{D}(\vec{r}(t)) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\vec{r}(t)) dt \right] \varphi(\vec{r}_a, t_a) \quad (12.71)$$

où le chemin i , $i = 1, 2$, passe par la fente (i). En présence du solénoïde, l'exponentielle dans (12.71) devient

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\vec{r}(t)) dt \right] \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \vec{A} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt \right]$$

et l'exponentielle originale est donc multipliée par le facteur dépendant du chemin (1 ou 2)

$$\exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{r}_a(i)}^{\vec{r}_b} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right] \quad (12.72)$$

Ce facteur est indépendant du temps, et par la suite nous supprimons la dépendance par rapport à t , qui ne joue aucun rôle ici, en supposant un flux continu de particules. L'amplitude de probabilité pour trouver la particule en

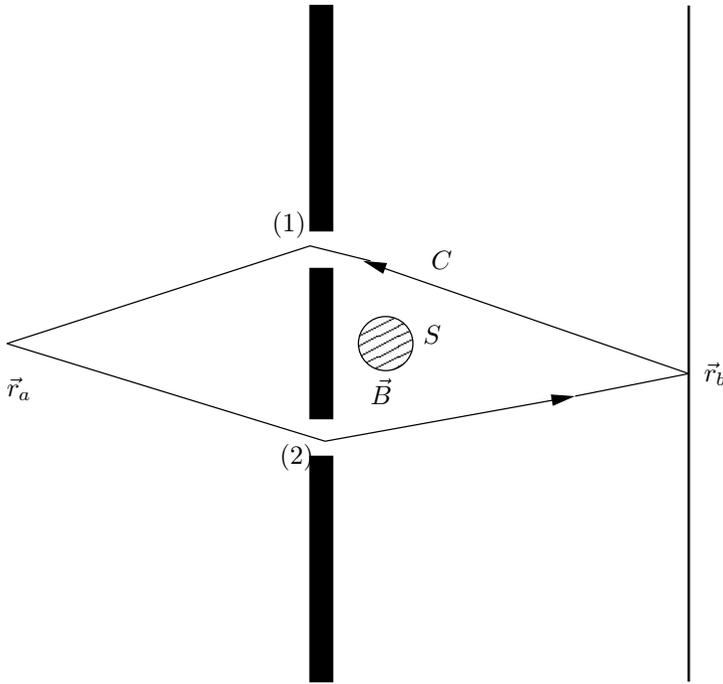


FIG. 12.2 – L’effet Bohm-Aharonov. La probabilité de présence des électrons est négligeable au voisinage du solénoïde S . Le champ magnétique \vec{B} est perpendiculaire au plan de la figure.

\vec{r}_b sur l’écran au temps t_b est

$$\begin{aligned} \varphi_1(\vec{r}_b) \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{r}_a(1)}^{\vec{r}_b} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right] + \varphi_2(\vec{r}_b) \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{r}_a(2)}^{\vec{r}_b} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right] = \\ \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{r}_a(1)}^{\vec{r}_b} \vec{A} \cdot d\vec{r} \right] \left(\varphi_1(\vec{r}_b) + \varphi_2(\vec{r}_b) \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} \right] \right) \end{aligned}$$

Le premier facteur de la seconde ligne est un facteur de phase global qui n’affecte pas le diagramme d’interférences. Le second facteur de phase est donné par une intégrale sur le contour fermé C formé par le chemin passant par la fente 1 et celui passant par la fente 2 (figure 12.2)

$$\int_2 d\vec{r}(\bullet) - \int_1 d\vec{r}(\bullet) = \oint_C d\vec{r}(\bullet)$$

L’argument de l’exponentielle en facteur de φ_2 est

$$\frac{iq}{\hbar} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{iq}{\hbar} \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} = \frac{iq\Phi}{\hbar} \tag{12.73}$$

où Φ est le flux du champ magnétique à travers le chemin fermé C , c'est-à-dire le flux du solénoïde, puisque \vec{B} est supposé négligeable le long des trajectoires suivies par les particules. Le diagramme d'interférences est donc déterminé par

$$\left| \varphi_1(\vec{r}_b) + e^{iq\Phi/\hbar} \varphi_2(\vec{r}_b) \right|^2$$

En un point fixé \vec{r}_b , le diagramme d'interférences varie sinusoidalement avec Φ , avec une période

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{q} = \frac{h}{q} \simeq 4 \times 10^{-15} \text{ Wb} \quad (12.74)$$

Si par exemple $\Phi = h/2q$, un maximum d'interférences en l'absence de champ est transformé en un minimum lorsque le solénoïde est présent. Cet effet du solénoïde sur le diagramme d'interférences est appelé *effet Aharonov-Bohm*.

Le passage de particules chargées dans une région où $\vec{B} = 0$, mais où $\vec{A} \neq 0$ produit donc des effets observables. Toutefois, l'effet est invariant de jauge, puisque la modification du diagramme d'interférences ne dépend que du flux du champ magnétique à travers C , et donc de \vec{B} . Si un des deux chemins pouvait être déformé dans l'autre sans rencontrer de région où $\vec{B} \neq 0$, aucun effet ne serait observable, même avec $\vec{A} \neq 0$ le long des trajectoires. Le facteur $\exp(iq\Phi/\hbar)$ est un exemple de *facteur de phase topologique*, lié au fait que la topologie de l'espace n'est pas simplement connexe.

On peut donner deux interprétations de l'effet A-B.

- (i) Le potentiel vecteur agit *localement* sur les particules chargées : l'argument de \vec{A} est la position \vec{r} de la particule, et on doit accorder une signification physique au potentiel vecteur.
- (ii) Comme l'effet est invariant de jauge et peut se calculer en fonction du seul champ \vec{B} , le potentiel est un intermédiaire commode, mais non indispensable si l'on admet que l'on peut écrire des interactions non locales entre les particules et le champ.

Le point de vue (i) a le mérite de la simplicité : les interactions sont écrites de façon locale. Mais dans le cadre strict de l'électromagnétisme, il n'y a pas d'argument décisif pour choisir entre le point de vue (i) plutôt que (ii). En revanche, le point de vue (i) s'impose dans le cas des théories de jauge non abéliennes (exercice 11.6.12), car dans ce cas même les champs ne sont pas invariants de jauge, et il n'y a aucune raison de se compliquer la vie avec des interactions non locales⁹.

⁹ Il existe aussi un effet A-B scalaire : voir par exemple Rauch et Werner [2000], chapitre 6.

12.4 L'approximation BKW

12.4.1 Forme asymptotique de la fonction d'onde

Dans cette section, nous allons exposer une méthode d'approximation qui s'applique lorsque l'on a affaire à une équation différentielle ordinaire, par exemple l'équation de Schrödinger à une dimension ou bien l'équation radiale obtenue après séparation des variables. La généralisation sera décrite très brièvement à la fin du § 12.4.4. L'équation de Schrödinger (9.67) indépendante du temps pour une particule d'énergie E dans un espace à une dimension et soumise à un potentiel $V(x)$ peut s'écrire

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2(x)\varphi(x) = 0 \quad (12.75)$$

si l'on définit $k^2(x)$ par

$$k^2(x) = \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \quad (12.76)$$

$k(x)$ est un vecteur d'onde local et $p(x)$ une impulsion locale. Ainsi que nous l'avons déjà remarqué (cf. (9.68) et (9.69)), $k(x)$ et $p(x)$ sont réels dans une région où $E > V(x)$, qui est la région classiquement permise, et imaginaires purs dans une région où $E < V(x)$. Écrivons $\varphi(x)$ sous la forme $\varphi(x) = \exp[i\Phi(x)]$. L'équation de Schrödinger (12.75) devient

$$-\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2 + i\left(\frac{d^2\Phi}{dx^2}\right) + k^2(x) = 0 \quad (12.77)$$

Examinons tout d'abord une région d'espace où $E > V(x)$, $k^2(x) > 0$. Si le potentiel $V(x)$ était indépendant de x , $V(x) = V$, nous aurions comme solution $\Phi(x) = \pm kx$, $k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$ et $d^2\Phi/dx^2 = 0$. Si $V(x)$ n'est pas constant, mais varie peu sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde locale $\lambda(x) = 2\pi/k(x)$, nous nous attendons à ce que $d^2\Phi/dx^2$ soit petit comparativement aux deux autres termes de (12.77). L'approximation reposant sur cette variation lente est appelée *approximation BKW* (Brillouin-Kramers-Wentzel). En première approximation on néglige $d^2\Phi/dx^2$ dans (12.77), et notant $\Phi = \Phi_0$ cette approximation

$$\frac{d\Phi_0}{dx} = \pm k(x) \quad \Phi_0(x) = \pm \int^x k(u)du \quad (12.78)$$

La condition de validité de cette approximation est $|\Phi''| \ll (\Phi')^2$, soit

$$\left|\frac{dk(x)}{dx}\right| \ll k^2(x)$$

ce qui s'écrit, compte tenu de l'expression (12.76) de k

$$\left| \frac{dk(x)}{dx} \right| = \frac{m}{\hbar^2} \left| \frac{dV}{dx} \right| \frac{1}{k(x)} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \lambda(x) \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll k^2(x)$$

La condition de validité de l'approximation peut aussi se mettre sous la forme

$$\lambda(x) \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll \frac{2\pi\hbar^2 k^2(x)}{m} = \frac{2\pi p^2(x)}{m} \quad (12.79)$$

En d'autres termes, la variation du potentiel sur une longueur d'onde doit être petite par rapport à l'énergie cinétique locale.

Pour obtenir l'approximation suivante, dont nous nous contenterons, on reporte

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} \simeq \frac{d^2\Phi_0}{dx^2} = \pm \frac{dk}{dx}$$

dans (12.77), avec pour résultat

$$\Phi'(x) = \pm \sqrt{k^2(x) + i\Phi''(x)} \simeq \sqrt{k^2(x) \pm ik'(x)}$$

et en développant la racine carrée

$$\Phi(x) \simeq \pm \int^x k(u) du + \frac{i}{2} \int^x \frac{k'(u)}{k(u)} du = \pm \int^x k(u) du + \frac{i}{2} \ln k(x)$$

Le résultat pour $\varphi(x)$ qui sera à la base de toute la discussion qui va suivre est finalement

$$\boxed{\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left[\pm i \int^x k(u) du \right]} \quad (12.80)$$

La probabilité de présence de la particule est proportionnelle à $1/k(x)$, ce qui se comprend ainsi : dans un mouvement classique entre deux points x_a et x_b , la probabilité de présence dans un intervalle Δx est inversement proportionnelle à la vitesse de la particule, et donc à $1/k(x)$.

Lorsque $E < V(x)$, la formule (12.80) est encore valable à condition de faire la substitution

$$k(x) \rightarrow i\kappa(x) \quad \kappa^2(x) = \frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2}$$

La déduction donnée ci-dessus de (12.80) perd toute validité lorsque $E \simeq V(x)$, et il nous faut examiner ce qui se passe près d'un point où $E = V(x)$, appelé *point de rebroussement*¹⁰, car c'est en un tel point que la particule classique rebrousse chemin : ce sont par exemple les points x_1 et x_2 de la figure 1.15. Supposons donc que $E = V(x)$ au point $x = 0$, et qu'en ce point la pente de $V(x)$ soit négative, de sorte que $k(x)$ est imaginaire pour $x < 0$ et

10. En anglais : *turning point*.

réel pour $x > 0$: la région permise classiquement correspond à $x > 0$. Pour $x < 0$, et suffisamment loin de $x = 0$, on peut écrire $\varphi(x)$ sous forme d'une combinaison linéaire des solutions indépendantes approchées de (12.75), avec des coefficients B_1 et B_2 ¹¹

$$x < 0 : \quad \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(B_1 \exp \left[\int_0^x \kappa(u) du \right] + B_2 \exp \left[- \int_0^x \kappa(u) du \right] \right) \quad (12.81)$$

Pour $x > 0$, et suffisamment loin de $x = 0$, la solution devient

$$x > 0 : \quad \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(A_1 \exp \left[i \int_0^x k(u) du \right] + A_2 \exp \left[-i \int_0^x k(u) du \right] \right) \quad (12.82)$$

Les solutions approchées de (12.81)-(12.82) de l'équation originale (12.75) ne sont pas valables au voisinage de $x = 0$, où l'approximation (12.79) n'est pas vérifiée. Ces solutions sont singulières en ce point, car elles présentent un point de branchement à $x = 0$, dû à la racine carrée et à l'exponentielle. *Ces singularités sont des artefacts de l'approximation, car la solution exacte $\varphi(x)$ n'est pas singulière en ce point.* Il doit être possible de raccorder les solutions approchées (12.81) et (12.82), et c'est ce raccordement qui va fixer les relations entre les coefficients (A_1, A_2) et (B_1, B_2) . Cependant, ce raccordement n'est pas évident en raison du phénomène de Stokes, que nous étudierons au § 12.4.3.

12.4.2 Formules de raccordement

En supposant que $[E - V(x)]$ s'annule linéairement en $x = 0$, nous allons utiliser une approximation linéaire au voisinage de ce point

$$E - V(x) = Kx \quad (12.83)$$

Le potentiel correspond à un champ de forces constant. L'équation de Schrödinger (12.75) devient au voisinage de $x = 0$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mK}{\hbar^2} x\varphi(x) = 0 \quad (12.84)$$

Introduisons la variable sans dimension t

$$t = \left(\frac{2mK}{\hbar^2} \right)^{1/3} x \quad (12.85)$$

L'équation (12.84) devient avec cette variable

$$\psi''(t) + t\psi(t) = 0 \quad \psi(t) = \varphi \left[\left(\frac{\hbar^2}{2mK} \right)^{1/3} x \right] \quad (12.86)$$

11. Il faut prendre garde au fait que l'argument de la première exponentielle dans (12.51) est négatif : le terme dominant est B_2 !

À ce point nous devons distinguer les régions $x > 0$ et $x < 0$. Nous allons nous limiter au cas $K > 0$, car les formules du cas $K < 0$ s'en déduisent facilement (exercice 12.7.7). Un théorème sur les équations différentielles nous assure que les solutions de (12.86) sont des fonctions analytiques de t . Plus généralement, on montre que si le potentiel $V(x)$ peut être prolongé à des valeurs complexes z , et si $V(z)$ est analytique, les solutions $\varphi(z)$ de l'équation de Schrödinger sont aussi des fonctions analytiques de z . Les solutions de (12.86) sont les fonctions d'Airy $\text{Ai}(-t)$ et $\text{Bi}(-t)$, dont on trouvera les propriétés dans Abramowitz et Stegun [1964], p. 446, ou dans Landau et Lifschitz [1966], appendice; voir également Ballentine [1998], chapitre 5¹². Elles peuvent s'exprimer en terme des fonctions de Bessel $J_{1/3}(z)$ et $J_{-1/3}(z)$, ce qui est utile pour déterminer leur comportement asymptotique. Le point important est l'expression de leur développement asymptotique pour $t \rightarrow +\infty$ ($x > 0$)

$$\text{Ai}(-t) \simeq \frac{t^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \quad (12.87)$$

$$\text{Bi}(-t) \simeq -\frac{t^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \quad (12.88)$$

et pour $t \rightarrow -\infty$ ($x < 0$)

$$\text{Ai}(-t) \simeq \frac{1}{2} \frac{|t|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} e^{-z} \quad (12.89)$$

$$\text{Bi}(-t) \simeq \frac{|t|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} e^z \quad (12.90)$$

La variable z est définie par

$$x > 0 \ (t > 0) : \quad z = \frac{2}{3} t^{3/2} = \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2mK} \right) k^3(x) = \int_0^z k(u) \, du \quad (12.91)$$

$$x < 0 \ (t < 0) : \quad z = \frac{2}{3} |t|^{3/2} = \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2mK} \right) \kappa^3(x) = - \int_0^z \kappa(u) \, du \quad (12.92)$$

La solution générale de (12.86) est une combinaison linéaire de $\text{Ai}(-t)$ et de $\text{Bi}(-t)$

$$\psi(t) = C_A \text{Ai}(-t) + C_B \text{Bi}(-t) \quad (12.93)$$

Il est essentiel d'observer que cette solution est valable *à la fois* dans la région $t < 0$ et dans la région $t > 0$: le point $t = 0$ n'est pas un point singulier de (12.93) car les fonctions $\text{Ai}(-t)$ et $\text{Bi}(-t)$ sont des fonctions analytiques de t . Un examen superficiel des équations (12.81), (12.82) et (12.93) semble montrer que l'on peut relier (A_1, A_2) à (B_1, B_2) en exprimant ces coefficients

12. Les fonctions d'Airy sont définies de façon conventionnelle comme les solutions de l'équation $\psi''(t) - t\psi(t) = 0$, d'où le signe moins de l'argument de ces fonctions dans (12.87)-(12.90).

en fonction de C_A et C_B , compte tenu du développement asymptotique des fonctions d'Airy. En fait il n'en est rien, car si $C_B \neq 0$, le comportement asymptotique de la fonction Ai pour $x < 0$ est complètement noyé dans le bruit de fond des corrections en $z^{-n} \exp z$ au comportement asymptotique de Bi. Le seul cas où une identification est possible est celui où $C_B = 0$. Les équations (12.87) et (12.89) conduisent alors à la formule de raccordement

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\int_0^x \kappa(u) du \right] \implies \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_0^x k(u) du - \frac{\pi}{4} \right] \quad (12.94)$$

Il faut souligner que la flèche dans (12.94) ne fonctionne que dans le sens indiqué. Il est facile de montrer une formule analogue lorsque $K < 0$ (exercice 12.7.7)

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[- \int_0^x \kappa(u) du \right] \implies \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_0^x k(u) du + \frac{\pi}{4} \right] \quad (12.95)$$

12.4.3 Phénomène de Stokes

Le comportement asymptotique (12.87)-(12.90) des fonctions Ai et Bi est une conséquence du *phénomène de Stokes* que l'on met en évidence en prolongeant la formule (12.82) dans le plan complexe $z = r \exp(i\theta)$. Concentrons-nous en premier lieu sur les exposants : le premier exposant devient

$$\begin{aligned} i \int_0^z k(u) du &= \frac{2}{3} i z^{3/2} = \frac{2}{3} i r^{3/2} e^{3i\theta/2} \\ &= \frac{2}{3} r^{3/2} \left[\cos \left(\frac{3\theta}{2} + \frac{\pi}{2} \right) + i \sin \left(\frac{3\theta}{2} + \frac{\pi}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (12.96)$$

Le deuxième exposant s'obtient en changeant $\pi/2$ en $-\pi/2$ dans la seconde ligne de (12.96). Les deux exposants sont réels pour $\theta = \pi/3$, $\theta = \pi$ et $\theta = 5\pi/3$. Les trois demi-droites correspondantes tracées à partir de l'origine dans le plan complexe sont appelées *lignes de Stokes* (figure 12.3). Les deux exposants sont imaginaires purs pour $\theta = 0$, $\theta = 2\pi/3$ et $\theta = 4\pi/3$, et les trois demi-droites correspondantes sont appelées *lignes anti-Stokes*. Sur les lignes de Stokes, une des deux exponentielles est dominante, car l'un des exposants est positif et l'autre négatif ; rappelons que nous nous intéressons à une situation où $\hbar \rightarrow 0$ où les exposants sont grands en valeur absolue.

Le deuxième facteur à prendre en compte dans l'expression asymptotique de la fonction d'onde est

$$k^{-1/2}(z) = z^{-1/4} = r^{-1/4} e^{-i\theta/4}$$

Ce facteur impose une coupure dans le plan complexe. La position de cette coupure est arbitraire, et nous la choisirons entre les deux lignes de Stokes à

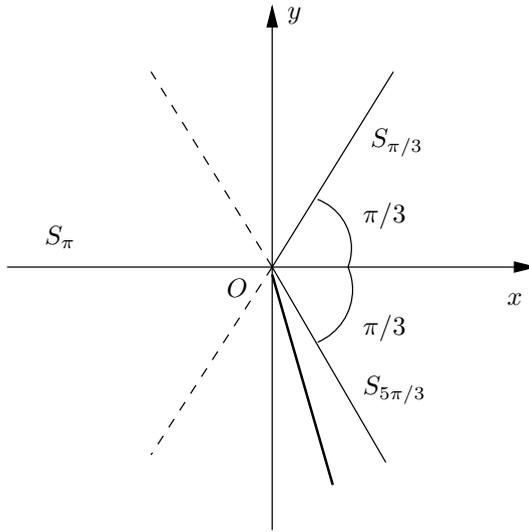


FIG. 12.3 – Lignes de Stokes $S_{\pi/3}$, S_{π} et $S_{5\pi/3}$ (trait plein), anti-Stokes (tirets) et coupure (trait gras).

$\theta = \pi$ et $\theta = 5\pi/3$ (figure 12.3). Si nous récrivons (12.82) sous la forme

$$\begin{aligned} \varphi(z) &= A_+ \psi_+(z) + A_- \psi_-(z) \\ \psi_{\pm}(z) &= k^{-1/2}(z) \exp \left[\pm i \int_0^z k(u) du \right] \end{aligned} \quad (12.97)$$

nous voyons que ψ_- domine sur la ligne de Stokes $\theta = \pi/3$ et ψ_+ sur les deux autres lignes. La détermination du terme dominant dépend de la position de la coupure : si celle-ci était placée entre $\theta = 5\pi/3$ et $\theta = 0$, c'est ψ_- qui dominerait sur la ligne de Stokes $\theta = 5\pi/3$. Lorsque l'on encercle le point $z = 0$ par un contour décrit dans le sens trigonométrique, z acquiert un facteur $\exp(-2i\pi)$ au passage de la coupure et par conséquent

$$k^{-1/2}(z) \rightarrow ik^{-1/2}(z)$$

D'autre part, en ce qui concerne l'exponentielle

$$\int_0^z k(u) du \rightarrow e^{-3i\pi} \int_0^z k(u) du = - \int_0^z k(u) du$$

Ces deux résultats impliquent qu'après traversée de la coupure, les fonctions ψ_+ et ψ_- s'échangent

$$\psi_+(z) \rightarrow i\psi_-(z) \quad \psi_-(z) \rightarrow i\psi_+(z)$$

Il faut donc que les coefficients A_+ et A_- de (12.97) subissent un changement compensateur pour assurer la continuité de φ

$$A_+ \rightarrow -iA_- \quad A_- \rightarrow -iA_+ \tag{12.98}$$

Sur chaque ligne de Stokes, le coefficient de l'exponentielle sous-dominante est indéterminé, et il subit un changement proportionnel à celui du terme dominant. Par exemple, au voisinage de la ligne de Stokes $\theta = \pi/3$, et dans un intervalle $\pi/3 - \varepsilon \lesssim \theta \lesssim \pi/3 + \varepsilon$, A_1 et A_2 (12.82) changent suivant

$$A_1 \rightarrow A_1 + \alpha A_2 \quad A_2 \rightarrow A_2$$

où le coefficient α reste à déterminer. Sur la ligne de Stokes $\theta = \pi$, le premier terme de (12.82) est dominant et

$$A_1 + \alpha A_2 \rightarrow A_1 + \alpha A_2 \quad A_2 \rightarrow A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2)$$

Sur la ligne de Stokes $\theta = 5\pi/3$, le premier terme de (12.82) est à nouveau dominant. Mais comme la coupure a été traversée, il faut prendre en compte (12.98) et

$$\begin{aligned} A_1 + \alpha A_2 &\rightarrow -i[A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2)] \\ A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2) &\rightarrow -i[A_1 + \alpha A_2 + \gamma(A_2 + \beta(A_1 + \alpha A_2))] \end{aligned} \tag{12.99}$$

L'analyticité de $\varphi(z)$ implique que les coefficients A_1 et A_2 s'identifient respectivement à la première et à la seconde ligne de (12.99), ce qui permet de déterminer les coefficients α , β et γ

$$\alpha = \beta = \gamma = i \tag{12.100}$$

On en déduit immédiatement la formule de raccordement (12.94). En effet, si l'on veut que $\varphi(z)$ soit exponentiellement décroissant dans la région $x < 0$ (sur la ligne de Stokes $\theta = \pi$), le coefficient de ψ_+ doit s'annuler : $A_1 + iA_2 = 0$, soit

$$A_1 = \frac{1}{2} B_1 e^{-i\pi/4} \quad A_2 = \frac{1}{2} B_1 e^{i\pi/4} \tag{12.101}$$

où B_1 est défini en (12.81).

12.4.4 États liés

Cherchons les états liés d'un puits de potentiel avec un minimum unique (figure 12.4) à l'approximation BKW, en appelant a et b les abscisses des points de rebroussement. Nous distinguons trois régions de l'axe des x : I : $x < a$; II : $a < x < b$; III : $x > b$. Pour $x \rightarrow -\infty$, la fonction d'onde doit être de la forme

$$\varphi(x) = \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\int_a^x \kappa(u) du \right] \tag{12.102}$$

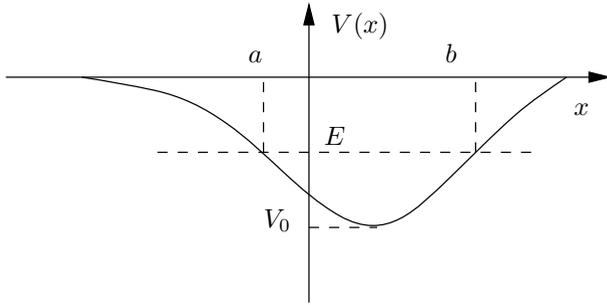


FIG. 12.4 – États liés d'un puits de potentiel.

tandis que dans la région III

$$\varphi(x) = \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[- \int_b^x \kappa(u) du \right] \quad (12.103)$$

Dans la région intermédiaire II, la fonction d'onde est d'après (12.94) (raccordement à $x = a$)

$$\frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_0^x k(u) du - \frac{\pi}{4} \right]$$

mais d'après (12.95) elle prend aussi la forme (raccordement à $x = b$)

$$\frac{2B}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_0^x k(u) du + \frac{\pi}{4} \right]$$

Écrivons la première forme de $\varphi(x)$ en utilisant

$$\int_a^x k(u) du = \int_a^b k(u) du + \int_b^x k(u) du = \Psi + I(x)$$

où nous avons défini Ψ par

$$\Psi = \int_a^b k(u) du \quad (12.104)$$

Les deux formes de $\varphi(x)$ dans la région II ne sont compatibles que si

$$e^{2i\Psi} = -1 \quad B = -iAe^{i\Psi} \quad (12.105)$$

La première de ces équations donne la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$\Psi = \int_a^b k(u) du = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (12.106)$$

et la seconde $A = (-1)^n B$. On reconnaît dans $\hbar\Psi$ l'action classique du mouvement sur une demi-période dans le puits. L'équation (12.103) donne les niveaux d'énergie du puits de potentiel à l'approximation BKW. Le facteur $1/2$ ne devrait pas *a priori* être pertinent, car la règle de Bohr-Sommerfeld n'est en principe valable que pour des actions grandes par rapport à \hbar , c'est-à-dire pour $n \gg 1$: il faut donc que le puits ait un nombre d'états liés suffisamment grand. Toutefois, on observe (1) que cette règle devient de plus en plus précise quand $S_{cl}/\hbar \rightarrow \infty$ et que le facteur $1/2$ est crucial pour l'accord avec les données expérimentales ou numériques (2) qu'appliquée à l'oscillateur harmonique elle donne *exactement* les niveaux d'énergie (mais c'est un accident). En effet, le potentiel est $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ et les points de rebroussement sont $x_{\pm} = \pm\sqrt{2E/m\omega^2}$, ce qui donne pour l'angle Ψ

$$\Psi = \int_{x_-}^{x_+} \sqrt{2m - m^2\omega^2 x^2} dx = \frac{E\pi}{\omega}$$

d'où les niveaux d'énergie $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

La procédure de quantification semi-classique obtenue en (12.106) s'exprime en fonction de l'action classique S_{cl} correspondant à un aller-retour de la particule

$$\frac{1}{\hbar} S_{cl} = \frac{1}{\hbar} \oint p dx = 2\pi \left(n + \frac{\nu}{4} \right)$$

où ν est l'indice de Maslov, et $\nu = 2$ dans (12.106). Cette procédure de quantification peut se généraliser aux systèmes intégrables : pour un tel système, si le nombre de degrés de liberté est d , les trajectoires sont situées sur un tore à d dimensions dans l'espace de phase à $2d$ dimensions $\{x_i, p_i\}$, $i = 1, \dots, d$. Chaque boucle fermée tracée sur le tore donne lieu à une condition de quantification individualisée avec des indices de Maslov ν_i

$$\frac{1}{\hbar} \oint p_i dx_i = 2\pi \left(n_i + \frac{\nu_i}{4} \right)$$

et les niveaux d'énergie sont caractérisés par les entiers n_1, \dots, n_d et sont donnés par $H(n_1, \dots, n_d)$, où H est le hamiltonien.

Pour des systèmes non intégrables, la quantification à la Bohr-Sommerfeld n'est plus possible en l'absence de tores invariants. Néanmoins, grâce en particulier aux travaux de Gutzwiller, on a pu généraliser l'approximation BKW aux systèmes non intégrables en partant d'une approximation semi-classique pour l'intégrale de chemin. Ainsi que nous l'avons déjà noté en introduction à ce chapitre, ces travaux sont techniquement complexes et nous renvoyons le lecteur aux livres cités en bibliographie, en nous contentant d'écrire la formule d'approximation semi-classique du propagateur dans la région permise classiquement

$$K_{scl}(x_b, x_a; t) = \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \right)^{d/2} \sum_r |D_r(x_b, x_a)|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_r(x_b, x_a) - \frac{i\nu_r\pi}{2} \right)$$

où D_r est le déterminant de van Vleck

$$D_r(x_b, x_a) = \det \left(-\frac{\partial^2 S_r(x_b, x_a)}{\partial x_{ai} \partial x_{bj}} \right)$$

et $S_r(x_b, x_a)$ est l'action classique pour aller du point x_a au point x_b en un temps t ; la somme sur r porte sur toutes les trajectoires possibles, et les ν_r sont les indices de Maslov provenant des points de rebroussement en dimension un et plus généralement des caustiques. Un des résultats fondamentaux de ce type d'approche est la formule de trace de Gutzwiller (Gutzwiller [1990], chapitre 17 ou Stöckman [1999], chapitre 7) qui donne la densité de niveaux en fonction des propriétés des orbites périodiques.

12.4.5 Effet tunnel

Considérons maintenant un potentiel $V(x)$ s'annulant pour $x \rightarrow \pm\infty$, possédant un maximum unique en x_0 , $V(x_0) = V_0$ (figure 12.5), et une particule d'énergie $0 < E < V_0$. La trajectoire classique possède deux points de rebroussement a et b . Supposons que la particule arrive de la région $x \rightarrow -\infty$ en se propageant vers la droite. Une particule classique serait renvoyée en $x = a$ par la barrière de potentiel, mais une particule quantique possède une probabilité non nulle de franchir la barrière. En effet, la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région $a \leq x \leq b$, et il est possible de la raccorder à une onde plane dans la région $x > b$. Le phénomène est analogue à celui d'une onde évanescente en optique : lorsqu'une onde lumineuse arrive d'un milieu d'indice n_1 dans un milieu d'indice n_2 , avec $n_2 < n_1$, il y a réflexion totale pour des angles d'incidence plus grands que l'angle critique i_0 , donné par $\sin i_0 = n_2/n_1$. Si le milieu d'indice n_2 est une lame suffisamment mince, la réflexion n'est pas totale, et il existe une petite probabilité de transmission car l'onde lumineuse ne s'annule pas complètement dans la lame : elle décroît exponentiellement, et elle peut donc se raccorder à une onde progressive dans le milieu d'indice n_1 .

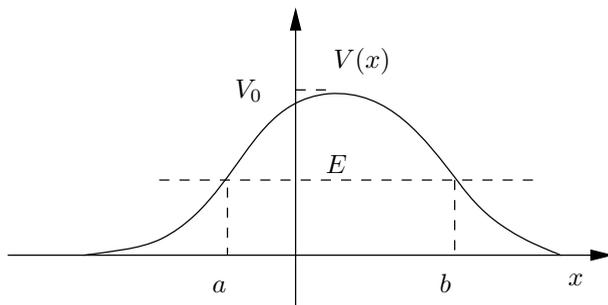


FIG. 12.5 – Barrière de potentiel.

Les régions classiquement permises sont $x < a$ et $x > b$. Dans la région $x > b$, la fonction d'onde est donnée par (12.82)

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(A_1 \exp \left[i \int_b^x k(u) du \right] + A_2 \exp \left[-i \int_b^x k(u) du \right] \right)$$

et dans la région $x < a$ par

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(C_1 \exp \left[i \int_a^x k(u) du \right] + C_2 \exp \left[-i \int_a^x k(u) du \right] \right)$$

Dans cette équation, le premier terme C_1 représente une onde incidente se propageant vers la droite et arrivant sur la barrière, et le deuxième terme C_2 une onde réfléchiée. Pour relier le couple (A_1, A_2) au couple (C_1, C_2) , on procède comme au § 12.4.3. Il existe trois lignes de Stokes partant du point $x = a$ et trois lignes de Stokes partant de $x = b$; le segment de droite qui joint $x = a$ à $x = b$ est une ligne de Stokes commune aux deux points. Deux coupures partent de ces deux points. On trace un contour encerclant l'ensemble des deux points en écrivant la loi de transformation des coefficients chaque fois que l'on traverse une ligne de Stokes. Les différents coefficients analogues de α, β, γ du § 12.4.3 sont déterminés en exigeant la continuité de la fonction d'onde après un tour complet. Le calcul est fastidieux, et le lecteur intéressé pourra consulter Child [1991], appendice A. Le résultat peut s'écrire sous forme matricielle¹³

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + e^{2\Psi})^{1/2} e^{i\phi} & ie^\Psi \\ -ie^\Psi & (1 + e^{2\Psi})^{1/2} e^{-i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (12.107)$$

avec

$$\Psi = \int_a^b \kappa(u) du = -\pi\delta \quad (12.108)$$

La phase ϕ qui intervient dans (12.107) vaut

$$\phi = \arg \Gamma \left(\frac{1}{2} + i\delta \right) - \delta \ln |\delta| + \delta$$

où Γ est la fonction factorielle. Pour appliquer (12.107) à l'effet tunnel où il existe seulement une onde se propageant vers la droite dans la région $x > b$, on choisit $A_2 = 0$. Comme la normalisation de l'onde incidente dans la région $x < a$ est arbitraire, on peut prendre $C_1 = 1$, ce qui donne alors

$$C_2 = -ie^{-i\phi} e^\Psi (1 + e^{2\Psi})^{-1/2}$$

et

$$A_1 = e^{-i\phi} (1 + e^{2\Psi})^{-1/2}$$

13. En fait la phase ϕ n'est pas fixée par la procédure, et il est nécessaire de recourir à un argument indépendant. Cependant, les coefficients de réflexion et de transmission sont indépendants de ϕ .

Ces équations donnent le coefficient de réflexion R

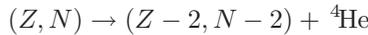
$$R = |C_2|^2 = \frac{1}{(1 + e^{-2\Psi})}$$

et le coefficient de transmission T à travers la barrière

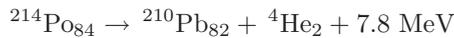
$$T = |A_1|^2 = \frac{1}{(1 + e^{2\Psi})} \simeq e^{-2\Psi} = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[E - V(x)]} dx \right] \quad (12.109)$$

On remarque que la somme du coefficient de transmission et du coefficient de réflexion est égale à l'unité, $T + R = 1$.

L'effet tunnel a de nombreuses applications en physique quantique. Nous nous contenterons d'en examiner deux : la radioactivité α et le microscope à effet tunnel. La radioactivité α est la désintégration d'un noyau avec émission d'une particule α , c'est-à-dire un noyau d' ${}^4\text{He}$. En appelant Z et N les nombres de protons et de neutrons dans le noyau initial ($A = Z + N$) (en général $Z \gtrsim 80$), la réaction nucléaire de désintégration α s'écrit



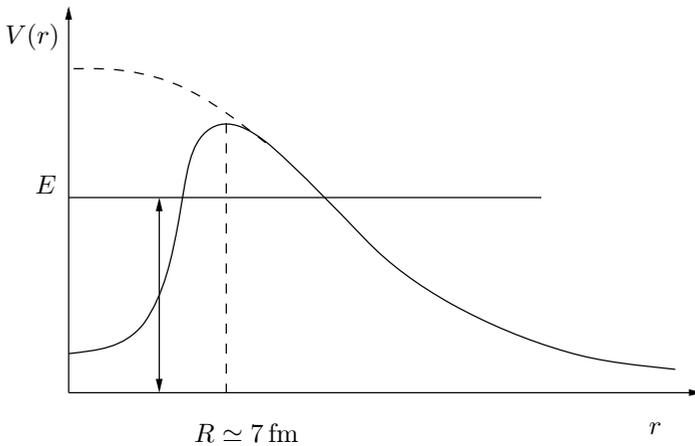
Un exemple est la désintégration du polonium en plomb



Dans une théorie approchée de la radioactivité α , on admet que la particule α préexiste dans le noyau initial et on se ramène pour simplifier au cas à une dimension. Si $R \simeq 1.2 \times A^{1/3} \simeq 7 \text{ fm}$ est le rayon du noyau, la particule α sera soumise au potentiel nucléaire et au potentiel coulombien répulsif entre le noyau d' ${}^4\text{He}$ de charge 2 (en unités de la charge du proton) et le noyau final de charge $(Z - 2)$ en supposant la distribution de charge à symétrie sphérique. Si r est la distance entre le noyau d'hélium et le noyau final, nous aurons pour $r > R$

$$V_{\text{Cb}}(r) = \frac{2(Z - 2)e^2}{r^2}$$

Lorsque $r < R$ les forces nucléaires attractives l'emportent largement sur les forces coulombiennes que l'on peut alors négliger. On aboutit ainsi à un potentiel représenté schématiquement sur la figure 12.6. Il existe donc une barrière de potentiel qui empêcherait la particule α de sortir du noyau si son mouvement était régi par la physique classique. C'est l'effet tunnel qui permet à la particule α de sortir du noyau. Le raisonnement précédent permet en théorie d'estimer la vie moyenne du noyau initial, mais les approximations que nous avons faites sont très grossières et l'effet tunnel très sensible aux détails : bien que la physique sous-jacente soit indubitablement correcte, il ne faut pas s'attendre à des résultats en accord quantitatif avec l'expérience. Le phénomène

FIG. 12.6 – Barrière de potentiel de la radioactivité α .

inverse de la désintégration radioactive intervient dans les réactions de fusion, par exemple la réaction déjà mentionnée au § 1.1.2



qui fait également appel à l'effet tunnel et est examinée à l'exercice 13.5.1, où l'on donne un exemple d'évaluation de (12.109).

Une application très importante de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel. Dans un microscope à effet tunnel, on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur (figure 12.7). Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon, ce qui produit un courant *macroscopique*, dépendant de façon très sensible de la distance entre la pointe et l'échantillon, en raison de la dépendance exponentielle (12.109) par rapport à la distance. Cela permet de réaliser une cartographie très précise de la surface de l'échantillon, avec une résolution de $\simeq 0.01 \text{ nm}$. Une extension de cette technique permet de manipuler des atomes et des molécules déposées sur un substrat (figure 12.8).

12.5 Mécanique quantique dans l'espace de phase

12.5.1 Conditions pour une représentation dans l'espace de phase

En physique statistique, étant donné un système classique décrit par ses coordonnées canoniques $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n) \equiv (q, p)$, on définit une densité de probabilité $\rho_{\text{cl}}(q, p; t)$ qui donne la probabilité $\rho_{\text{cl}}(q, p; t) dq dp$ de trouver

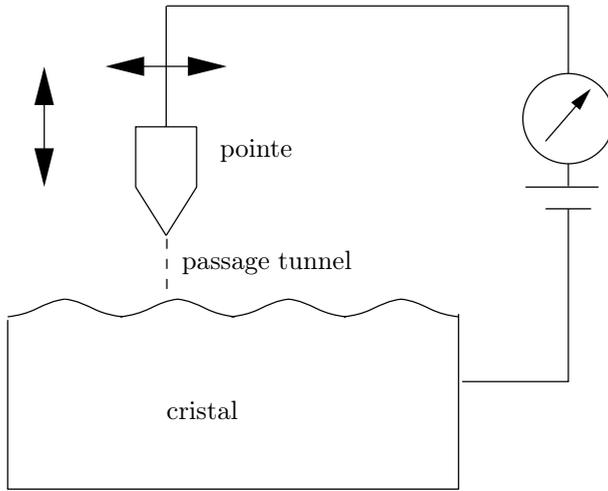


FIG. 12.7 – Principe du microscope à effet tunnel. On déplace une pointe au voisinage de la surface d'un cristal et on ajuste la distance de façon que le courant soit constant. Ceci donne une cartographie de la distribution électronique sur la surface.

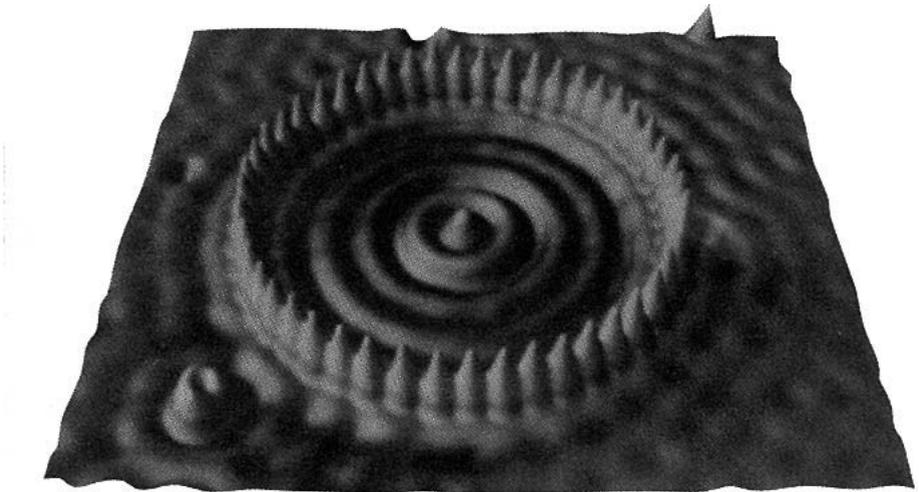


FIG. 12.8 – Dépôt d'atomes par microscope à effet tunnel. Des atomes de fer (les pics) sont disposés en cercle sur un substrat de cuivre et forment des états résonnants électroniques (les vagues) sur la surface du cuivre. D'après un cliché IBM.

au temps t le système dans un volume infinitésimal $dqdp$ de l'espace de phase autour du point (q, p) . Cette densité de probabilité doit être positive : $\rho_{\text{cl}}(q, p; t) \geq 0$ et normalisée à l'unité

$$\int \rho_{\text{cl}}(q, p; t) dq dp = 1 \quad (12.110)$$

Les intégrales sur p et q donnent les densités de probabilité $\rho_{\text{cl}}(q; t)$ et $\rho_{\text{cl}}(p; t)$

$$\begin{aligned} \rho_{\text{cl}}(q; t) &= \int \rho_{\text{cl}}(q, p; t) dp \\ \rho_{\text{cl}}(p; t) &= \int \rho_{\text{cl}}(q, p; t) dq \end{aligned} \quad (12.111)$$

Il ne suffit évidemment pas de connaître $\rho_{\text{cl}}(q; t)$ et $\rho_{\text{cl}}(p; t)$, car c'est la distribution jointe $\rho_{\text{cl}}(q, p; t)$ qui décrit les corrélations entre q et p . Un exemple de densité ρ_{cl} est donné par la distribution canonique d'équilibre (indépendante du temps)

$$\rho_{\text{cl}}(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_{\text{cl}}(q, p)} \quad Z = \int dq dp e^{-\beta H_{\text{cl}}(q, p)}$$

où H_{cl} est le hamiltonien classique, $H_{\text{cl}} = K + V$, et la distribution de probabilité se factorise dans ce cas particulier

$$\rho_{\text{cl}}(q, p) = \rho_{\text{cl}}(q) \rho_{\text{cl}}(p)$$

Si une propriété physique A_{cl} est fonction des coordonnées q et p , la valeur moyenne de A_{cl} est

$$\langle A_{\text{cl}} \rangle(t) = \int dq dp \rho_{\text{cl}}(q, p; t) A_{\text{cl}}(q, p) \quad (12.112)$$

On peut se demander s'il existe pour un système quantique décrit par un opérateur statistique $\rho(t)$ l'analogue d'une distribution de probabilité dans l'espace de phase, $\rho_Q(q, p; t)$. En fait il existe une infinité de solutions $\rho_Q(q, p; t)$ obéissant à (12.110) et (12.111), mais elles dépendent de la préparation de l'opérateur statistique (section 6.2.4), et pas uniquement de $\rho(t)$, sauf bien entendu si $\rho(t)$ représente un cas pur, puisque dans ce cas cette préparation de $\rho(t)$ est unique. Il n'existe pas de densité de probabilité $\rho_Q(q, p; t)$ ayant toutes les propriétés souhaitées, et la fonction la plus utile en pratique est la *distribution de Wigner* $\rho_W(q, p; t) \equiv w(q, p; t)$, aussi appelée *représentation de Wigner* (de l'opérateur statistique) qui obéit à (12.110) et (12.111), mais n'est pas en général uniformément positive : à strictement parler, on ne peut pas l'interpréter comme une distribution de probabilité. Une autre distribution utile est la distribution de Husimi $\rho_H(q, p; t)$, qui est positive mais n'obéit pas à (12.111). Nous traiterons uniquement le cas de la distribution de Wigner et renvoyons le lecteur aux références pour celle de Husimi.

12.5.2 La distribution de Wigner

Revenons au cas simple d'une particule quantique se déplaçant sur l'axe Ox , $q \rightarrow x, p \rightarrow p$, la généralisation à un ensemble de coordonnées (q, p) étant évidente. Soit $\rho(t)$ l'opérateur statistique de la particule

$$\rho(t) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(t)\rangle \langle \varphi_{\alpha}(t)| \quad (12.113)$$

où les vecteurs $|\varphi_{\alpha}\rangle$ sont normalisés, $\langle \varphi_{\alpha} | \varphi_{\alpha} \rangle = 1$, mais pas nécessairement orthogonaux. Les éléments diagonaux dans la représentation x , $\langle x | \rho(t) | x \rangle$ donnent la densité de probabilité de présence en position ($\varphi_{\alpha}(x; t) = \langle x | \varphi_{\alpha}(t) \rangle$)

$$\langle x | \rho(t) | x \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(x; t)|^2 \quad (12.114)$$

étant donné que $|\varphi_{\alpha}(x; t)|^2$ est la probabilité de présence dans l'état $|\varphi_{\alpha}(t)\rangle$. La distribution de probabilité en impulsion est bien sûr donnée par les éléments de matrice diagonaux de $\rho(t)$ dans la représentation p , $\langle p | \rho(t) | p \rangle$

$$\langle p | \rho(t) | p \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\tilde{\varphi}_{\alpha}(p; t)|^2 \quad (12.115)$$

où $\tilde{\varphi}_{\alpha}(p; t)$ est la transformée de Fourier de $\varphi_{\alpha}(x; t)$. Ces éléments de matrice diagonaux sont manifestement positifs

$$\langle x | \rho(t) | x \rangle \geq 0 \quad \langle p | \rho(t) | p \rangle \geq 0$$

et peuvent être interprétés comme des densités de probabilité de position ou d'impulsion, ce qui généralise les résultats de la section 9.1.

La *distribution de Wigner* $w(x, p; t)$ est définie par

$$w(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \rho(t) | x - \frac{y}{2} \rangle dy \quad (12.116)$$

Sous cette forme, la symétrie entre x et p ne saute pas aux yeux, mais il est facile de la retrouver en écrivant (noter que k est une impulsion)

$$|x - \frac{y}{2}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk |k\rangle \langle k | x - \frac{y}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-ik(x-y/2)/\hbar} |q\rangle$$

et une formule analogue pour $\langle x + y/2 |$. La distribution $w(x, p; t)$ se transforme en

$$w(x, p; t) = \int \frac{dk dk'}{(2\pi\hbar)^2} e^{ik'(x+y/2)/\hbar} e^{-ik(x-y/2)/\hbar} e^{-ipy/\hbar} \langle k' | \rho(t) | k \rangle$$

L'intégrale sur y donne un facteur $2\pi\hbar\delta[p - (k+k')/2]$, ce qui permet d'intégrer sur k'

$$w(x, p; t) = \frac{2}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{2i(p-k)x/\hbar} \langle 2p - k | \rho(t) | k \rangle$$

Un changement de variable $p - k = z/2$ donne la forme symétrique de (12.116) dans l'échange ($x \leftrightarrow p$)

$$w(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixz/\hbar} \langle p + \frac{z}{2} | \rho(t) | p - \frac{z}{2} \rangle dz \quad (12.117)$$

Il est immédiat de vérifier la validité de (12.111), par exemple

$$\int dp w(x, p; t) = \int dy \delta(y) \langle x + \frac{y}{2} | \rho(t) | x - \frac{y}{2} \rangle = \langle x | \rho(t) | x \rangle \quad (12.118)$$

L'hermiticité de ρ , $\rho = \rho^\dagger$, assure que w est réel, mais ne garantit en rien sa positivité, tandis que $\text{Tr}\rho = 1$ assure la normalisation

$$\int dx dp w(x, p; t) = 1$$

On définit la représentation de Wigner d'une propriété physique A (supposée indépendante du temps pour simplifier) par analogie avec (12.116)

$$A(x, p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | A | x - \frac{y}{2} \rangle dy \quad (12.119)$$

Cette expression permet d'évaluer la valeur moyenne de A , $\langle A \rangle(t)$ dans l'état $\rho(t)$, en partant de

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(t) A] = \int dx dx' \langle x | \rho(t) | x' \rangle \langle x' | A | x \rangle$$

On exprime $\langle x | \rho(t) | x' \rangle$ grâce à la transformée de Fourier inverse de (12.116)

$$\langle x + \frac{y}{2} | \rho(t) | x - \frac{y}{2} \rangle = \int dp e^{ipy/\hbar} w(x, p; t)$$

et on procède de même pour $\langle x' | A | x \rangle$. On obtient finalement

$$\langle A \rangle(t) = \int dx dp w(x, p; t) A(x, p) \quad (12.120)$$

Cette formule rappelle bien évidemment celle de l'espace de phase classique (12.112), et c'est cette expression qui donne à la représentation de Wigner son intérêt particulier. Toutefois, il ne faut pas pousser l'analogie trop

loin et garder à l'esprit le fait que w n'est pas uniformément positif. Le carré de w vérifie une inégalité intéressante (exercice 12.7.8)

$$\int dx dp w^2(x, p; t) \leq \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (12.121)$$

qui montre que w ne peut pas être trop piquée.

À partir de l'équation d'évolution (6.51) de l'opérateur statistique, on peut obtenir l'évolution temporelle de la distribution de Wigner. Celle-ci prend la forme peu intuitive (exercice 12.7.9)

$$\begin{aligned} \partial_t w(x, p; t) = & -\frac{p}{m} \partial_x w(x, p; t) \\ & + \frac{i}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \rho(t) | x - \frac{y}{2} \rangle \left[V\left(x - \frac{y}{2}\right) - V\left(x + \frac{y}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (12.122)$$

Le résultat se simplifie dans le cas de l'oscillateur harmonique

$$V\left(x - \frac{y}{2}\right) - V\left(x + \frac{y}{2}\right) = -m\omega^2 xy$$

et l'on trouve dans ce cas l'équation de Liouville exprimant la conservation de la probabilité

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial w}{\partial x} + m\omega^2 x \frac{\partial w}{\partial p} \quad (12.123)$$

12.5.3 Distribution de Wigner pour les états purs

Lorsque ρ représente un état pur $\varphi(x, t)$, la distribution de Wigner est

$$w_{\text{pur}}(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \varphi\left(x + \frac{y}{2}; t\right) \varphi^*\left(x - \frac{y}{2}; t\right) e^{-ipy/\hbar} dy \quad (12.124)$$

et l'inégalité (12.121) se transforme en l'égalité

$$\int dx dp w_{\text{pur}}^2(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (12.125)$$

que l'on montre à partir de $\text{Tr} \rho^2 = 1$ (exercice 12.7.8).

Donnons enfin deux exemples de distribution de Wigner pour des états purs. Le premier exemple est celui du paquet d'ondes gaussien

$$\varphi(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (12.126)$$

Un calcul classique de transformée de Fourier de gaussienne donne

$$w(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2}\right) \quad (12.127)$$

Dans ce cas la distribution de Wigner est partout positive, et on peut montrer que la distribution de Wigner est uniformément positive si et seulement si c'est celle d'un paquet d'ondes gaussien. Un exemple plus intéressant est celui de la superposition de deux paquets d'onde gaussiens

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \left(\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\right] \right). \quad (12.128)$$

avec $a \gg \sigma$, de sorte que le recouvrement des deux paquets est négligeable, et le facteur $1/\sqrt{2}$ assure la normalisation approchée de la fonction d'onde. On trouve pour la distribution de Wigner

$$w(x, p) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2}\right) \left[\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\right] + 2 \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) \cos\left(\frac{2ap}{\hbar}\right) \right] \quad (12.129)$$

Le dernier terme est oscillant, et on voit que la distribution w peut devenir négative. Le terme oscillant subsiste même si $a \gg \sigma$, ce qui montre le caractère non classique de la distribution. Comme nous le verrons au chapitre 17, ce terme décroît rapidement en fonction du temps en raison de la décohérence si la fonction d'onde (12.129) est celle d'une particule mésoscopique interagissant avec un milieu extérieur.

12.6 Théorème adiabatique et phases géométriques

12.6.1 Un exemple

Reprenons l'étude du spin 1/2 dans un champ magnétique (section 5.2), en choisissant la même forme du champ

$$\vec{B} = B_0\hat{z} + B_1(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t) \quad (12.130)$$

La fréquence de Larmor est $\omega_0 = \gamma B_0$, celle de Rabi $\omega_1 = \gamma B_1$, et le hamiltonien s'écrit

$$H(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z - \frac{1}{2}\hbar\omega_1(\sigma_x\cos\omega t - \sigma_y\sin\omega t) \quad (12.131)$$

Soit $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état du spin dans le référentiel du laboratoire et $|\hat{\psi}(t)\rangle$ le vecteur d'état dans le référentiel tournant (*cf.* (5.28))

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = e^{-i\omega t\sigma_z/2} |\psi(t)\rangle$$

Nous avons montré dans la section 5.2 que le hamiltonien \hat{H} qui régit l'évolution dans le référentiel tournant était indépendant du temps (*cf.* (5.34))

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \delta \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x \quad (12.132)$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord. L'évolution temporelle de $|\psi(t)\rangle$ est donc

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\omega t \sigma_z / 2} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (12.133)$$

si l'on identifie $|\psi(t)\rangle$ et $|\hat{\psi}(t)\rangle$ au temps $t = 0$: $|\psi(0)\rangle = |\hat{\psi}(0)\rangle$.

À un instant t , le champ magnétique est dirigé suivant une direction $\hat{n}(t)$ repérée par un angle polaire θ et un angle azimutal qui dépend du temps, $\phi(t) = -\omega t$. La valeur absolue de \vec{B} est indépendante de t

$$\gamma B = \gamma \sqrt{B_0^2 + B_1^2} = \bar{\omega}$$

avec

$$\bar{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \quad (12.134)$$

L'angle polaire θ vérifie donc

$$\omega_0 = \bar{\omega} \cos \theta \quad \omega_1 = \bar{\omega} \sin \theta \quad (12.135)$$

À un instant donné, les vecteurs propres du hamiltonien $H(t)$ sont ceux (3.56) de $\vec{\sigma} \cdot \hat{n}(t)$, et ils dépendent donc de $\phi(t)$

$$|\psi_+(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi(t)} \end{pmatrix} \quad |\psi_-(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi(t)} \end{pmatrix} \quad (12.136)$$

Les vecteurs propres $|\psi_{\pm}(\phi(t))\rangle \equiv |\psi_{\pm}(t)\rangle$ correspondent aux valeurs propres de l'énergie $E_{\pm}(\phi(t)) = \mp \hbar \bar{\omega} / 2$ d'un spin 1/2 dans un champ magnétique \vec{B} orienté suivant la direction \hat{n} et tel que $\gamma B = \bar{\omega}$. Ces valeurs propres sont indépendantes du temps (mais pas les vecteurs propres correspondants!). Supposons qu'au temps $t = 0$ le spin soit dans l'état $|\psi_-\rangle$: $|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$. On obtient $|\psi(t)\rangle$ dans la base $|\pm\rangle$ des états propres de σ_z en combinant (5.42) et (12.133). Expriment $|\pm\rangle$ en fonction de $|\psi_{\pm}(t)\rangle$

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\psi_+(t)\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-(t)\rangle \\ |-\rangle &= \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi(t)} |\psi_+(t)\rangle - \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi(t)} |\psi_-(t)\rangle \end{aligned} \quad (12.137)$$

on écrit $|\psi(t)\rangle$ en fonction de $|\psi_{\pm}(t)\rangle$ grâce à (5.42)

$$\begin{aligned} e^{i\phi(t)/2} |\psi(t)\rangle &= -i \frac{\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \sin \theta |\psi_+(t)\rangle \\ &+ \left[\cos \frac{\Omega t}{2} + \frac{i}{\Omega} (\omega \cos \theta - \bar{\omega}) \sin \frac{\Omega t}{2} \right] |\psi_-(t)\rangle \end{aligned} \quad (12.138)$$

avec $\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2}$. Lorsque $\omega/\Omega \sim 1$, le spin oscille¹⁴ entre les états $|\psi_+(t)\rangle$ et $|\psi_-(t)\rangle$, mais lorsque $\omega/\Omega \ll 1$, la probabilité de le trouver dans l'état $|\psi_+(t)\rangle$ est $\propto (\omega/\Omega)^2$. Ceci donne un exemple du *théorème adiabatique*, examiné dans la sous-section suivante : si le hamiltonien varie lentement en fonction du temps, le spin reste dans l'état propre *instantané* $|\psi_-(t)\rangle$ de $H(t)$. En d'autres termes, le spin suit adiabatiquement le mouvement du champ \vec{B} : le vecteur de Bloch reste orienté en permanence dans la direction $-\hat{n}$ antiparallèle à \vec{B} .

Examinons de plus près le cas intéressant $\omega \ll \Omega$, qui correspond à une précession de Larmor très rapide par rapport au temps caractéristique d'évolution de \vec{B} , en écrivant

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2} = \sqrt{\bar{\omega}^2 + \omega^2 - 2\omega\bar{\omega}\cos\theta} \simeq \bar{\omega} - \omega\cos\theta$$

Dans ces conditions

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-i\Omega t/2} e^{i\omega t/2} |\psi_-(t)\rangle = e^{-i\bar{\omega}t/2} e^{i\omega(1+\cos\theta)t/2} |\psi_-(t)\rangle \quad (12.139)$$

Le facteur $\exp(-i\bar{\omega}t/2)$ est un facteur trivial qui correspond tout simplement à l'évolution temporelle régie par la valeur $E_- = \hbar\bar{\omega}/2$ de l'énergie de $|\psi_-\rangle$, et le second facteur de phase est $\exp[i\bar{\gamma}(t)]$, avec

$$\bar{\gamma}(t) = \frac{\omega t}{2} (1 + \cos\theta) \quad (12.140)$$

Après un tour complet, $t = 2\pi/\omega$, ce facteur de phase est $\exp(i\gamma)$, où γ est la *phase de Berry*

$$\boxed{\gamma = \pi(1 + \cos\theta)} \quad (12.141)$$

Le point remarquable est que la phase γ ne dépend pas de ω , pourvu que la condition de validité de l'approximation adiabatique, $\omega/\Omega \ll 1$, soit satisfaite. Pour cette raison la phase de Berry est aussi appelée *phase géométrique*. On peut généraliser ce résultat et montrer que (12.141) reste valable même si ω dépend du temps, pourvu que $\dot{\omega}/\omega^2 \ll 1$, c'est-à-dire si $\omega(t)$ ne varie pas trop vite. Cependant on ne peut plus écrire dans ce cas de solution exacte, car le hamiltonien \hat{H} (12.132) dépend alors du temps par l'intermédiaire de $\delta(t)$. Une autre observation est que γ dans (12.141) est le demi-angle solide sous lequel est vu le circuit tracé par l'extrémité de \vec{B} : voir l'exercice 12.7.11.

Aharonov et Anandan (Anandan [1992]) ont donné une interprétation intrinsèque de cet effet : au lieu de relier la phase de Berry au fait que le spin suit adiabatiquement le champ, ils interprètent cette phase comme provenant du transport parallèle du vecteur d'état de spin le long d'un trajet tracé sur la sphère de Poincaré-Bloch, c'est-à-dire dans l'espace de Hilbert projectif du

14. Il faut éviter toute confusion avec la situation de la section 5.2 : dans cette section, nous nous intéressons aux oscillations (de Rabi) entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, alors que nous étudions ici les oscillations entre les états $|\psi_+(t)\rangle$ et $|\psi_-(t)\rangle$.

spin. Ce transport parallèle définit une connexion, et la phase de Berry est reliée à l'intégrale de cette connexion le long du trajet fermé (contour) suivi par l'extrémité du vecteur de Bloch. Cette intégrale est donnée par la moitié de l'aire sur la sphère limitée par le contour, ou, ce qui revient au même, par la moitié de l'angle solide d'où le contour est vu depuis l'origine. Dans cette interprétation, il n'est pas nécessaire de faire appel à l'adiabaticité.

12.6.2 Théorème adiabatique

Nous allons généraliser les résultats de la sous-section précédente en montrant d'abord le théorème adiabatique. Soit un hamiltonien dépendant du temps $H(t)$, ou plus précisément un hamiltonien fonction de paramètres $R_i(t)$ dépendant du temps, notés collectivement $R(t)$. Nous allons montrer que si l'évolution temporelle de $R(t)$ est suffisamment lente, et si le système est initialement dans l'état propre $|\varphi_m(t=0)\rangle$ de $H(t=0)$

$$H(t=0)|\varphi_m(t=0)\rangle = E_m(t=0)|\varphi_m(t=0)\rangle \quad (12.142)$$

alors il se trouve au temps t dans l'état $|\varphi_m(t)\rangle$ vecteur propre instantané de $H(t)$

$$H(t)|\varphi_m(t)\rangle = E_m(t)|\varphi_m(t)\rangle \quad (12.143)$$

qui se déduit continûment de $|\varphi_m(t=0)\rangle$. Afin de simplifier la démonstration, nous supposons que le spectre de $H(t)$ est discret et non dégénéré, de sorte que l'ensemble $\{|\varphi_m(t)\rangle\}$ forme une base de l'espace de Hilbert des états, et qu'il n'y a aucun croisement de niveaux quand t varie¹⁵. Les fréquences caractéristiques sont les fréquences de Bohr $\omega_{km}(t) = [E_k(t) - E_m(t)]/\hbar$, et ces fréquences ne sont jamais nulles d'après nos hypothèses : elles sont toutes plus grandes que ω_{\min} . Si le temps caractéristique d'évolution de $R(t)$ est t_{car} , nous verrons que la condition de validité du théorème adiabatique est

$$t_{\text{car}}^{-1} \sim \frac{\dot{R}}{R} \ll \omega_{\min} \quad (12.144)$$

Dans le § 12.6.1, $\dot{R}/R = \omega$ et $\omega_{\min} = \bar{\omega}$. Les solutions $|\varphi(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger dépendant du temps (9.55) vérifient

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = H(t) |\varphi(t)\rangle \quad (12.145)$$

et nous pouvons décomposer $|\varphi(t)\rangle$ dans la base $\{|\varphi_n(t)\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \exp[-i\alpha_n(t)] |\varphi_n(t)\rangle \quad (12.146)$$

15. Voir Messiah [1959], chapitre XVII, pour une discussion générale des conditions de validité du théorème adiabatique.

Le facteur de phase $\exp[-i\alpha_n(t)]$ est appelé facteur de phase dynamique : il généralise le facteur $\exp[-iE_n t/\hbar]$ du cas indépendant du temps et $\exp(-i\omega t/2)$ du § 12.6.1

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \tag{12.147}$$

La substitution de (12.146)–(12.147) dans l'équation de Schrödinger (12.145), jointe à (12.143), conduit à

$$\sum_n \left(\dot{c}_n \exp[-i\alpha_n] |\varphi_n(t)\rangle + c_n \exp[-i\alpha_n] |\dot{\varphi}_n(t)\rangle \right) = 0$$

Multiplions cette équation à gauche par le bra $\langle \varphi_k(t) |$; compte tenu de $\langle \varphi_k(t) | \varphi_n(t) \rangle = \delta_{nk}$, nous obtenons

$$\dot{c}_k = - \sum_n c_n \exp[-i(\alpha_n - \alpha_k)] \langle \varphi_k | \dot{\varphi}_n \rangle \tag{12.148}$$

Utilisons ensuite la dérivée par rapport au temps de (12.143)

$$\dot{H}|\varphi_n\rangle + H|\dot{\varphi}_n\rangle = \dot{E}_n|\varphi_n\rangle + E_n|\dot{\varphi}_n\rangle$$

soit

$$\langle \varphi_k | \dot{\varphi}_n \rangle (E_n - E_k) = \langle \varphi_k | \dot{H} | \varphi_n \rangle$$

pour en déduire un résultat exact donnant \dot{c}_k sous la forme

$$\dot{c}_k = -c_k \langle \varphi_k | \dot{\varphi}_k \rangle + \sum_{n \neq k} c_n \exp[-i(\alpha_n - \alpha_k)] \frac{\langle \varphi_k | \dot{H} | \varphi_n \rangle}{E_k - E_n} \tag{12.149}$$

Nous supposons maintenant que le système est au temps $t = 0$ dans l'état $|\varphi_m(t = 0)\rangle$. Si l'approximation adiabatique est valable, nous devons avoir $|c_m(t)| \simeq 1$ et $|c_n(t)| \ll 1$ pour $n \neq m$. De (12.149) on déduit alors ($k \neq m$)

$$\dot{c}_k = \frac{c_m(t)}{\hbar} \exp[-i(\alpha_m(t) - \alpha_k(t))] \frac{\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_m(t) \rangle}{\omega_{km}(t)} \tag{12.150}$$

Afin d'étudier la limite à grand temps de $c_k(t)$, nous posons $t = sT$, $0 \leq s \leq 1$, ce qui permet de transformer (12.150) en

$$\frac{d}{ds} c_k(s) = F(s) \exp \left[iT \int_0^s ds' \omega_{km}(s') \right] = F(s) \exp [iT\Omega_{km}(s)] \tag{12.151}$$

où

$$F(s) = \frac{c_m(s)}{\hbar} \frac{\langle \varphi_k | \dot{H}(s) | \varphi_m \rangle}{\omega_{km}(s)} \quad \Omega_{km}(s) = \int_0^s ds' \omega_{km}(s')$$

Intégrons l'équation différentielle (12.151) avec la condition initiale $c_k(0) = 0$, $k \neq m$

$$c_k(s) = \int_0^s ds' F(s') \exp [iT\Omega_{km}(s')] \tag{12.152}$$

Compte tenu de la condition de non-croisement des niveaux, $\Omega_{km}(s)$ est une fonction monotone de s et la phase dans (12.152) n'est jamais stationnaire. Comme $F(s)$ est une fonction continue, l'intégrale tend vers zéro pour $T \rightarrow \infty$. Pour le voir explicitement, intégrons (12.152) par parties

$$c_k(s) = \frac{1}{iT} \left[\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')} \Big|_0^s - \int_0^s \exp[iT\Omega_{km}(s')] \frac{d}{ds'} \left(\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')} \right) ds' \right]$$

Comme $d[F(s)/\omega_{km}(s)]$ est une fonction continue de s , le terme en facteur de $1/iT$ reste fini pour $T \rightarrow \infty$ et $c_k(s)$ tend vers zéro comme $1/T$.

Pour évaluer les corrections à l'approximation adiabatique, on calcule perturbativement la probabilité pour que le système passe de l'état initial $|\varphi_m\rangle$ à un autre état $|\varphi_k\rangle$. La probabilité de transition est donnée par (exercice 12.7.10)

$$p_{m \rightarrow k}(t) = \left| \int_0^t \lambda_{km}(t') e^{i\Omega_{km}(t')} dt' \right|^2 \quad (12.153)$$

où

$$\lambda_{km}(t) = \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_m(t) \rangle \quad (12.154)$$

$\lambda_{km}(t)$ est une quantité caractéristique de la « vitesse de rotation » des vecteurs propres de $H(t)$ dans l'espace de Hilbert : c'est la composante suivant $|\varphi_k(t)\rangle$ de la vitesse du vecteur $|\varphi_m(t)\rangle$. Cette vitesse est de l'ordre de \dot{R}/R et nous en déduisons l'estimation

$$p_{m \rightarrow k}(t) \sim \left(\frac{\dot{R}}{R} \right)^2 \frac{1}{\omega_{km}^2} \quad (12.155)$$

12.6.3 La phase géométrique

Si l'approximation adiabatique est valable, l'équation (12.148) se réduit à une équation différentielle pour $c_m(t)$

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \quad (12.156)$$

Il est facile de montrer que $\langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle$ est un nombre imaginaire pur : en effet, de $\langle \varphi_m | \varphi_m \rangle = 1$ on tire

$$0 = \langle \dot{\varphi}_m | \varphi_m \rangle + \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle = \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle^* + \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \quad (12.157)$$

et on peut poser, avec $\dot{\gamma}_m(t)$ réel

$$\dot{\gamma}_m(t) = i \langle \varphi_m(R(t)) | \dot{\varphi}_m(R(t)) \rangle = -\text{Im} \langle \varphi_m(R(t)) | \dot{\varphi}_m(R(t)) \rangle \quad (12.158)$$

où nous avons fait intervenir de façon explicite les paramètres $R(t)$; $\dot{\gamma}_m(t)$ va être à l'origine de la phase de Berry¹⁶, et nous allons montrer que cette phase

16. Cette phase n'est pas prise en compte par Messiah [1959] : en effet l'équation XVII(113') de cette référence implique $\langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle = 0$, voir l'exercice 12.7.10.

ne peut pas être éliminée par une redéfinition $|\varphi_m\rangle \rightarrow \exp(i\chi)|\varphi_m\rangle$ du vecteur d'état¹⁷. Le vecteur d'état au temps t s'écrit alors

$$e^{i\gamma_m(t)} e^{-i\alpha_m(t)} |\varphi_m(R(t))\rangle \tag{12.159}$$

À première vue, cette équation est surprenante, car la phase de $|\varphi_m(R(t))\rangle$ est *a priori* arbitraire, et en extraire le facteur $\exp(i\gamma_m(t))$ ne semble pas physiquement pertinent. Cependant, nous allons voir que cette phase donne lieu à des effets physiques si on fait varier les paramètres le long d'un contour fermé C dans l'espace des paramètres. En premier lieu nous pouvons récrire (12.158) sous la forme

$$\dot{\gamma}_m(t) = i\langle\varphi_m(R(t))|\nabla_R\varphi_m(R(t))\rangle \cdot \dot{R}(t) = A_m(t) \cdot \frac{dR}{dt} \tag{12.160}$$

où ∇_R est le gradient dans l'espace des paramètres et (12.160) définit le vecteur A_m . Pour fixer les idées, on peut prendre le cas particulier où $R(t)$ est un vecteur $\vec{R}(t)$ de \mathbb{R}^3 : le gradient est alors le gradient ordinaire $\vec{\nabla}$. Si $R(t)$ décrit un contour fermé C , $R(T) = R(0)$, la variation de la phase sera

$$\boxed{\gamma_m(T) - \gamma_m(0) = \oint_C \dot{\gamma}_m(t) dt = i \oint_C \langle\varphi_m(R)|\nabla_R\varphi_m(R)\rangle \cdot dR} \tag{12.161}$$

Cette phase est la phase de Berry, ou géométrique : elle dépend *seulement* du contour C , c'est-à-dire du chemin suivi dans l'espace des paramètres, et non de la vitesse à laquelle il est parcouru. Elle est aussi indépendante du choix de phase fait pour $|\varphi_m\rangle$. Pour le voir, limitons-nous au cas où R est un vecteur \vec{R} de \mathbb{R}^3 ; d'après le théorème de Stokes¹⁸

$$\begin{aligned} \oint_C \langle\varphi_m(\vec{R})|\vec{\nabla}_R\varphi_m(\vec{R})\rangle \cdot d\vec{R} &= \iint_{S(C)} \left[\vec{\nabla} \times \langle\varphi_m(\vec{R})|\vec{\nabla}_R\varphi_m(\vec{R})\rangle \right] \cdot d\vec{S} \\ &= \iint_{S(C)} (\vec{\nabla} \times \vec{A}_m) \cdot d\vec{S} \end{aligned} \tag{12.162}$$

où $S(C)$ est une surface s'appuyant sur le contour C . Si l'on effectue un changement de phase sur $|\varphi_m(\vec{R})\rangle$

$$|\varphi_m(\vec{R})\rangle \rightarrow e^{i\chi(\vec{R})} |\varphi_m(\vec{R})\rangle$$

17. Dans le cas particulier étudié au § 12.6.1, on déduit immédiatement de (12.136)

$$\langle\psi_-|\dot{\psi}_-\rangle = -\frac{i\omega}{2}(1 + \cos\theta)$$

et plus généralement, pour $\phi(t)$ quelconque

$$\langle\psi_-|\dot{\psi}_-\rangle = \frac{i\dot{\phi}}{2}(1 + \cos\theta)$$

ce qui redonne bien (12.140).

18. Dans le cas général, on utilise la version du théorème de Stokes montrée en géométrie différentielle. Le gradient est remplacé par une 1-forme, le rotationnel par la différentielle extérieure, et la phase s'écrit comme le flux d'une 2-forme.

alors

$$\langle \varphi_m | \vec{\nabla} \varphi_m \rangle \rightarrow \langle \varphi_m | \vec{\nabla} \varphi_m \rangle + i \nabla \chi$$

Comme $\nabla \times (\vec{\nabla} \chi) = 0$, la phase χ ne contribue pas au résultat (12.161). L'exercice 12.7.11 montre comment retrouver le résultat particulier (12.141) à partir du cas général (12.161).

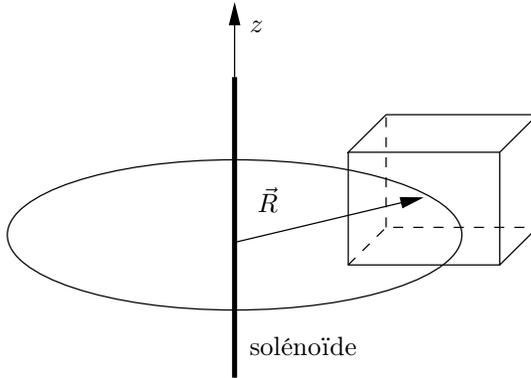


FIG. 12.9 – Phase de Berry et effet A-B : rotation d'une particule chargée autour d'un solénoïde très fin.

Il existe une relation remarquable entre la phase de Berry et celle de l'effet A-B. Considérons la situation où une particule chargée de charge q est confinée dans une boîte centrée en \vec{R} , qui ne rencontre pas le solénoïde (figure 12.9). On montre alors (exercice 12.7.12) que si l'on fait faire à la boîte de façon adiabatique un tour complet autour du solénoïde, la fonction d'onde acquiert une phase $-q\Phi/\hbar$, où Φ est le flux du champ magnétique à travers le circuit effectué par la boîte. La phase de l'effet A-B est donc retrouvée comme une phase géométrique. Comme nous l'avons vu sur l'exemple du spin 1/2, la phase géométrique peut être interprétée comme l'analogie du transport parallèle d'un vecteur en géométrie différentielle. Ici le vecteur transporté parallèlement est le vecteur d'état ; le potentiel vecteur joue le rôle de la connexion et le champ celui de la courbure (voir par exemple Le Bellac [1988], chapitre 13). L'intégrale de contour de la connexion (potentiel vecteur) donne le flux du champ magnétique (courbure).

12.7 Exercices

12.7.1 Formule de Trotter

1. En effectuant un développement de Taylor à l'ordre ε^2 inclus, montrer que

$$e^{(\varepsilon/2)A} e^{\varepsilon B} e^{(\varepsilon/2)A} = e^{\varepsilon(A+B)} + O(\varepsilon^3)$$

2. Soit A et B deux opérateurs bornés. On se propose de montrer la formule de Trotter

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n$$

Suggestions : montrer d'abord l'identité

$$C^n - D^n = (C - D)D^{n-1} + C(C - D)D^{n-2} + \dots + C^{n-1}(C - D)$$

et en déduire pour deux opérateurs bornés C et D

$$\|C^n - D^n\| \leq n(\text{cste})^n \|C - D\|$$

Pour terminer, faire l'identification

$$C \rightarrow e^{(A+B)/n} \quad D \rightarrow e^{A/n} e^{B/n}$$

et montrer

$$\left\| e^{A+B} - \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n \right\| = O\left(\frac{1}{n}\right)$$

12.7.2 Longueur de corrélation et niveau excité

1. Introduisons par analogie avec (12.50) la fonction ($\tau > \tau'$)

$$\begin{aligned} F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a) &= \langle x_b | e^{-H(\tau_b - \tau)/\hbar} X e^{-H(\tau - \tau')/\hbar} X e^{H(\tau_a - \tau')/\hbar} | x_a \rangle \\ &= \langle x_b | e^{-H\tau_b/\hbar} X_H(\tau) X_H(\tau') e^{H\tau_a/\hbar} | x_a \rangle \end{aligned}$$

où $X_H(\tau)$ est défini par (12.42). En introduisant une double somme sur les états propres $|n\rangle$ de H , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, montrer que

$$\lim_{\tau_a \rightarrow -\infty} \lim_{\tau_b \rightarrow +\infty} F = \varphi_0(x_b) \varphi_0^*(x_a) \langle 0 | X e^{-H(\tau - \tau')/\hbar} X | 0 \rangle$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental de H , $H|0\rangle = 0$, on a choisi $E_0 = 0$ et $\varphi_0(x)$ est la fonction d'onde de cet état fondamental.

2. En s'inspirant du § 12.2.3, montrer que la valeur moyenne dans l'état fondamental du produit ordonné dans le temps (euclidien) de $X_H(\tau)$ et $X_H(\tau')$ est

$$\langle 0 | T(X_H(\tau) X_H(\tau')) | 0 \rangle = \lim_{\tau_a \rightarrow -\infty} \lim_{\tau_b \rightarrow +\infty} \frac{F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a)}{F(x_b, \tau_b | x_a, \tau_a)}$$

Écrire ce résultat sous la forme d'une intégrale de chemin. Soit

$$\langle 0 | T(X_H(\tau) X_H(\tau')) | 0 \rangle_c$$

la partie connexe de la valeur moyenne

$$\langle 0 | T(X_H(\tau) X_H(\tau')) | 0 \rangle_c = \langle 0 | T(X_H(\tau) X_H(\tau')) | 0 \rangle - \langle 0 | X_H(\tau) | 0 \rangle \langle 0 | X_H(\tau') | 0 \rangle$$

Montrer que

$$\langle 0 | T(X_H(\tau) X_H(\tau')) | 0 \rangle_c = \sum_{n \neq 0} |\langle 0 | X | n \rangle|^2 e^{-E_n |\tau - \tau'|/\hbar}$$

Quel est le terme dominant quand $|\tau - \tau'| \rightarrow \infty$?

3. Considérons maintenant $x(\tau)$ comme un champ aléatoire *classique*, où τ varie de $-\infty$ à $+\infty$. Par définition, la fonction de corrélation $\langle x(\tau)x(\tau') \rangle$ est donnée par

$$\langle x(\tau)x(\tau') \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x(\tau) x(\tau)x(\tau') \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V[x(\tau)] \right) d\tau \right]$$

$$Z = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V[x(\tau)] \right) d\tau \right]$$

On définit la fonction de corrélation connexe $\langle x(\tau)x(\tau') \rangle_c$ par analogie avec la question **2** et la longueur de corrélation ξ par

$$\langle x(\tau)x(\tau') \rangle_c \propto e^{-|\tau-\tau'|/\xi}$$

lorsque $|\tau - \tau'| \rightarrow \infty$. Montrer que la longueur de corrélation ξ est reliée à l'énergie E_1 ($\equiv E_1 - E_0$) du premier état excité.

12.7.3 Fonctionnelle génératrice

Prendre la première, puis la seconde dérivée fonctionnelle de (12.55)

$$\frac{\delta}{\delta j(t)} \quad \frac{\delta^2}{\delta j(t)\delta j(t')}$$

et vérifier (12.56).

12.7.4 Propagateur de Feynman et propagateur euclidien

1. Vérifier qu'une solution particulière de (12.62) est

$$D_F(t) = \frac{1}{2\omega} \left[\theta(t) e^{-i\omega t} + \theta(-t) e^{i\omega t} \right]$$

Cette solution particulière est appelée *propagateur de Feynman*. La solution générale de (12.62) s'obtient en ajoutant la solution générale (dépendant de deux constantes arbitraires) de l'équation homogène associée à (12.62).

2. La transformée de Fourier de (12.62) s'écrit

$$(k_0^2 - \omega^2)D(k_0) = i$$

soit

$$D(k_0) = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \frac{e^{-ik_0 t}}{k_0^2 - \omega^2}$$

L'ambiguïté de la fonction de Green se reflète dans l'apparition de pôles à $k_0 = \pm\omega$, ce qui fait que l'intégrale n'est pas définie. Montrer que si l'on traite les pôles en utilisant la prescription $\omega^2 \rightarrow \omega^2 - i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$, alors on trouve précisément que le propagateur $D_F(t)$ de la question **1** est donné par

$$D_F(t) = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \frac{e^{-ik_0 t}}{k_0^2 - \omega^2 + i\eta}$$

3. Montrer que si l'on passe au problème euclidien, alors la fonction de Green $D'_E(\tau)$ est donnée par

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2\right) D'_E(\tau) = \delta(\tau)$$

dont la solution est

$$D'_E(\tau) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|\tau|} + A e^{\omega\tau} + B e^{-\omega\tau}$$

12.7.5 Équation de Schrödinger et intégrale de chemin

On se propose de montrer que la fonction $K_E(x, \tau|x_0, \tau_0)$ définie par l'intégrale de chemin (12.37) ($\hbar = 1$ pour simplifier les équations)

$$K_E(x, \tau|x_0, \tau_0) = \int_{x(\tau_0)=x_0}^{x(\tau)=x} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[- \int_{\tau_0}^{\tau} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right) d\tau \right]$$

obéit à l'équation de Schrödinger en temps euclidien (12.38). On part de l'équation de Chapman-Kolmogorov (12.28)

$$K_E(x, \tau + \varepsilon|x_0, \tau_0) = \int dx' K_E(x, \tau + \varepsilon|x', \tau) K_E(x', \tau|x_0, \tau_0)$$

où $K_E(x, \tau + \varepsilon|x', \tau)$ est donné pour $\varepsilon \rightarrow 0$ par

$$K_E(x, \tau + \varepsilon|x', \tau) = \left(\frac{m}{2\pi\varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m}{2\varepsilon} (x - x')^2 - \varepsilon V(x) \right]$$

On posera $u = x' - x$. Montrer que l'intégrale sur u (ou x') est dominée par la région $u^2 \lesssim \varepsilon$. Montrer que l'on doit développer l'intégrand jusqu'à l'ordre ε^2 inclus et que l'on peut remplacer $\exp[-\varepsilon V(x+u)]$ par $1 - \varepsilon V(x)$. En déduire

$$K_E(x, \tau + \varepsilon|x_0, \tau_0) = \left(1 - \varepsilon V(x) + \frac{\varepsilon}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) K_E(x, \tau|x_0, \tau_0)$$

et écrire l'équation aux dérivées partielles vérifiée par K_E .

12.7.6 Calcul de la fonctionnelle génératrice pour l'oscillateur harmonique

On se propose de démontrer l'équation (12.63). Afin de simplifier les formules, on posera $\hbar = m = 1$. On montrera dans un premier temps la version euclidienne de (12.63). Il suffira ensuite d'effectuer un prolongement analytique. L'expression à évaluer est

$$\begin{aligned} Z([j]; x_b, \tau_b; x_a, \tau_a) &= \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[- \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left(\frac{1}{2} \dot{x}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 - j(\tau)x(\tau) \right) \right] \\ &= \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp[-S_E(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a; j)] \end{aligned}$$

Nous allons écrire la trajectoire $x(\tau)$ sous la forme

$$x(\tau) = y(\tau) + h(\tau)$$

où $y(\tau)$ est une solution des équations du mouvement avec source ($j \neq 0$)

$$-\ddot{y} + \omega^2 y = j$$

obéissant à $y(\tau_a) = x_a$, $y(\tau_b) = x_b$ et $h(\tau)$ une solution des équations du mouvement libre ($j = 0$) vérifiant $h(\tau_a) = h(\tau_b) = 0$

1. Montrer que

$$y(\tau) = y_0(\tau) + \int_{\tau_a}^{\tau_b} G(\tau, \tau') j(\tau') d\tau'$$

où $y_0(\tau)$ est solution des équations du mouvement libre vérifiant $y_0(\tau_a) = x_a$, $y_0(\tau_b) = x_b$, et la fonction de Green $G(\tau, \tau')$ est

$$G(\tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') u(\tau) v(\tau') + \theta(\tau' - \tau) v(\tau) u(\tau')$$

Les fonctions u et v sont les solutions suivantes des équations du mouvement libre

$$u(\tau) = \lambda \sinh \omega(\tau_b - \tau) \quad v(\tau) = \lambda' \sinh \omega(\tau - \tau_a)$$

Montrer que l'on doit choisir

$$\lambda \lambda' = \frac{1}{\omega \sinh \omega T} \quad T = \tau_b - \tau_a$$

Suggestion : montrer que

$$\left(\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2 \right) G = \delta(\tau) [\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0)]$$

2. Calculer l'action euclidienne S_E et la mettre sous la forme

$$\begin{aligned} S_E(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a; j) &= \frac{1}{2} y(\tau) \dot{y}(\tau) \Big|_{\tau_a}^{\tau_b} - \frac{1}{2} \int d\tau j(\tau) y(\tau) + S_h \\ &= \bar{S}_E(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a; j) + S_h \end{aligned}$$

On pourra remarquer que $S_E[y + h] = S_E[y] + S_E[h]$. Pourquoi ?

3. Évaluer $\bar{S}_E(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a; j)$

$$\begin{aligned} \bar{S}_E(x_b, \tau_b; x_a, \tau_a; j) &= \frac{\omega}{2 \sinh \omega T} [(x_a^2 + x_b^2) \cosh \omega T - 2x_a x_b] \\ &\quad - \frac{x_a}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sin[\omega(\tau_b - \tau)] j(\tau) d\tau - \frac{x_b}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sinh[\omega(\tau - \tau_a)] j(\tau) d\tau \\ &\quad - \frac{1}{\omega \sinh \omega T} \iint d\tau d\tau' j(\tau) \theta(\tau - \tau') \sinh[\omega(\tau_b - \tau)] \sinh[\omega(\tau' - \tau_a)] j(\tau') \end{aligned}$$

4. Il existe plusieurs méthodes pour évaluer la contribution de S_h à l'intégrale de chemin ($\tau_a = 0, \tau_b = \tau$)

$$S_h = \int_{h(0)=h(\tau)=0} \mathcal{D}[h(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{2} \int_0^\tau (\dot{h}^2 + \omega^2 h^2) d\tau' \right]$$

La méthode la plus directe, et sans doute la plus instructive (mais non la plus rapide), consiste à revenir à la définition de l'intégrale de chemin en la discrétisant. On divise l'intervalle $[0, \tau]$ en n intervalles de longueur $\varepsilon = \tau/n$, et

$$I = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon} \right)^{n/2} \int \prod_{i=1}^{n-1} dh_i \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n-1} h_i A_{ij} h_j \right]$$

où A est une matrice $(n - 1) \times (n - 1)$ de la forme

$$A = \frac{2}{\varepsilon} \left(1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \omega^2 \right) \begin{pmatrix} 1 & -a & 0 & \dots & 0 \\ -a & 1 & -a & \dots & \vdots \\ 0 & -a & 1 & -a & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & -a & 1 \end{pmatrix}$$

avec

$$a = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \omega^2 \right)$$

En déduire

$$I = \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon} \right)^{n/2} \frac{(2\pi)^{(n-1)/2}}{(\det A)^{1/2}}$$

Pour calculer $\det A$, on remarque que le déterminant D_n de la matrice $n \times n$ vérifie la relation de récurrence

$$D_n = D_{n-1} - a^2 D_{n-2}$$

Montrer (ou vérifier) que la solution de cette relation de récurrence est

$$D_n = \frac{1}{\cos \theta - \sin \theta} [\cos^{n+1} \theta - \sin^{n+1} \theta]$$

avec $a = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, $\theta < \pi/4$. En déduire le résultat final pour I

$$I = \left[\frac{\omega}{2\pi \sinh \omega \tau} \right]^{1/2}$$

5. On s'intéresse au cas où la source $j(\tau)$ est non nulle uniquement dans un intervalle $[0, T]$. On part de la forme opératorielle de $Z(j)$

$$Z(j) = \langle x_b | e^{-H(\tau_b - T)} U_j(T, 0) e^{H\tau_a} | x_a \rangle$$

où U_j est l'opérateur d'évolution en temps euclidien qui vérifie

$$\frac{dU_j(\tau, \tau_a)}{d\tau} = -HU_j(\tau, \tau_a) + j(\tau)U_j(\tau, \tau_a) \quad U_j(\tau_a, \tau_a) = I$$

On prend la limite $\tau_a \rightarrow -\infty, \tau_b \rightarrow \infty$. Montrer que cette limite est contrôlée uniquement par l'état fondamental $|0\rangle$ de H , que l'on prendra d'énergie nulle : $E_0 = 0$. En déduire que la valeur moyenne sur l'état fondamental (en général appelée valeur moyenne sur le vide) de U_j est

$$\lim_{\tau_a \rightarrow -\infty} \lim_{\tau_b \rightarrow +\infty} \langle 0 | U_j(\tau_b, \tau_a) | 0 \rangle = \int dx_a dx_b \varphi_0(x_b) \varphi_0^*(x_a) Z(j)$$

où $\varphi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\omega}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} \omega x^2 \right]$$

Effectuer l'intégration sur x_a et x_b et montrer que

$$\lim_{\tau_a \rightarrow -\infty} \lim_{\tau_b \rightarrow +\infty} \langle 0 | U_j(\tau_b, \tau_a) | 0 \rangle = \exp \left[\frac{1}{2} \int d\tau d\tau' j(\tau) D_E(\tau - \tau') j(\tau') \right]$$

où

$$D_E(\tau) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|\tau|}$$

est le propagateur euclidien

6. Effectuer le prolongement analytique $\tau \rightarrow it$ pour obtenir les résultats en temps réel, en particulier (12.63). Montrer que le prolongement du résultat de la question 5 devient

$$\lim_{t_a \rightarrow -\infty} \lim_{t_b \rightarrow +\infty} \langle 0|U_j(t_a, t_b)|0\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2} \int dt dt' j(t) D_F(t-t') j(t')\right]$$

où D_F est le propagateur de Feynman. En fait il est nécessaire de donner une partie imaginaire¹⁹ à t : $t_a = |t_a| \exp[i(\pi - \theta)]$, $t_b = |t_b| \exp[-i\theta]$, avec $0 < \theta < \pi/2$. Les résultats de cet exercice sont d'une importance fondamentale en théorie quantique des champs.

12.7.7 Formules de raccordement pour $K < 0$

On suppose que la région $x > 0$ au voisinage du point de rebroussement à $x = 0$ est la région interdite classiquement

$$E - V(x) = -|K|x$$

La fonction d'onde BKW s'écrit dans la région $x < 0$ comme

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(A_1 \exp\left[-i \int_0^x k(u) du\right] + A_2 \exp\left[i \int_0^x k(u) du\right] \right)$$

et dans la région $x > 0$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(B_1 \exp\left[\int_0^x \kappa(u) du\right] + B_2 \exp\left[-\int_0^x \kappa(u) du\right] \right)$$

Montrer que si $C_B = 0$ (voir (12.93)), on peut obtenir les relations

$$A_1 = B_2 e^{i\pi/4} \quad A_2 = B_2 e^{-i\pi/4}$$

En déduire (12.95).

12.7.8 Propriétés de la distribution de Wigner

1. Démontrer l'inégalité suivante pour deux opérateurs statistiques ρ et ρ'

$$0 \leq \text{Tr}(\rho\rho') \leq 1$$

Suggestion : écrire

$$\rho = \sum_n p_n |i_n\rangle\langle i_n| \quad \rho' = \sum_n p'_n |\alpha_n\rangle\langle \alpha_n|$$

Montrer que cette égalité est saturée si et seulement si $\rho = \rho' = |\varphi\rangle\langle \varphi|$ (cas pur).

2. Déduire la relation (12.121) de l'inégalité précédente. En prenant

$$\rho = |\varphi\rangle\langle \varphi| \quad \rho' = |\psi\rangle\langle \psi| \quad \langle \psi|\varphi\rangle = 0$$

montrer que w doit nécessairement prendre des valeurs négatives. Enfin, en prenant $\rho = \rho' = |\varphi\rangle\langle \varphi|$, déduire (12.125).

19. Voir par exemple Parisi [1989], chapitre 13.

12.7.9 Évolution temporelle de la distribution de Wigner

On part de l'équation d'évolution (6.51) dont on déduit celle des éléments de matrice $\langle p|\rho|p'\rangle$ (ou $\langle x|\rho|x'\rangle$) de ρ

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle p|\rho|p'\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle p|[\rho, H]|p'\rangle$$

L'équation d'évolution de $w(x, p; t)$ s'obtient à partir de (12.117) avec $p \rightarrow p + z/2, p' \rightarrow p - z/2$.

1. Terme d'énergie cinétique. Soit $H = K + V$ la décomposition de H en énergie cinétique K et énergie potentielle V . Montrer que la contribution de K à l'évolution de w est

$$\frac{\partial K}{\partial t}w(x, p; t) = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}w(x, p; t)$$

2. Terme d'énergie potentielle. On se sert cette fois de la représentation (12.116) de w , en partant de $\langle x|\rho|x'\rangle$ avec $x \rightarrow x + y/2, x' \rightarrow x - y/2$. Montrer que la contribution de V à l'évolution de w est le deuxième terme de (12.122). En utilisant un développement de Taylor, montrer

$$\frac{\partial V}{\partial t}w(x, p; t) = \sum_{n \text{ impair}} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\hbar}{2}\right)^{n-1} \frac{d^n V(x)}{dx^n} \frac{\partial^n}{\partial p^n}w(x, p; t)$$

Cette équation semble conduire à un développement en puissances de \hbar , mais c'est une illusion, sauf cas particulier : il est clair sur (12.129) que $\partial/\partial p$ introduit des puissances de $1/\hbar$.

12.7.10 Probabilités de transition à l'approximation adiabatique

1. Suivant Messiah [1959], chapitre XVII, on définit l'opérateur unitaire $A(t)$ permettant de « passer aux axes tournants », c'est-à-dire de suivre les vecteurs propres de $H(t)$ que l'on suppose non dégénérés, par

$$|\varphi_j(t)\rangle = A(t)|\varphi_j(0)\rangle$$

où $|\varphi_j(0)\rangle$ et $|\varphi_j(t)\rangle$ sont vecteurs propres de $H(0)$ et $H(t)$ (cf. (12.142) et (12.143)). On pose $\hbar = 1$ pour simplifier les notations. L'opérateur hermitien $K(t)$ est défini par l'évolution de $A(t)$

$$i \frac{dA}{dt} = K(t)A(t) \quad A(0) = 1$$

Les opérateurs $A(t)$ et $K(t)$ ne sont pas uniques. Montrer qu'un choix possible est

$$K(t) = i \sum_j \frac{d\mathcal{P}_j}{dt} \mathcal{P}_j(t) = -i \sum_j \mathcal{P}_j(t) \frac{d\mathcal{P}_j}{dt}$$

où $\mathcal{P}_j(t)$ est le projecteur sur $|\varphi_j(t)\rangle$

$$\mathcal{P}_j(t) = |\varphi_j(t)\rangle\langle\varphi_j(t)| = A(t)\mathcal{P}_j(0)A^\dagger(t)$$

Suggestion : montrer que

$$i \frac{d\mathcal{P}_j}{dt} = [K, \mathcal{P}_j]$$

On introduit l'opérateur unitaire $\Phi(t)$ par

$$\Phi(t) = \sum_j e^{-i\alpha_j(t)} \mathcal{P}_j(0)$$

où $\alpha_j(t)$ est défini en (12.147). On note que $\Phi(t)$ obéit à

$$i \frac{d\Phi}{dt} = H^{(A)}(t)\Phi(t) \quad H^{(A)}(t) = \sum_j E_j(t)\mathcal{P}_j(0)$$

À l'approximation adiabatique, l'opérateur d'évolution est $U_A(t, 0) = A(t)\Phi(t)$, car

$$U_A(t, 0)|\varphi_j(0)\rangle = e^{-i\alpha_j(t)} |\varphi_j(t)\rangle$$

Pour étudier les déviations à l'approximation adiabatique, on écrit

$$U(t, 0) = U_A(t, 0)\hat{U}(t, 0) = A(t)\Phi(t)\hat{U}(t, 0)$$

Expliquer pourquoi $\hat{U}(t, 0)$ est l'opérateur d'évolution dans les axes tournants. Montrer que

$$i \frac{d\hat{U}}{dt} = W\hat{U} \quad W = -\Phi^\dagger A^\dagger K A \Phi$$

3. Au premier ordre en théorie des perturbations on peut écrire

$$\hat{U}(t, 0) = I - i \int_0^t W(t') dt'$$

Si on part au temps $t = 0$ de l'état $|\varphi_m(0)\rangle$, la probabilité de transition $m \rightarrow k$ est donnée au temps t par

$$p_{m \rightarrow k}(t) = |\langle \varphi_k(t) | U(t, 0) | \varphi_m(0) \rangle|^2$$

En déduire

$$p_{m \rightarrow k}(t) \simeq |\langle \varphi_k(0) | F(t) | \varphi_m(0) \rangle|^2$$

$$F(t) = \int_0^t \Phi^\dagger(t') A^\dagger(t') K(t') A(t') \Phi(t') dt'$$

d'où

$$p_{m \rightarrow k}(t) \simeq \left| \int_0^t e^{i[\alpha_k(t') - \alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_m(t') \rangle dt' \right|^2$$

ce qui montre (12.153).

4. Montrer que les résultats de la question 1 impliquent

$$|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \frac{d\mathcal{P}_m}{dt} |\varphi_m(t)\rangle$$

Suggestion : examiner $d(\mathcal{P}_m |\varphi_m(t)\rangle)/dt$ et utiliser $|\varphi_m(t)\rangle = A(t)|\varphi(0)\rangle$. En déduire

$$\mathcal{P}_m(t) |\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

et donc $\langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle = 0$. Le choix de phase implicite fait dans la question 1 interdit d'obtenir la phase de Berry.

5. Construire l'opérateur K dans le cas étudié au § 12.6.1 et montrer que

$$K = \frac{1}{2} \dot{\phi} \vec{\sigma} \cdot \left(\hat{n} \times \frac{d\hat{n}}{dt} \right)$$

où \hat{n} est le vecteur unitaire d'angles polaires $(\theta, \phi(t))$. Vérifier que l'on a bien $\langle \psi_- | \dot{\psi}_- \rangle = 0$ pour t infinitésimal, contrairement au traitement donné dans le § 12.6.1.

12.7.11 Spin 1/2 dans un champ magnétique : relation avec l'étude générale

1. L'équation (12.160) définit un vecteur A_m dans l'espace des paramètres. Afin de simplifier les notations, on suppose que ∇_R a les propriétés d'un gradient dans \mathbb{R}^3 . En introduisant un système complet d'états $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$, montrer que

$$(\nabla \times A_m)_i = -\text{Im} \left(\sum_{jk} \sum_n \varepsilon_{ijk} \langle\partial_j \varphi_m|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\partial_k \varphi_m\rangle \right)$$

2. En partant de $H(R)|\varphi_n(R)\rangle = E_n(R)|\varphi_n(R)\rangle$, déduire

$$(\nabla \times A_m)_i = -\text{Im} \left(\sum_{jk} \sum_n \varepsilon_{ijk} \frac{\langle\varphi_m|\partial_j H|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\partial_k H|\varphi_m\rangle}{(E_n - E_m)^2} \right)$$

3. On revient à l'exemple du § 12.6.1 où le hamiltonien est

$$H = -\frac{1}{2} \gamma \hbar \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Le paramètre est \vec{B} et ∂_i est la dérivée par rapport à B_i . Montrer que $(\nabla \times A_m)$ se met sous la forme

$$(\nabla \times A_m) = -\frac{\vec{B}}{2B^2}$$

et que

$$\iint \mathcal{S}(C) (\nabla \times A_m) \cdot d\mathcal{S} = -\frac{1}{2} \Omega$$

où Ω est l'angle solide sous lequel le contour C est vu depuis l'origine.

12.7.12 Phase de Berry et effet Aharonov-Bohm

1. Considérons une particule chargée de charge q confinée dans une boîte centrée en \vec{R} qui ne rencontre pas le solénoïde (figure 12.9). En l'absence de tout champ magnétique (pas de courant dans le solénoïde), la fonction d'onde de la particule est $\varphi_m(\vec{r} - \vec{R})$. On suppose maintenant que le courant passe dans le solénoïde; le champ magnétique reste nul à l'intérieur de la boîte. Bien que $\vec{B} = 0$, on doit cependant choisir $\vec{A} \neq 0$. Montrer que la fonction d'onde devient

$$\Psi_m(\vec{r}; \vec{R}) = \exp \left(-\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \right) \varphi_m(\vec{r} - \vec{R})$$

2. On fait décrire à la boîte de façon adiabatique un tour complet autour du solénoïde. Montrer que dans les notations de (12.160)

$$\vec{A}_m(\vec{R}, t) = i \langle \Psi_m(\vec{r}; \vec{R}) | \vec{\nabla}_{\vec{R}} \Psi_m(\vec{r}; \vec{R}) \rangle$$

et calculer \vec{A}_m

$$\vec{A}_m = -\frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) + i \int d^3r \varphi_m^*(\vec{r} - \vec{R}) \vec{\nabla}_{\vec{R}} \varphi_m(\vec{r} - \vec{R})$$

3. Montrer que si l'on fait un tour complet autour du solénoïde

$$\oint_C \vec{A}_m(\vec{R}) \cdot d\vec{R} = -\frac{q\Phi}{\hbar}$$

où Φ est le flux du champ magnétique à travers le contour C .

12.8 Bibliographie

L'article de référence sur l'approximation semi-classique est celui de Berry [1991] ; voir aussi les livres de Gutzwiller [1990] et de Stöckman [1999]. On pourra compléter l'exposé de l'intégrale de chemin par les livres de Schulman [1981], Parisi [1989], chapitres 13 et 14, ou Zinn-Justin [2003]. Notre exposé de l'approximation BKW est inspiré de celui de Child [1991], Appendice A. Une bonne introduction à la distribution de Wigner se trouve dans Ballentine [1998], chapitre 15, que l'on pourra compléter par l'article de revue de Hillery *et al.* [1984]. Les articles essentiels sur les phases géométriques sont rassemblés dans Shapere et Wilczek [1989].

Chapitre 13

Théorie élémentaire de la diffusion

JUSQU'À PRÉSENT nous avons étudié principalement les états liés, et les états de diffusion n'ont été examinés que dans le cas à une dimension (§ 9.3.4). Cependant des informations essentielles sur les interactions entre particules, atomes, molécules, etc., ainsi que sur la structure des objets composés, peuvent être obtenues par des expériences de diffusion¹ (ou de collision). Les états liés ne donnent que des informations partielles sur ces interactions – et parfois ils n'existent même pas –, tandis qu'il est pratiquement toujours possible de réaliser des expériences de collision. Nous allons nous limiter dans ce chapitre à la diffusion par un potentiel, qui permet de décrire les collisions élastiques de deux particules de masses m_1 et m_2 . En effet, en se plaçant dans le référentiel du centre de masse², on se ramène au cas d'une particule de masse $m = (m_1 m_2)/(m_1 + m_2)$ dans un potentiel (exercice 8.5.6).

Les sections 13.1 et 13.2 développent le formalisme élémentaire de la théorie de la diffusion élastique, en mettant l'accent sur la limite de basse énergie, qui joue un rôle très important en pratique. La section 13.3 généralise le formalisme au cas inélastique, ou plus exactement décrit la répercussion des voies inélastiques sur la diffusion élastique. Enfin la section 13.4 est consacrée à des développements plus formels.

13.1 Section efficace et amplitude de diffusion

13.1.1 Sections efficaces différentielle et totale

Le schéma d'une expérience de diffusion est donné dans la figure 13.1. Un faisceau de particules de masse m_1 et d'impulsion bien définie dirigée suivant

1. La terminologie française prête à confusion : diffusion a deux significations, soit collision d'une particule sur une autre, soit mouvement régi par une équation de diffusion, souvent relié à une marche aléatoire. Cette ambiguïté n'existe pas en anglais : collision est traduit par « *scattering* » et diffusion par « *diffusion* ».

2. Dans les anneaux de collision comme le LEP (Large Electron-Positron), anneau de collision $e^+ - e^-$ mis en service au CERN en 1990 et fermé en 2000, le référentiel du centre de masse est identique à celui du laboratoire.

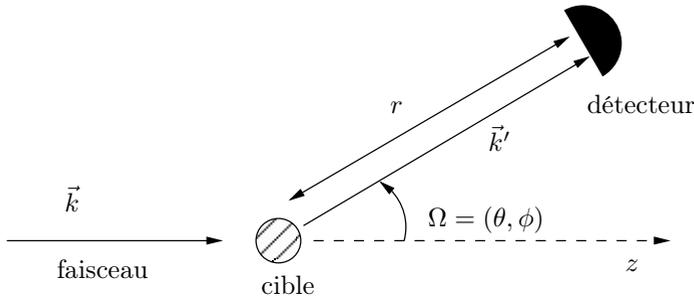


FIG. 13.1 – Schéma d'une expérience de diffusion.

l'axe Oz entre en collision avec une cible de particules de masse m_2 . Pour simplifier la discussion, on supposera $m_1 \ll m_2$, et on négligera le recul de la cible dans la collision. Dans le cas général, il faut passer du référentiel du laboratoire au référentiel du centre de masse par une transformation cinématique simple (exercice 8.5.6). Une fraction des particules incidentes est déviée par la collision avec la cible et les particules qui ont subi une collision sont enregistrées par des détecteurs placés dans une direction d'angles polaires (θ, ϕ) , appelés *angles de diffusion*, notés collectivement Ω . Soit $\Delta\mathcal{S}$ la surface d'un détecteur placé à une distance r de la cible. Ce détecteur est vu de la cible sous un angle solide $\Delta\Omega \simeq \Delta\mathcal{S}/r^2$. On suppose que la densité n_c de particules cibles est suffisamment faible pour que les collisions multiples puissent être négligées. Dans ces conditions, le nombre $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ de particules ayant subi une collision et enregistrées par le détecteur est proportionnel, par unité de temps et par unité de volume de la cible,

- au flux \mathcal{F} de particules incidentes, c'est-à-dire au nombre de particules traversant une surface unité perpendiculaire à Oz par unité de temps : $\mathcal{F} = n_i v$, où n_i est la densité de particules incidentes et v leur vitesse ;
- à la densité n_c de particules cibles ;
- à l'angle solide $\Delta\Omega$ sous lequel est vu le détecteur depuis la cible (figure 13.1). Par la suite nous supposons cet angle solide infinitésimal : $\Delta\Omega \rightarrow d\Omega$.

Nous avons donc

$$d\mathcal{N}(\Omega) = \mathcal{F} n_c \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (13.1)$$

Le facteur de proportionnalité, $d\sigma/d\Omega$, est appelé *section efficace différentielle de diffusion*, ou *section efficace différentielle de collision*. L'analyse dimensionnelle montre que $d\sigma/d\Omega$ a les dimensions d'une surface et se mesure en

m²/stéradian. En intégrant sur Ω , on obtient la *section efficace totale* σ_{tot}

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}} \quad (13.2)$$

Le produit $\mathcal{F}n_c\sigma_{\text{tot}}$ est égal au nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience pour une cible de volume unité. La section efficace totale est *a priori* une fonction de la vitesse v de la particule incidente, ou de façon équivalente de son énergie. La section efficace différentielle est une fonction de l'énergie et des angles θ et ϕ . Lorsque le problème physique est invariant par rotation³ autour de l'axe Oz la section efficace différentielle ne dépend que de θ .

Donnons une illustration intuitive de la notion de section efficace en examinant en mécanique classique la collision de deux boules de billard de rayons R_1 et R_2 . Supposons d'abord que les particules incidentes (ici les boules de billard) ont un rayon R et que les particules cibles sont ponctuelles. En une seconde, une particule incidente balaie un volume $\pi R^2 v$, et elle rencontre donc $n_c \pi R^2 v$ particules cibles. Le nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience est $n_i n_c \pi R^2 v = \mathcal{F} n_c \pi R^2$, d'où la section efficace totale $\sigma_{\text{tot}} = \pi R^2$. C'est géométriquement la surface d'un disque de rayon R . Cette section efficace est aussi celle de la diffusion de particules ponctuelles par des cibles de rayon R , et dans ce cas l'origine géométrique de πR^2 est claire : c'est l'aire que présente la cible à une particule incidente. La section efficace totale lorsque les particules incidentes ont un rayon R_1 et les particules cibles un rayon R_2 se déduit du résultat précédent : le nombre de collisions est le même que si les particules incidentes étaient ponctuelles et les particules cibles avaient un rayon $(R_1 + R_2)$. La section efficace totale est donc

$$\sigma_{\text{tot}} = \pi(R_1 + R_2)^2 \quad (13.3)$$

La section efficace différentielle s'obtient aisément dans le cas de particules incidentes ponctuelles (figure 13.2) arrivant sur des cibles de rayon R . Le *paramètre d'impact* b de la collision est la plus petite distance entre la trajectoire incidente en l'absence de collision et le centre de la cible. La figure 13.2 montre que le paramètre d'impact et l'angle de diffusion θ sont reliés par

$$b = R \cos \frac{\theta}{2}$$

tandis que

$$d\sigma = 2\pi b db = \pi R^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = \frac{1}{2} \pi R^2 d(\cos \theta)$$

3. Cette invariance n'est pas valable par exemple si le potentiel n'est pas invariant par rotation ou si les particules cibles ont un spin polarisé suivant un axe perpendiculaire à Oz avec une diffusion dépendant du spin.

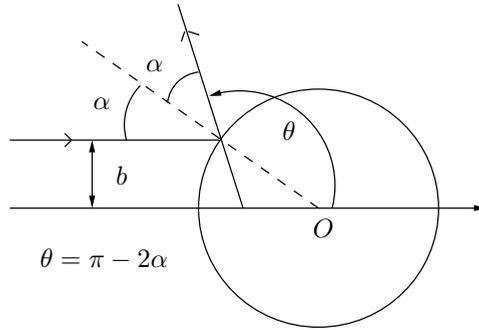


FIG. 13.2 – Collision classique d'une particule ponctuelle sur une sphère de rayon R .

d'où la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{d\sigma}{d\cos\theta} = \frac{1}{4} R^2 \quad (13.4)$$

car l'intégration sur ϕ donne un facteur 2π . Cette section efficace, appelée *section efficace de diffusion par une sphère dure*, est donc indépendante de l'angle de diffusion, ou isotrope. On vérifie que l'intégration sur Ω redonne bien πR^2 .

13.1.2 Amplitude de diffusion

Venons-en maintenant à la description quantique de la diffusion par un potentiel V que nous supposons à symétrie sphérique : $V(r)$. Nous reviendrons à un potentiel général $V(\vec{r})$ à partir du § 13.3.2. Nous ignorons les éventuels degrés de liberté de spin, sauf au § 13.2.4. La diffusion est un processus dépendant du temps : une particule incidente décrite par un paquet d'ondes $\varphi(\vec{r}, t)$ part de $z = -\infty$, se propage le long de l'axe Oz et rencontre le potentiel à un temps $t \sim 0$. Ce paquet d'ondes a une certaine probabilité d'être diffusé dans la direction θ , et le détecteur placé dans cette direction une certaine probabilité d'enregistrer la particule. La description quantique correcte ne peut se faire qu'en utilisant des paquets d'ondes. Toutefois cette description est un peu délicate, et nous allons dans un premier temps la simplifier en considérant un processus stationnaire ; nous reviendrons ultérieurement (§ 13.4.2) sur l'utilisation des paquets d'ondes. Nous partirons d'une onde plane incidente de vecteur d'onde $\vec{k} = (0, 0, k)$ parallèle à Oz

$$\varphi(\vec{r}) = A e^{ikz} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (13.5)$$

où m est la masse des particules incidentes, E leur énergie et $|A|^2 = n_i$ leur densité. Le courant \vec{j} associé à l'onde plane (13.5) est donné par (9.123)

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\varphi^* \vec{\nabla} \varphi - (\vec{\nabla} \varphi)^* \varphi \right) = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A|^2 \vec{v} \quad (13.6)$$

Le flux de particules incidentes $\mathcal{F} = |\vec{j}| = |A|^2 v$. L'onde plane $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en l'absence de potentiel ($V(r) = 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (13.7)$$

Lorsque $V(r) \neq 0$, pour une même valeur de l'énergie E , nous montrerons au § 12.4.1 qu'il existe des solutions de l'équation de Schrödinger $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ indicées par le vecteur d'onde \vec{k}

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = E \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \quad (13.8)$$

se comportant pour $r \rightarrow \infty$ comme

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = A \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right)} \quad (13.9)$$

où f est une fonction complexe de Ω – dans notre cas uniquement de θ en raison de l'invariance par rotation autour de Oz –, appelée *amplitude de diffusion*. Le premier terme de (13.9) est l'onde plane incidente $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp(ikz)$, et le deuxième représente une *onde sphérique sortante*, ce que nous allons montrer dans un instant. Il est essentiel de remarquer que ce sont les valeurs absolues k et r qui figurent dans ce deuxième terme. L'expression (13.9) est valable pourvu que le potentiel $V(r)$ décroisse suffisamment vite pour $r \rightarrow \infty$. Elle n'est pas valable pour un potentiel coulombien, dont la décroissance en $1/r$ est trop lente. Il existe aussi des solutions de l'équation de Schrödinger avec un terme d'onde sphérique entrante

$$\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r}) = A \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \quad (13.10)$$

utiles pour certaines discussions, mais nous n'avons pas à nous en servir.

Calculons le courant total pour la fonction d'onde asymptotique (13.9). Ce courant se compose du courant de l'onde plane, de celui de l'onde sphérique et d'un terme d'interférences. C'est ici que nous devons faire appel à un argument physique, car l'extension transverse de l'onde plane est en fait limitée, et non infinie (figure 13.3), et sauf dans la région de recouvrement du paquet d'ondes incident et de l'onde sphérique, nous devons négliger le terme d'interférences⁴.

4. Ce terme d'interférences est essentiel pour comprendre le théorème optique (13.54) : cf. Lévy-Leblond et Balibar [1984].

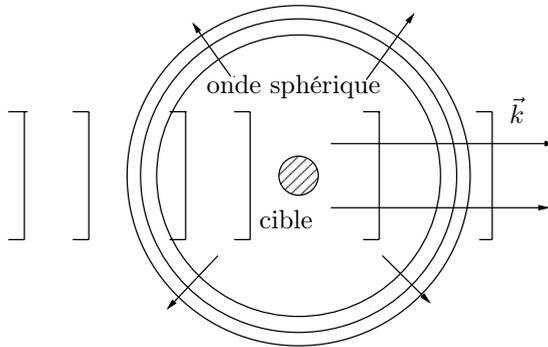


FIG. 13.3 – Limitation de l'onde plane incidente.

Dans une direction $\theta \neq 0$, c'est-à-dire en dehors de la direction de l'onde incidente $\theta = 0$, il est toujours possible de placer le détecteur suffisamment loin de la cible pour que le terme d'interférences soit négligeable, et il suffit donc de calculer le courant de l'onde sphérique. En utilisant $\vec{\nabla}g(r) = \hat{r}g'(r)$ on obtient

$$\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} f(\Omega) \right) = ik\hat{r} \frac{e^{ikr}}{r} f(\Omega) + O \left(\frac{1}{r^2} \right)$$

En effet

$$\left| \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right| \propto \frac{1}{r^2} \quad \text{et} \quad |\vec{\nabla} f(\Omega)| \propto \frac{1}{r}$$

et l'expression finale de \vec{j} est

$$\vec{j} = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} |f(\Omega)|^2 \hat{r} \frac{1}{r^2} = |A|^2 v |f(\Omega)|^2 \hat{r} \frac{1}{r^2} \quad (13.11)$$

Si l'on trace autour de la cible une sphère de rayon r très grand, le courant associé au deuxième terme de (13.10) sur la surface de cette sphère est dirigé suivant \hat{r} et vers l'extérieur, et ce terme représente bien une onde sortante. Le courant associé à un terme en $\exp(-ikr)/r$ serait dirigé vers l'intérieur et correspondrait au contraire à une onde sphérique entrante. Le nombre de particules $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ enregistrées par le détecteur par unité de temps est égal à l'intégrale du courant sur la surface du détecteur $\Delta\mathcal{S} \simeq r^2 \Delta\Omega$

$$\Delta\mathcal{N}(\Omega) = \int_{\Delta\mathcal{S}} \vec{j} \cdot d\vec{\mathcal{S}} = r^2 \int_{\Delta\Omega} \vec{j} \cdot \hat{r} d\Omega$$

le détecteur étant placé à une distance r de la cible, ce qui donne pour $\Delta\Omega$ infinitésimal

$$d\mathcal{N}(\Omega) = |A|^2 v |f(\Omega)|^2 d\Omega = \mathcal{F} |f(\Omega)|^2 d\Omega$$

C'est bien sûr le comportement en $1/r$ du terme d'onde sphérique sortante qui assure que le flux dans un angle solide donné $\Delta\Omega$ est indépendant de r .

La définition (13.1) de la section efficace différentielle permet l'identification pour $n_c = 1$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2} \quad (13.12)$$

13.2 Ondes partielles et déphasages

13.2.1 Développement en ondes partielles

Nous avons exposé au § 10.4.1 une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel $V(r)$ est à symétrie sphérique. La méthode utilisée consiste à développer la fonction d'onde en harmoniques sphériques suivant (10.77)

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l, m_l} \frac{u_l(r)}{r} Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

La symétrie cylindrique autour de Oz du présent problème permet de se limiter aux termes indépendants de ϕ : $m_l = 0$, et compte tenu de la proportionnalité (10.62) entre les harmoniques sphériques $m_l = 0$ et les polynômes de Legendre, nous pouvons nous contenter de⁵

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (13.13)$$

où $u_l(r)$ est solution de l'équation radiale (10.78)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E_l u_l(r) \quad (13.14)$$

avec la condition aux limites $u_l(0) = 0$, ou de façon plus précise suivant (10.82)

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^{l+1} \quad (13.15)$$

Comme les polynômes de Legendre forment une base pour les fonctions définies sur l'intervalle $[-1, +1]$, on peut écrire le développement suivant de $f(\theta)$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \quad f_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} f(\theta) P_l(\cos \theta) d \cos \theta \quad (13.16)$$

Le développement (13.16) est appelé *développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion*.

5. Nous avons modifié la normalisation de $u_l(r)$ d'un facteur sans importance $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$ en passant d'une équation à l'autre.

Si $V(r)$ tend vers zéro suffisamment vite⁶ pour $r \rightarrow \infty$, on peut négliger dans (13.14) $V(r)$ et le terme de barrière centrifuge. Le comportement asymptotique de $u_l(r)$ sera alors

$$r \rightarrow \infty \quad : \quad u_l(r) \propto \sin(kr + \hat{\delta}_l)$$

Comparons ce comportement avec celui d'une onde plane. Une onde plane $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta)$ est une solution à symétrie cylindrique de l'équation de Schrödinger lorsque $V(r) = 0$. On peut donc écrire pour $\exp(ikz)$ un développement en polynômes de Legendre du type (13.13). Les coefficients de ce développement sont calculés à partir de (13.16) et sont appelés *fonctions de Bessel sphériques* $j_l(kr)$

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (13.17)$$

Les fonctions de Bessel sphériques s'expriment en fonction de sinus et de cosinus et on montre qu'elles sont données par

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l j_0(x) \quad (13.18)$$

Lorsque $r \rightarrow 0$, $r j_l(kr) \propto (kr)^{l+1}$, ce qui est un cas particulier du comportement (13.15) puisque $r j_l(kr)$ est solution de l'équation de Schrödinger radiale avec $V(r) = 0$, tandis que si $r \rightarrow \infty$, on montre⁷

$$r \rightarrow \infty \quad : \quad j_l(kr) \simeq \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{1}{2} l \pi \right) \quad (13.19)$$

La comparaison avec le comportement de $u_l(r)$ conduit à définir

$$\delta_l = \hat{\delta}_l - \frac{1}{2} l \pi$$

ce qui permet d'écrire le comportement asymptotique de $u_l(r)$

$$r \rightarrow \infty \quad : \quad u_l(r) \simeq a_l \sin \left(kr - \frac{1}{2} l \pi + \delta_l \right) \quad (13.20)$$

Le nombre δ_l est le *déphasage* dans l'onde partielle l , et c'est une fonction de k : $\delta_l(k)$. Afin d'exprimer $f(\theta)$ en fonction des déphasages, il suffit de

6. Cette qualification du potentiel mériterait d'être précisée. Tous les résultats de ce chapitre sont valides si $V(r)$ est de portée finie ($V(r) = 0$ si $r > R$) ou décroît à l'infini plus vite que toute puissance. Si $V(r)$ décroît à l'infini comme $r^{-\alpha}$, certains des résultats ne sont valides que si $\alpha \geq \alpha_0$. La discussion de ce problème est assez technique, et nous renvoyons le lecteur aux ouvrages cités en référence.

7. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément A_{VIII}.

comparer les développements asymptotiques $r \rightarrow \infty$ de (13.9) et de (13.13) en choisissant $A = 1$. Compte tenu de (13.17), le développement (13.9) s'écrit

$$e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} X_l(r) P_l(\cos \theta)$$

$$X_l(r) = (2l + 1) i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r}$$

La forme asymptotique (13.19) de j_l donne

$$i^l j_l(kr) \simeq \frac{1}{2ikr} [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}]$$

et on en déduit

$$X_l = \frac{2l + 1}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + \left(1 + \frac{2ik}{2l + 1} f_l \right) e^{ikr} \right] \quad (13.21)$$

La fonction $X_l(r)$ doit être asymptotiquement égale à $u_l(r)/r$ qui vaut, d'après (13.20)

$$\frac{u_l(r)}{r} \simeq \frac{a_l}{2ir} [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}] \quad (13.22)$$

L'égalité de (13.21) et (13.22) n'est possible que si

$$e^{2i\delta_l} = 1 + \frac{2ik}{2l + 1} f_l$$

soit

$$f_l = \frac{2l + 1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{2l + 1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (13.23)$$

Cette équation donne l'expression recherchée de $f(\theta)$ en fonction des déphasages

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (13.24)$$

On déduit la section efficace différentielle de (13.12) et la section efficace totale par intégration sur les angles, en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre déduite de (10.62) et de l'orthogonalité (10.55) des harmoniques sphériques

$$\int d\Omega P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l + 1} \delta_{ll'}$$

Le résultat pour σ_{tot} s'écrit

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \delta_l \quad (13.25)$$

La fonction

$$\boxed{S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}} \quad (13.26)$$

où nous avons explicité la dépendance en k , est appelée *élément de matrice S dans l'onde partielle l* , et joue un rôle important, que l'on peut comprendre en comparant les comportements (13.21) et (13.22) de l'onde sphérique libre $j_l(kr)$ et de la fonction d'onde en présence d'un potentiel

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\propto [(-1)^{l+1}e^{-ikr} + e^{ikr}] \\ u_l(r) &\propto [(-1)^{l+1}e^{-ikr} + e^{2i\delta_l}e^{ikr}] \end{aligned}$$

L'effet du potentiel est de multiplier la partie onde sphérique sortante par le facteur de phase $S_l = \exp(2i\delta_l)$, l'onde entrante n'étant pas affectée, ce qui résulte des conditions aux limites imposées. En effet l'onde plane incidente est composée d'une onde sphérique entrante et d'une onde sphérique sortante. La partie sortante est modifiée par la diffusion, car les particules sont diffusées par la cible et divergent à partir de celle-ci, mais ce n'est pas le cas de l'onde entrante qui n'est pas modifiée par l'interaction avec la cible. Nous montrerons au § 13.3.1 que la condition $|S_l| = 1$ rend compte du fait que le nombre de particules entrantes dans une sphère de grand rayon tracée autour de la cible est égal à celui des particules sortantes lorsque la diffusion est élastique.

Chaque terme de (13.25) correspond à la section efficace de diffusion dans l'onde partielle l . Évidemment l'identification de la contribution de chaque onde partielle n'est possible que pour la section efficace totale, car les diverses ondes partielles interfèrent dans la section efficace différentielle. On remarque que la contribution à la section efficace totale de chaque onde partielle est bornée

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \leq \sigma_l^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (13.27)$$

Donnons une interprétation semi-classique de ce résultat. Classiquement le moment angulaire $\hbar l$ et le paramètre d'impact sont reliés par $l = kb$ et par conséquent

$$\frac{l}{k} \leq b \leq \frac{l+1}{k}$$

La section efficace classique maximale est l'aire comprise entre les cercles de rayons l et $l+1$

$$\sigma_l \leq \frac{\pi}{k^2} [(l+1)^2 - l^2] = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) = \frac{1}{4} \sigma_l^{\max}$$

La section efficace *classique* est au maximum le quart de la section maximale quantique. Supposons que le potentiel ait une portée limitée : $V(r) = 0$ si $r > R$. Alors, d'un point de vue classique, une particule incidente ne pourra interagir que si son paramètre d'impact est inférieur à R : $b < R$, et seules les ondes partielles telles que $l \lesssim kR$ vont contribuer. On voit que la méthode des déphasages sera performante si l'énergie est faible, car dans ce cas seul

un nombre limité de déphasages vont contribuer. En particulier seule l'onde s ($l = 0$) va donner une contribution appréciable lorsque $k \rightarrow 0$. Une version plus précise de cet argument consiste à remarquer que la probabilité de présence $\propto r^2 j_l^2(kr)$ d'une onde sphérique libre est négligeable pour $kr \lesssim [l(l+1)]^{1/2}$ et cette onde ne pénètre pas dans les régions où le potentiel est important pour les petites valeurs de k , sauf si $l = 0$, auquel cas $r^2 j_0^2(kr) \propto \text{cste}$ si $r \rightarrow 0$. On montre rigoureusement⁸ que pour un potentiel de portée limitée le déphasage δ_l se comporte comme

$$\delta_l(k) \propto (kR)^{2l+1} \tag{13.28}$$

lorsque $k \rightarrow 0$, ou $l \rightarrow \infty$.

13.2.2 Diffusion à basse énergie

Lorsque le potentiel est de portée limitée, l'onde s sera la seule à contribuer de façon appréciable à la section efficace de basse énergie, et celle-ci sera par conséquent isotrope. Jusqu'à la fin de cette section, nous prendrons en compte uniquement l'onde $l = 0$ et nous utiliserons les notations $\delta_{l=0} = \delta(k)$, $S_{l=0}(k) = S(k)$, $f_{l=0}(k) = f(k)$, $u_{l=0}(r) = u(r)$. Compte tenu du comportement (13.28) pour $l = 0$, $\delta(k) \propto k$, on définit la *longueur de diffusion* a par

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(k)}{k} \tag{13.29}$$

Le signe $(-)$ est conventionnel et cette convention sera justifiée ci-dessous.

Comme exemple de calcul de déphasage et de longueur de diffusion, nous allons traiter le cas du puits sphérique (figure 13.4)

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ V(r) &= 0 & r > R \end{aligned}$$

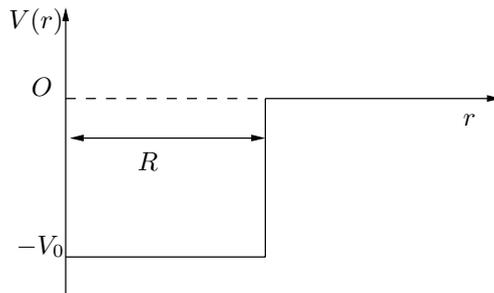


FIG. 13.4 – Puits sphérique.

8. Voir par exemple Messiah [1959], chapitre X.

Ce puits sphérique décrit approximativement la diffusion neutron-proton avec les paramètres suivants (exercices 10.7.8 et 13.5.3)

$$R \simeq 2 \text{ fm} \quad V_0 \simeq 26 \text{ MeV}$$

L'équation de Schrödinger radiale s'écrit

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right) u(r) = \frac{2m}{\hbar^2} E u(r) \quad (13.30)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} r > R & : \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) u(r) = 0 \\ r < R & : \left(\frac{d^2}{dr^2} + k'^2 \right) u(r) = 0 \end{aligned}$$

avec $k^2 = 2mE/\hbar^2$ et $k'^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$, d'où, en tenant compte de la condition $u(r=0) = 0$

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = C \sin(kr + \delta) \\ r < R & : u(r) = D \sin k'r \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée logarithmique de $u(r)$ à $r = R$ impose

$$k' \cot k'R = k \cot(kR + \delta) \quad (13.31)$$

L'équation

$$\cot x = i \frac{e^{2ix} + 1}{e^{2ix} - 1}$$

permet de déterminer l'élément de matrice S , $S(k)$; après un calcul sans difficulté on trouve

$$S(k) = e^{2i\delta(k)} = e^{-2ikR} \frac{\cos k'R + i \frac{k}{k'} \sin k'R}{\cos k'R - i \frac{k}{k'} \sin k'R} \quad (13.32)$$

L'expression donnant $S(k)$ est bien de module unité. Évidemment le déphasage n'est déterminé qu'à π près : pour avoir la « vraie » valeur du déphasage, il faudrait faire croître le potentiel de 0 à V_0 et suivre l'évolution de δ entre zéro et sa valeur finale.

Comme dans le cas unidimensionnel (*cf.* § 9.3.4), *il existe une relation remarquable entre la matrice S et les états liés*. Posons en effet $k = i\kappa$ (on verra dans un instant qu'il faut choisir $k = i\kappa$, $\kappa > 0$, et non $k = -i\kappa$). La fonction $S(k)$ a des pôles pour

$$\cos k'R + \frac{\kappa}{k'} \sin k'R = 0 \quad (13.33)$$

mais cette équation est précisément celle qui détermine les états liés. En effet la fonction d'onde d'un état lié d'énergie $E = -B < 0$ est donnée par

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = Ce^{-\kappa r} \\ r < R & : u(r) = D \sin k' r \end{aligned}$$

avec $\kappa = (2mB/\hbar^2)^{1/2}$, $k' = [2m(V_0 + B)]^{1/2}/\hbar$, et la continuité de la dérivée logarithmique à $r = R$ s'écrit

$$-\kappa = k' \cot k' R \quad (13.34)$$

ce qui est exactement l'équation donnant les pôles de $S(k)$. Le résultat est général pour les potentiels décroissant suffisamment vite à l'infini et il est valable pour toute onde partielle : les pôles de $S_l(k)$ pour $k = i\kappa$ donnent la position des états liés dans l'onde partielle l .

Il est facile de déduire la longueur de diffusion de (13.31) ; cette équation s'écrit aussi

$$\tan(kR + \delta) = \frac{k}{k'} \tan k' R$$

Dans la limite $k \rightarrow 0$, $kR \rightarrow 0$, $\delta \rightarrow 0$ et $k' \rightarrow k_0 = (2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$, d'où

$$kR + \delta(k) \simeq \frac{k}{k_0} \tan k_0 R$$

soit

$$\delta(k) \simeq -k \left(R - \frac{\tan k_0 R}{k_0} \right)$$

ce qui donne d'après la définition (13.29)

$$a = R \left(1 - \frac{\tan k_0 R}{k_0 R} \right) \quad (13.35)$$

Un autre cas particulier intéressant est celui de la diffusion par une sphère dure : $V(r) = 0$ si $r > R$ et $V(r) = +\infty$ si $r < R$. La fonction d'onde radiale $u(r)$ doit s'annuler à $r = R$

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = C \sin(kR + \delta) \\ r < R & : u(r) = 0 \end{aligned}$$

et donc $kR + \delta = n\pi$ et pour k suffisamment petit

$$\delta = -kR \quad a = R \quad (13.36)$$

Le signe $(-)$ dans la définition (13.29) a été choisi de sorte que la longueur de diffusion d'une sphère dure soit $+R$ et non $-R$. L'étude qualitative du comportement de $u(r)$ dans la figure 13.5 montre que $a > 0$ pour tout potentiel répulsif. La situation est plus complexe pour un potentiel attractif. Lorsqu'il

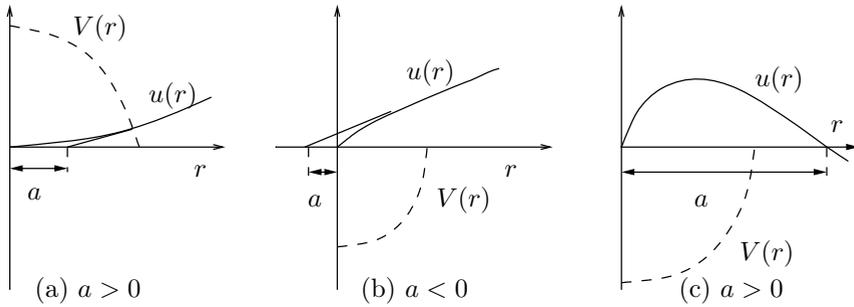


FIG. 13.5 – Comportement de la fonction d'onde et de la longueur de diffusion pour différents potentiels. (a) Potentiel répulsif (b) Potentiel attractif sans état lié (c) Potentiel attractif avec un seul état lié.

n'existe pas d'état lié, un potentiel attractif donne une longueur de diffusion négative. L'apparition d'un état lié change le signe de a , qui devient positif. Le signe change à nouveau avec l'apparition d'un second état lié, etc. Ceci est confirmé par (13.35) : la condition d'apparition d'un premier état lié est $k_0 R = \pi/2$ et la longueur de diffusion est négative pour $0 < k_0 R < \pi/2$. Elle devient infinie lorsque $k_0 R = \pi/2$, positive lorsque $k_0 R > \pi/2$ et le reste pour $\pi/2 < k_0 R < 3\pi/2$. L'apparition d'un second état lié correspond à $k_0 R = 3\pi/2$, et la longueur de diffusion devient à nouveau négative au-delà de cette valeur après être passée à nouveau par une valeur infinie. Une longueur de diffusion grande et positive signale la présence d'un état lié de faible énergie et si elle est grande et négative, elle signale la proximité de l'apparition d'un état lié : on dit parfois qu'il existe un état anti-lié ou virtuel.

La section efficace de basse énergie est isotrope d'après (13.12), et la section efficace totale est

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2 \quad (13.37)$$

Il est intéressant de remarquer que la section efficace quantique d'une sphère dure ($a = R$) est quatre fois la section efficace classique πR^2 . La mesure de la section efficace totale ne donne que la valeur absolue de a . Or le *signe* de la longueur de diffusion est une donnée importante : par exemple le potentiel effectif que nous allons définir au paragraphe suivant est attractif pour $a < 0$ et répulsif pour $a > 0$, ce qui a des conséquences directes par exemple sur la possibilité de former des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux (section 14.4). Un autre cas important est celui de la diffusion neutron-proton (§ 13.2.4).

La forme de basse énergie $\delta(k) \simeq -ka$ est en fait le premier terme d'un développement du déphasage en fonction de k^2 . L'exercice 13.5.3 montre que la fonction $k \cot \delta(k)$ est une fonction analytique⁹ de k^2 dont on peut écrire

9. Si $V(r)$ décroît au moins aussi vite que $\exp(-\mu r)$. L'équation (13.38) est valable pourvu que $V(r)$ décroisse au moins comme r^{-5} .

le développement de Taylor pour $k^2 \rightarrow 0$

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4) \quad (13.38)$$

La longueur r_0 est appelée *portée effective*. On utilise souvent la forme de basse énergie de l'amplitude de diffusion

$$f(k) = \frac{e^{2i\delta(k)} - 1}{2ik} = \frac{1}{k[\cot \delta(k) - i]}$$

soit, en exprimant $\cot \delta(k)$ en fonction de a si $r_0 k \ll 1$

$$\boxed{f(k) = \frac{-a}{1 + ika}} \quad (13.39)$$

Cette forme peut être rendue plus précise si l'on utilise l'approximation de portée effective (13.38)

$$f(k) = \frac{-a}{1 + ika - \frac{1}{2} r_0 a k^2} \quad (13.40)$$

13.2.3 Potentiel effectif

La longueur de diffusion permet d'introduire la notion très utile de potentiel effectif. Lorsque l'on considère un système de particules de basse énergie, il est très commode de pouvoir remplacer le potentiel réel $V(r)$ par un potentiel $V_{\text{eff}}(r)$ plus simple, appelé *potentiel effectif*, qui donne les mêmes résultats pour la diffusion de basse énergie. Ce potentiel effectif est utilisé par exemple dans le traitement théorique de la diffusion de neutrons de basse énergie ou des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux (section 14.4). Nous allons montrer que la diffusion de basse énergie est reproduite en choisissant un potentiel effectif proportionnel à une fonction δ

$$V_{\text{eff}}(r)\psi(r) = g\delta(\vec{r}) \frac{d}{dr} (r\psi(r)) \quad (13.41)$$

où g est une constante à déterminer. Pour justifier ce potentiel et déterminer g , examinons l'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde $\psi(r) = u(r)/r$. L'expression du laplacien appliqué à une fonction de r

$$\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf(r)) \quad (13.42)$$

n'est valable que pour une fonction $f(r)$ régulière à $r = 0$, tandis que pour $f(r) \propto 1/r$ on utilise l'équation familière en électrostatique

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r}) \quad (13.43)$$

Examinons l'équation de Schrödinger en prenant comme potentiel (13.41)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \frac{u(r)}{r} + V_{\text{eff}}(r) \frac{u(r)}{r} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{u(r)}{r}$$

et écrivons le terme d'énergie cinétique

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{u(r)}{r} &= \nabla^2 \left[\frac{u(r) - u(0)}{r} \right] + u(0) \nabla^2 \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \left[\frac{u(r) - u(0)}{r} \right] - 4\pi u(0) \delta(\vec{r}) = \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - 4\pi u(0) \delta(\vec{r}) \end{aligned}$$

où nous avons remarqué que $[u(r) - u(0)]/r$ est une fonction régulière à $r = 0$. En outre, si l'on écrit

$$u(r) = a + br + cr^2 + \dots$$

alors

$$\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2} = \frac{2c}{r} + \dots$$

et l'intégrale de ce terme dans une sphère de rayon R autour de l'origine tend vers zéro avec R . Nous avons donc

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{u(r)}{r} = \left[-\frac{4\pi \hbar^2}{2m} u(0) - gu'(0) \right] \delta(\vec{r})$$

Les deux membres de l'équation précédente doivent s'annuler séparément, ce qui implique, pour le membre de gauche

$$u(r) = C \sin(kr + \delta(k)) \quad r > 0$$

et donc $u'(0)/u(0) = k \cot \delta(k)$. L'annulation du coefficient de $\delta(\vec{r})$ impose

$$-\frac{2\pi \hbar^2}{m} = gk \cot \delta(k)$$

et la limite $k \rightarrow 0$ de cette équation permet de relier¹⁰ g et a

$$\boxed{g = \frac{2\pi \hbar^2}{m} a \quad V_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{2\pi \hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r}) \frac{d}{dr} r} \quad (13.44)$$

Le potentiel effectif dépend d'un seul paramètre, la longueur de diffusion a , que l'on prend bien sûr égale à celle d'un potentiel plus réaliste ou tout simplement

10. Il faut se rappeler que, si l'on considère la diffusion de particules identiques de masse M , la masse réduite $m = M/2$ et

$$g = \frac{4\pi \hbar^2}{M} a$$

de l'expérience. Examinons aussi les états liés du potentiel effectif. La fonction d'onde radiale de cet état lié doit être de la forme

$$u(r) = Ce^{-\kappa r}$$

et par conséquent $u'(0)/u(0) = -\kappa$. On en déduit une relation entre l'énergie de liaison B et la longueur de diffusion

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mB}{\hbar^2}} = \frac{2\pi\hbar^2 g}{m} = \frac{1}{a} \quad (13.45)$$

L'état lié du potentiel effectif est unique, et on retrouve le fait que $a > 0$ si l'on veut un état lié et un seul. En résumé, un potentiel effectif tel que $a > 0$ correspond aussi bien à une sphère dure qu'à un potentiel attractif possédant un seul état lié. Ces deux potentiels donneront le même comportement pour un ensemble de particules de basse énergie, alors que le comportement sera différent si $a < 0$: c'est le *signe* de la longueur de diffusion qui est crucial. La fonction $k \cot \delta(k)$ est une constante

$$k \cot \delta(k) = -\frac{2\pi\hbar^2}{mg} = -\frac{1}{a}$$

et l'amplitude de diffusion du potentiel effectif est donnée *exactement* par (13.39)

$$f_{\text{eff}}(k) = \frac{-a}{1 + ika}$$

13.2.4 Diffusion neutron-proton à basse énergie

La diffusion neutron-proton à basse énergie fournit une illustration d'une grande importance pratique du formalisme que nous venons de développer, l'autre application importante étant celle aux condensats de Bose-Einstein. Le proton et le neutron sont des particules de spin $1/2$, et comme la diffusion dépend du spin, nous devons généraliser les résultats précédents pour en tenir compte. Dans la diffusion à basse énergie, le spin total \vec{S}_{tot} est conservé. En effet le moment angulaire orbital est nul, puisque la diffusion se fait dans l'onde s , et la conservation du moment angulaire total est équivalente à celle du spin total. L'amplitude de diffusion peut s'écrire comme un opérateur \hat{f} agissant dans l'espace \mathcal{H} à quatre dimensions, produit tensoriel des espaces des états des deux spins $1/2$, en fonction des projecteurs $\mathcal{P}_s = \mathcal{P}_0$ et $\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_1$ sur les états singulet (spin total zéro) et triplet (spin total un) donnés en (10.128)

$$\hat{f}(k) = f_s(k)\mathcal{P}_s + f_t(k)\mathcal{P}_t$$

Cette écriture de \hat{f} assure que le spin total est inchangé dans la diffusion : un état singulet reste singulet et un état triplet reste triplet. Nous allons nous limiter au cas $ka \ll 1$, et d'après (13.39)

$$f_s(k) = -a_s \quad f_t(k) = -a_t$$

où a_s et a_t sont les longueurs de diffusion dans l'état singulet et l'état triplet. Lorsque la condition $ka \ll 1$ n'est pas satisfaite, il est possible d'utiliser des expressions analogues à (13.39), ou mieux (13.40), pour $f_s(k)$ et $f_t(k)$, en faisant intervenir les portées effectives r_{0s} et r_{0t} . En résumé, à l'approximation où $ka \ll 1$

$$\hat{f} = -a_s \mathcal{P}_s - a_t \mathcal{P}_t \quad (13.46)$$

ou encore, en introduisant les matrices de Pauli $\vec{\sigma}_p$ et $\vec{\sigma}_n$ agissant dans l'espace des états de spin du proton et du neutron

$$-\hat{f} = \hat{a} = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)\vec{\sigma}_p \cdot \vec{\sigma}_n \quad (13.47)$$

La section efficace différentielle est isotrope et la section efficace totale pour un état de spin initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$ est

$$\sigma_{fi} = 4\pi |\langle f|\hat{a}|i\rangle|^2 \quad (13.48)$$

Si on ne mesure pas les spins finaux et si l'état initial est un mélange où l'on connaît seulement la probabilité \mathbf{p}_i de trouver les spins initiaux dans l'état $|i\rangle$, il faut sommer sur les états $|f\rangle$ et les probabilités \mathbf{p}_i

$$\begin{aligned} \sigma &= 4\pi \sum_i \mathbf{p}_i \sum_f \langle i|\hat{a}|f\rangle \langle f|\hat{a}|i\rangle \\ &= 4\pi \sum_i \mathbf{p}_i \langle i|\hat{a}^2|i\rangle = 4\pi \text{Tr}(\rho_{\text{init}} \hat{a}^2) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture dans \mathcal{H} , $\sum_f |f\rangle \langle f| = I$, et la définition de l'opérateur statistique de l'état initial

$$\rho_{\text{init}} = \sum_i \mathbf{p}_i |i\rangle \langle i|$$

Le cas le plus fréquent est celui où l'état initial est non polarisé : les états $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-\rangle$ et $|--\rangle$ ont même probabilité. Dans ce cas $\rho_{\text{init}} = I/4$ et

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{non pol}} &= \pi \text{Tr} \hat{a}^2 = \pi \text{Tr} (a_s^2 \mathcal{P}_s + a_t^2 \mathcal{P}_t) \\ &= 4\pi \left(\frac{1}{4} a_s^2 + \frac{3}{4} a_t^2 \right) = \frac{1}{4} \sigma_s + \frac{3}{4} \sigma_t \end{aligned} \quad (13.49)$$

L'interprétation physique est immédiate : si l'état initial est non polarisé, la probabilité d'avoir un état singulet est de $1/4$ et celle d'avoir un état triplet de $3/4$, ce qui donne les poids $1/4$ et $3/4$ aux sections efficaces singulet et triplet dans (13.49).

La section efficace non polarisée ne donne accès qu'à la combinaison $a_s^2 + 3a_t^2$ des longueurs de diffusion. Une information supplémentaire vient de l'existence d'un état lié dans l'état triplet, le deutéron, ce qui permet de

déterminer approximativement a_t . Une relation précise entre les paramètres du deutéron et ceux de la diffusion à basse énergie dans l'état triplet est établie dans l'exercice 13.5.3, à l'approximation de la portée effective. Une relation approchée est obtenue en remarquant que la fonction d'onde du deutéron s'étend très au-delà de la portée du potentiel, $\kappa^{-1} \gg R$, ce qui permet d'utiliser un potentiel effectif et la relation (13.45). Compte tenu de $B \simeq 2.22$ MeV, on trouve $\kappa^{-1} \simeq 4.2$ fm, alors que la valeur exacte de a_t est de 5.4 fm, mais l'argument suffit pour déterminer le signe de a_t : $a_t > 0$.

La connaissance de a_t à partir des paramètres du deutéron et la mesure de la section efficace non polarisée permettent de déterminer le module $|a_s|$ de la longueur de diffusion dans l'état singulet, mais pas son signe. Une méthode possible pour déterminer le signe de a_s est la diffusion de neutrons sur une molécule d'hydrogène, étudiée à l'exercice 13.5.2, qui montre que la longueur de diffusion a_s est négative, en accord avec le fait qu'il n'existe pas d'état lié singulet. Les valeurs expérimentales des longueurs de diffusion et des portées effectives sont

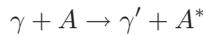
$$a_t = 5.40 \text{ fm} \quad r_{0t} = 1.73 \text{ fm} \quad a_s = -23.7 \text{ fm} \quad r_{0s} = 2.5 \text{ fm}$$

On constate que a_s est grande et négative, et le système neutron-proton dans l'état singulet est très proche de la formation d'un état lié : il existe un état virtuel.

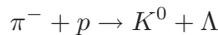
13.3 Diffusion inélastique

13.3.1 Théorème optique

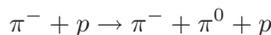
En règle générale, dans une collision, les particules peuvent non seulement être diffusées élastiquement, mais aussi inélastiquement ; par exemple la diffusion d'un photon sur un atome A dans son état fondamental E_0 peut laisser l'atome dans un niveau excité A^* d'énergie E_1



le photon final ayant perdu une énergie ($E_1 - E_0$) par rapport au photon initial (si l'on néglige le recul de l'atome). Il est même possible que les particules finales soient différentes des particules initiales, comme dans



ou



Dans le cas de la diffusion élastique, nous avons vu que $|S_l(k)| = 1$. Nous allons montrer qu'il est possible de généraliser l'expression de l'amplitude diffusion $f(\Omega)$ au cas inélastique à condition d'admettre que $|S_l(k)| \leq 1$.

Cette condition découle de ce que le module de l'amplitude de l'onde sortante doit être plus petit que celui de l'onde entrante : le nombre de particules N_{in} entrant dans une sphère de grand rayon r tracée autour de la cible doit être supérieur à celui N_{out} qui en sort, puisque les particules incidentes peuvent seulement *disparaître* dans la diffusion inélastique. Comme nous le montrons ultérieurement, cette inégalité vaut pour toute onde partielle : $N_{\text{out}}^l \leq N_{\text{in}}^l$, car l'intégration sur la surface de la sphère élimine les interférences entre ondes partielles. Si la diffusion est purement élastique dans l'onde l , $N_{\text{in}}^l = N_{\text{out}}^l$ et $|S_l(k)| = 1$. Évaluons N_{in}^l et N_{out}^l en revenant à l'expression asymptotique $r \rightarrow \infty$ (13.22) de la fonction d'onde. Comme dans la diffusion élastique, seul le terme d'onde sortante peut être modifié

$$\frac{e^{ikr}}{r} \rightarrow S_l(k) \frac{e^{ikr}}{r}$$

d'où le comportement asymptotique de $\psi(\vec{r})$

$$\psi \simeq \frac{iA}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr}]$$

ce qui donne pour $f(\theta)$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (S_l - 1)$$

La section efficace élastique totale vaut

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\Omega |f(\theta)|^2$$

et le résultat de l'intégration sur Ω généralise (13.25)

$$\boxed{\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_l|^2} \quad (13.50)$$

Calculons le nombre de particules entrantes dans l'onde partielle l , N_{in}^l , en intégrant le courant entrant sur la surface d'une sphère de rayon $r \rightarrow \infty$ autour de la cible. Comme les polynômes de Legendre sont orthogonaux, il n'y a pas de termes d'interférences entre les différentes ondes partielles. On trouve

$$N_{\text{in}}^l = \left[\frac{(2l+1)^2 |A|^2}{4k^2} \right] \left[\frac{2}{2l+1} \right] \left[\frac{\hbar k}{m} \right] [2\pi] = \frac{\pi \hbar (2l+1) |A|^2}{mk}$$

Le premier terme vient de la normalisation de $|\psi|^2$, le second de la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre, le troisième de l'expression du

courant de l'onde entrante et le dernier de l'intégration sur ϕ . Un calcul analogue donne N_{out}^l

$$N_{\text{out}}^l = \frac{\pi \hbar (2l + 1) |A|^2}{mk} |S_l|^2$$

La condition $N_{\text{out}}^l \leq N_{\text{in}}^l$ implique que $|S_l| \leq 1$. La section efficace inélastique dans l'onde partielle l n'est autre, au facteur de flux $\mathcal{F} = \hbar k |A|^2 / m$ près, que la différence entre le nombre de particules entrantes et celui de particules sortantes

$$\sigma_{\text{inel}}^l = \frac{1}{\mathcal{F}} (N_{\text{in}}^l - N_{\text{out}}^l) = \frac{\pi \hbar (2l + 1) |A|^2}{k^2} (1 - |S_l|^2)$$

et la section efficace inélastique totale vaut

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (1 - |S_l|^2) \quad (13.51)$$

Si $N_{\text{in}}^l = N_{\text{out}}^l$, le nombre de particules sortantes est égal au nombre de particules entrantes, la diffusion est élastique dans l'onde partielle l et $|S_l(k)| = 1$, $S_l(k) = \exp[2i\delta_l(k)]$. La condition $|S_l| \leq 1$ entraîne comme il se doit $\sigma_{\text{inel}}^l \geq 0$. La somme des sections efficaces élastique et inélastique est la section efficace totale

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (1 - \text{Re } S_l) \quad (13.52)$$

La présence de voies inélastiques implique que $(1 - S_l) \neq 0$, et *on ne peut donc pas avoir en physique quantique de diffusion purement inélastique*, alors qu'en physique classique des particules peuvent être envoyées sur des cibles parfaitement absorbantes, sans diffusion élastique. Si l'absorption est totale dans une onde partielle l , ce qui correspond à $N_{\text{out}}^l = 0$ et donc à $S_l = 0$, alors

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{inel}}^l = \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) \quad (13.53)$$

Par comparaison, la section efficace élastique maximale est

$$\sigma_{\text{el,max}}^l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1)$$

Une conséquence importante de l'intrication entre diffusions élastique et inélastique est le théorème optique. Calculons la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant¹¹, $\text{Im}f(\theta = 0)$ en utilisant $P_l(1) = 1$

$$\text{Im}f(\theta = 0) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (1 - \text{Re} S_l)$$

11. Cette quantité ne peut pas être mesurée directement, car vers l'avant on trouve principalement les particules incidentes qui n'ont pas subi de collision. Il faut prendre la limite $\theta \rightarrow 0$ de $f(\theta)$. Voir aussi la note 4.

et si l'on compare avec l'expression (13.52) de σ_{tot}

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\theta = 0)} \quad (13.54)$$

Cette relation est le *théorème optique*, qui relie la section efficace totale à la partie imaginaire de la diffusion vers l'avant. La démonstration du théorème met en évidence qu'il découle de la conservation de la probabilité.

13.3.2 Potentiel optique

On peut rendre compte de la diffusion inélastique en introduisant un potentiel complexe dans l'équation de Schrödinger. En effet si l'on reprend la démonstration du § 9.2.2 de l'équation de continuité du courant $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ dans le cas d'une onde stationnaire $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, on s'aperçoit que cette équation n'est pas satisfaite si le potentiel est complexe

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \quad (13.55)$$

On retrouve naturellement le résultat $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ dans le cas du potentiel réel utilisé au § 9.2.2. Le nombre de particules absorbées par unité de temps est égal au flux incident multiplié par la section efficace inélastique. Pour calculer le nombre de particules absorbées, entourons la cible par une sphère de grand rayon et calculons le flux de \vec{j} à travers la surface \mathcal{S} de cette sphère

$$- \int_{\mathcal{S}} \vec{j} \cdot d\vec{S} = - \int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3r = - \frac{2}{\hbar} \int_{\mathcal{V}} \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r$$

où \mathcal{V} est le volume de la sphère et le signe $(-)$ correspond au fait que $d\vec{S}$ est orienté vers l'extérieur. On a donc

$$\sigma_{\text{in}} = - \frac{2m}{\hbar^2 k} \int \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r \quad (13.56)$$

où nous avons intégré sur tout l'espace car le potentiel est supposé de portée finie ou s'annulant suffisamment vite à l'infini. Dans cette section, et jusqu'à la fin du chapitre, le potentiel $V(\vec{r})$ est quelconque : il n'est pas nécessairement invariant par rotation. L'équation (13.56) implique que la partie imaginaire de $V(\vec{r})$ doit être négative : $\operatorname{Im} V(\vec{r}) \leq 0$. Le potentiel complexe de partie imaginaire négative $V(\vec{r})$ est appelé *potentiel optique*. Ce potentiel est utile lorsque l'on ne s'intéresse pas aux détails des processus inélastiques, mais seulement à leur répercussion sur les processus élastiques. Il est en particulier très largement utilisé dans la diffusion neutron-noyau. À basse énergie on pourra représenter ce potentiel complexe par un potentiel effectif du type (13.41) avec une longueur de diffusion complexe $a = a_1 + ia_2$, $a_2 < 0$. Dans ces conditions $\operatorname{Im} f = -a_2$ et la section efficace totale est très grande par rapport à la

section efficace élastique

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq \sigma_{\text{in}} \simeq \frac{4\pi}{k} |a_2| \gg \sigma_{\text{el}} = 4\pi a_1^2$$

La proportionalité de σ_{in} à $1/k$, ou bien à $1/v$, où v est la vitesse des neutrons incidents, est un résultat d'une très grande importance : la section efficace d'absorption des neutrons lents croît en $1/v$ quand $v \rightarrow 0$. Ceci entraîne par exemple que l'on doit ralentir les neutrons pour obtenir des sections efficaces importantes de fission de l'uranium dans un réacteur nucléaire. Un autre exemple est l'utilisation du cadmium pour absorber les neutrons : la longueur de diffusion est complexe, avec $a_1 = -3.8$ fm et $a_2 = -1.2$ fm.

Récrivons le théorème optique en utilisant (13.56)

$$\text{Im } f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \int |f(\Omega)|^2 d\Omega - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \text{Im } V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r \quad (13.57)$$

Cette équation peut être généralisée¹². Définissons l'amplitude de diffusion $f(k\hat{r}, \vec{k})$ à partir de la solution (13.9) $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Comme le potentiel n'est pas supposé invariant par rotation, l'amplitude de diffusion dépend de \hat{r} et de \vec{k} , et pas uniquement de k et de l'angle entre \hat{r} et \hat{k} . On montre alors la relation d'unitarité

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i} [f(\vec{k}', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}')] &= \frac{k}{4\pi} \int f^*(k\hat{r}, \vec{k}') f(k\hat{r}, \vec{k}) d^2\hat{r} \\ &- \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \text{Im } V(\vec{r}) [\psi_{\vec{k}'}^{(+)}(\vec{r})]^* \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) d^3r \quad (13.58) \end{aligned}$$

L'invariance par renversement du sens du temps implique $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}')$ et celle par parité $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}', -\vec{k})$. Si ces deux invariances sont valides, $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\vec{k}, \vec{k}')$ et

$$\frac{1}{2i} [f(\vec{k}', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}')] = \text{Im } f(\vec{k}', \vec{k})$$

dans (13.58). On retrouve alors (13.57) en prenant $\vec{k}' = \vec{k}$.

13.4 Développements formels

13.4.1 Équation intégrale de la diffusion

Nous allons reprendre dans cette section quelques points que nous avons laissés dans l'ombre jusqu'à présent, afin de clarifier certains des arguments

12. Voir par exemple Landau et Lifschitz [1966], § 124.

précédents. Nous allons d'abord démontrer une équation, l'équation intégrale de la diffusion, qui nous permettra de justifier l'expression asymptotique (13.10), mais se révèle également utile dans d'autres développements de la théorie de la diffusion. La démonstration repose sur l'expression des *fonctions de Green* $G(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger lorsque $V = 0$, qui vérifient

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad (13.59)$$

De façon générale les fonctions de Green G d'une équation d'onde $\mathcal{L}\psi = 0$ sont définies par $\mathcal{L}G = \delta(\vec{r})$ (section 12.1). La solution de ce type d'équation n'est pas unique et la forme précise de la fonction de Green que l'on doit utiliser pour un problème donné est fixée par des conditions aux limites. Nous aurons besoin des fonctions de Green $G^{(\pm)}(\vec{r})$ ayant un comportement d'onde sphérique sortante pour $G^{(+)}(\vec{r})$ et entrante pour $G^{(-)}(\vec{r})$. Ces fonctions de Green sont données par ¹³

$$G^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (13.60)$$

La vérification de (13.59) est immédiate

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \nabla^2 \left[\frac{e^{\pm ikr} - 1}{r} \right] + \nabla^2 \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} e^{\pm ikr} - 4\pi\delta(\vec{r}) \\ &= -k^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} - 4\pi\delta(\vec{r}) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que la fonction $(\exp(ikr) - 1)/r$ est régulière à $r = 0$ et (13.42).

Examinons le comportement de la fonction $G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}')$ lorsque $r \rightarrow \infty$ tandis que r' reste fini. Dans cette limite

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + O\left(\frac{r'^2}{r}\right)$$

et nous obtenons, en définissant $\vec{k}' = k\hat{r}$

$$G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi r} = -\frac{e^{ikr} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{4\pi r} + O\left(k \frac{r'^2}{r^2}\right) \quad (13.61)$$

ce qui montre que $G^{(+)}$ a bien un comportement d'onde sphérique sortante. La fonction $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ définie de façon implicite par

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3 r'} \quad (13.62)$$

13. Toute combinaison $\lambda G^{(+)} + (1 - \lambda)G^{(-)} + G_h$, où G_h est solution de l'équation d'ondes homogène, vérifie également (13.59).

obéit à l'équation de Schrödinger. En effet, en utilisant (13.59)

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

L'équation (13.62) est appelée *équation intégrale de la diffusion*. Le point essentiel est que $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ a bien le comportement asymptotique (13.9). En effet, en utilisant (13.61) et (13.62) pour $r \rightarrow \infty$

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3r' \quad (13.63)$$

On identifie immédiatement l'amplitude de diffusion $f(\Omega)$ à partir de (13.9)

$$f(\Omega) = f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3r' \quad (13.64)$$

Cette équation est *exacte*, mais bien sûr il faut connaître $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$, et on ne peut pas se dispenser de la résolution de l'équation de Schrödinger ! On peut résoudre (13.63) de façon approchée par itération, la première itération étant

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

En reportant dans (13.64) on obtient $f(\vec{k}', \vec{k})$ à l'*approximation de Born*

$$\boxed{f_B(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) d^3r} \quad (13.65)$$

Le vecteur $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ est le transfert de vecteur d'onde, $\hbar\vec{q}$ la *transfert d'impulsion* et f_B est la transformée de Fourier du potentiel par rapport à \vec{q} . On note que

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

et que f_B ne dépend que de la combinaison $k \sin(\theta/2)$ de k et de θ si le potentiel est à symétrie sphérique. Cette particularité est bien sûr spécifique de l'approximation de Born. Les critères de validité de l'approximation de Born sont délicats à énoncer de façon précise : en gros il faut que l'énergie soit grande ou que le potentiel soit faible. Dans le cas de la diffusion coulombienne, l'approximation de Born donne le résultat exact pour la *section efficace* (mais non pour l'amplitude !) à toute énergie, très en dehors de son domaine théorique de validité (exercice 13.5.4).

13.4.2 Diffusion d'un paquet d'ondes

Un deuxième point qu'il est nécessaire de justifier est l'utilisation d'un formalisme stationnaire, alors que la diffusion d'une particule est fondamentalement un processus dépendant du temps ; il nous faut donc étudier la diffusion d'un paquet d'ondes. Nous supposons le paquet d'ondes centré autour

d'une impulsion $\hbar\vec{k}_0$ avec une dispersion $\Delta k \ll k_0$, et nous supposons aussi que la dimension $\Delta r \sim 1/\Delta k$ du paquet d'ondes est très petite par rapport aux distances caractéristiques de l'expérience, par exemple la distance cible-détecteur. Le paquet d'ondes libre s'écrit sous une forme qui généralise (9.44) à trois dimensions

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) \exp \left[i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t \right] \quad (13.66)$$

avec $\omega_k = \hbar k^2/(2m)$, la fréquence moyenne étant $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$. Nous avons montré au § 9.1.5 que si la condition $(\Delta k)^2 \hbar t/m \ll 1$ était vérifiée (ce qui est pratiquement toujours le cas) on pouvait alors négliger l'étalement du paquet d'ondes et (13.66) sous la forme (9.51) généralisée à trois dimensions (avec les changements de notations $\vec{k} \rightarrow k_0$, $v_g \rightarrow v_0$) devient

$$\varphi(\vec{r}, t) \simeq e^{i\omega_0 t} \varphi(\vec{r} - \vec{v}_0 t, t = 0) \quad (13.67)$$

où la vitesse de groupe $\vec{v}_0 = \hbar\vec{k}_0/m$. Ceci implique que $|\varphi(\vec{r}, t)|$ est négligeable si $|\vec{r} - \vec{v}_0 t| \gg \Delta r$, c'est-à-dire si $|\vec{r} - \vec{v}_0 t|$ est grand par rapport à l'extension Δr du paquet d'ondes. La fonction d'onde dépendant du temps $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t)$ en présence du potentiel $V(\vec{r})$ s'obtient en remplaçant dans l'expression (13.66) du paquet d'ondes l'onde plane $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$. L'expression ainsi obtenue est en effet solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps en présence du potentiel $V(\vec{r})$, avec un comportement d'onde sphérique sortante. Décomposons la fonction d'onde $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t)$ en une partie libre et une partie diffusée

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) + \psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t)$$

Lorsque le paquet d'ondes est loin de la cible, on peut remplacer $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ par sa forme asymptotique (13.63)

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

et donc

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\omega_k t}$$

Supposons que $f(k\hat{r}, \vec{k})$ varie suffisamment lentement¹⁴ avec \vec{k} . Dans ces conditions

$$f(k\hat{r}, \vec{k}) \simeq f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)$$

et la partie diffusée est

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) \exp[i(kr - \omega_k t)] \quad (13.68)$$

14. En présence d'une résonance, il peut arriver que cette condition ne soit pas vérifiée.

On remarque ensuite que

$$k = [(\vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0))^2]^{1/2} = k_0 + \hat{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right) = \hat{k}_0 \cdot \vec{k} + O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right)$$

Comme le temps caractéristique $t \sim r/v_0 = mr/(\hbar k_0)$

$$\frac{(\Delta k)^2 r}{k_0} \simeq \frac{(\Delta k)^2 \hbar t}{m} \ll 1$$

et on peut remplacer kr dans (13.68) par $r\hat{k}_0 \cdot \vec{k}$ ce qui donne

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi(r\hat{k}_0, t) \simeq \frac{f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0] e^{i\omega_0 t}$$

Lorsque t est grand et négatif, $|(r - v_0 t)| \gg \Delta r$ et comme $\varphi(r', 0)$ est négligeable pour $r' \gg \Delta r$, $\psi_{\text{diff}} \rightarrow 0$ et le paquet d'ondes tend vers un paquet d'ondes libre : tant que le paquet d'ondes n'a pas de recouvrement avec le potentiel, ψ_{diff} est pratiquement nul

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t)$$

Le paquet d'ondes interagit avec la cible pour $t \sim 0$ et lorsque $t \rightarrow +\infty$

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0] e^{i\omega_0 t}$$

On retrouve le paquet d'ondes dans une direction différente de la direction initiale, modulé par l'amplitude de diffusion $f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)$ et se propageant radialement avec une vitesse v_0 .

Nous pouvons maintenant calculer la probabilité dp de déclenchement d'un détecteur de surface $dS = r^2 d\Omega$ placé dans la direction \vec{r} . Comme le courant à l'instant t est $v_0 |\psi_{\text{diff}}|^2 \hat{r}$, la probabilité de déclencher le détecteur est

$$\begin{aligned} dp &= v_0 r^2 d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t)|^2 dt \\ &= v_0 d\Omega |f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]|^2 dt \end{aligned}$$

Par ailleurs la probabilité pour que la particule incidente traverse une surface unité perpendiculaire au faisceau incident est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0 t)\hat{k}_0, 0]|^2 dt$$

et on déduit de la définition (13.1) de la section efficace

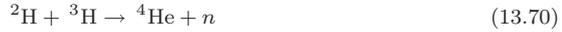
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k_0 \hat{r}, \vec{k}_0)|^2 = |f(\Omega)|^2 \tag{13.69}$$

ce qui complète la justification de (13.12).

13.5 Exercices

13.5.1 Pic de Gamow

1. On se propose d'évaluer la section efficace de la réaction



à l'intérieur d'une étoile où règne une température de l'ordre de 10^7 K. Cette réaction particulière a été choisie pour fixer les idées, mais ce qui suit s'applique à toute réaction nucléaire dans une étoile. Montrer que l'énergie cinétique des noyaux incidents ${}^2\text{H}$ et ${}^3\text{H}$ est de l'ordre du keV. Pourquoi les atomes sont-ils complètement ionisés ? En physique nucléaire la relation suivante est souvent utile : dans un système d'unités où $\hbar = c = 1$, la relation entre le fermi et le MeV s'écrit

$$1 \text{ fm}^{-1} \simeq 200 \text{ MeV}$$

Vérifier cette relation. Le potentiel $V(r)$ entre les deux noyaux incidents est le potentiel coulombien répulsif $V(r) = e^2/r$ pour $r > R$ et un potentiel nucléaire attractif pour $r \leq R$, avec $R \simeq 1 \text{ fm}$. Montrer que e^2/R est très grand par rapport à l'énergie cinétique E des noyaux incidents.

2. Montrer qu'en physique classique les deux noyaux ne peuvent pas s'approcher à une distance plus faible que $r_0 = e^2/E$, et la réaction nucléaire (13.70) ne peut se produire. En physique quantique, la réaction est possible grâce à l'effet tunnel. En utilisant (12.109), montrer que la probabilité d'effet tunnel est

$$p_T(E) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_0} \left[2\mu \left(\frac{e^2}{r} - E\right)\right]^{1/2} dr\right)$$

où μ est la masse réduite : $E = \mu v^2/2$, v étant la vitesse relative des deux noyaux. Montrer que $\mu \simeq (6/5)m_p$, où la masse du proton $m_p \simeq 940 \text{ MeV}/c^2$. Pour calculer $p_T(E)$, on pourra faire le changement de variables

$$u^2 = \frac{e^2}{r} - E$$

On donne l'intégrale indéfinie

$$\int \frac{u^2 du}{(u^2 + a^2)^2} = \frac{1}{2a} \tan^{-1} \frac{u}{a} - \frac{u}{2(u^2 + a^2)}$$

En déduire

$$p_T(E) \simeq \exp\left(-\sqrt{\frac{E}{E_B}}\right) \quad E_B = 2\pi^2 \alpha^2 \mu c^2$$

avec $\alpha = e^2/(\hbar c) \simeq 1/137$. Donner la valeur de E_B en MeV.

3. Justifier la forme approchée de la section efficace de la réaction (13.70)

$$\sigma(E) \sim \frac{4\pi}{k^2} p_T(E)$$

en admettant que la réaction nucléaire se produit dès que les noyaux entrent en contact ; k est le vecteur d'onde $E = \hbar^2 k^2 / (2\mu)$.

4. D'après (13.1), le nombre de réactions nucléaires (13.70) par unité de temps est $n_i n_c v \sigma(v)$, où n_i et n_c sont les densités de noyaux incidents et de noyaux cibles. Cependant

les vitesses n'ont pas une valeur fixée, et pour obtenir le taux de réaction dans l'étoile, il faut moyenner sur la distribution de Maxwell des vitesses

$$p_M(v) = \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T} \right)$$

La quantité physiquement pertinente est la moyenne $\langle v\sigma \rangle$. En intégrant sur les angles, montrer que

$$\langle v\sigma \rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v^3 \sigma(v) \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T} \right)$$

En déduire, en effectuant le changement de variables $v \rightarrow E$

$$\langle v\sigma \rangle = \frac{16\pi^2 \hbar^2}{\mu^3} \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dE e^{-E/(k_B T)} e^{-\sqrt{E E_B/E}} \quad (13.71)$$

Montrer que l'intégrand dans (13.71) exhibe un pic aigu pour une valeur $E = E_0$ de l'énergie, avec

$$E_0 = \left(\frac{1}{2} k_B T \sqrt{E_B} \right)^{2/3}$$

et que la largeur ΔE de ce pic est donnée par

$$\Delta E \propto E_B^{1/6} (k_B T)^{5/6}$$

Ce pic est appelé *pic de Gamow*, et il détermine l'énergie E_0 pour laquelle la réaction (13.70) a une probabilité maximale : le taux de réaction dans l'étoile est contrôlé par E_0 . Estimer numériquement la position du pic et sa largeur.

13.5.2 Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène

1. On considère dans un premier temps la diffusion d'une particule par les deux noyaux 1 et 2 supposés différents d'une molécule diatomique, sans tenir compte du spin. Le centre de la molécule est situé à l'origine des coordonnées, et le détecteur à une distance r de la cible. Les noyaux 1 et 2 sont situés aux points $\vec{R}/2$ et $-\vec{R}/2$, avec $R \ll r$. Montrer que l'amplitude de diffusion par la molécule est

$$f = a_1 \exp\left(-\frac{i}{2} \vec{q} \cdot \vec{R} \right) + a_2 \exp\left(\frac{i}{2} \vec{q} \cdot \vec{R} \right)$$

où \vec{k} est le vecteur d'onde des particules incidentes, $\vec{k}' = k\hat{r}$, $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k})$ le transfert d'impulsion, tandis que a_1 et a_2 sont les longueurs de diffusion sur les noyaux 1 et 2. Tracer la section efficace en fonction de l'angle θ entre \vec{k}' et \vec{k} lorsque $qR \sim 1$.

2. On se place dans le cas de la diffusion de neutrons par une molécule d'hydrogène en tenant compte du spin du neutron et des protons. On suppose l'énergie suffisamment basse pour que $qR \ll 1$. Quelle doit être la valeur de l'énergie en eV pour que cette condition soit réalisée? Si les neutrons sont produits dans un réacteur, à quelle température doivent-ils être refroidis (cf. § 1.4.2)? On définit le spin total \vec{S} de la molécule

$$\hbar\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

$\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ sont les matrices de Pauli décrivant les spins des deux protons. Montrer que l'amplitude de diffusion s'écrit dans l'espace des spins en fonction des longueurs de diffusion a_s et a_t

$$\hat{f} = \frac{1}{2}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{2}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{S})$$

3. Si l'on traite l'interaction neutron-proton au moyen d'un potentiel effectif (13.41), la constante g est fixée par les caractéristiques du potentiel. En déduire qu'en raison d'un effet de masse réduite, on doit utiliser $4a/3$ comme longueur de diffusion sur les protons liés dans une molécule d'hydrogène, si a est la longueur de diffusion d'un neutron sur un proton libre. La section efficace est donc à multiplier par un facteur $16/9$: c'est l'effet de liaison chimique. Cet effet de masse réduite est présent pourvu que l'énergie du neutron soit suffisamment faible pour ne pas pouvoir exciter les niveaux de vibration de la molécule.

4. La molécule d'hydrogène peut exister dans deux états de spin : le parahydrogène de spin zéro et l'orthohydrogène de spin un. Quelle est la section efficace totale neutron-parahydrogène ? Est-elle sensible au signe de a_s ?

5. Calculer la section efficace totale neutron-orthohydrogène en supposant la molécule non polarisée. Suggestion

$$\text{Tr}(A \otimes B)^2 = (\text{Tr } A^2)(\text{Tr } B^2)$$

13.5.3 Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton

L'objectif de cet exercice est de relier les propriétés des états liés et des résonances à l'amplitude de diffusion. On se limitera à l'onde s . On négligera la différence de masse neutron-proton et on définira $M \simeq m_p \simeq m_n$: la masse réduite est donc $M/2$. On néglige tout effet lié au spin.

1. Soit $u(r)$ la fonction d'onde radiale (réelle) d'un état lié, en l'occurrence le deutéron. Elle est caractérisée par son comportement asymptotique et sa normalisation N

$$r \rightarrow \infty \quad u(r) \simeq Ne^{-\kappa r} \quad \text{avec} \quad \int_0^\infty u^2(r) dr = 1$$

Montrer que dans le cas du puits sphérique de la figure 13.4, de portée R et de profondeur V_0

$$N^2 = \frac{2\kappa k'^2 e^{2\kappa R}}{(\kappa^2 + k'^2)(1 + \kappa R)}$$

avec $k' = \sqrt{M(V_0 - B)}$, $\kappa = \sqrt{MB}$, B étant l'énergie de liaison. Tracer qualitativement $u(r)$.

2. Soit $g(k, r)$ une solution de l'équation radiale se comportant asymptotiquement comme

$$r \rightarrow \infty : \quad g(k, r) \propto e^{-ikr} \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{ME}}{\hbar}$$

Montrer que la fonction d'onde $u(k, r)$ est donnée par

$$u(k, r) = g(-k, r)g(k) - g(k, -r)g(-k) \quad g(k) = g(k, r = 0)$$

et que l'élément de matrice S , $S(k)$ vaut

$$S(k) = e^{2i\delta(k)} = \frac{g(k)}{g(-k)}$$

3. On prolonge analytiquement $g(k, r)$ à des valeurs complexes de k . Montrer que

$$g^*(k, r) = g(-k^*, r) \quad S^*(k^*) = \frac{1}{S(k)} = S(-k)$$

4. Calculer $g(k)$ et $S(k)$ pour le puits sphérique et montrer que $g(k)$ est une fonction entière de k (c'est-à-dire analytique pour tout k).

5. On peut prouver que pour un potentiel décroissant plus vite que $\exp(-\mu r)$ lorsque $r \rightarrow \infty$, $g(k)$ est analytique dans le demi-plan $\text{Im } k < \mu/2$, et on admettra ce résultat dans la suite de l'exercice. Montrer que si $S(k)$ a un pôle sur l'axe imaginaire, $k = i\kappa, 0 < \kappa < \mu/2$, alors ce pôle correspond à un état lié du potentiel. Montrer que si $S(k)$ a un pôle à $k = h - ib, |b| < \mu/2$, alors nécessairement $b > 0$.

6. Le cas du pôle à $k = h - ib, b > 0$, est celui d'une *résonance*. Montrer qu'un choix pour $S(k)$ satisfaisant aux conditions de la question 3 est

$$S(k) = \frac{(k - h - ib)(k + h - ib)}{(k - h + ib)(k + h + ib)} \simeq \frac{k - h - ib}{k - h + ib} \text{ pour } k \sim h$$

Supposant $b \ll h$, déterminer le comportement du déphasage $\delta(k)$ en fonction de k en montrant que

$$\cot \delta = \frac{h - k}{b}$$

En déduire que δ passe par $\pi/2$ pour $k = h$ et que la section efficace se met sous la forme dite de *Breit-Wigner*

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{ME} \frac{\hbar^2\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4} \tag{13.72}$$

Relier E_0 et Γ à b et h . Montrer que $h = 0$ correspond à un état virtuel.

7. Démontrer la relation

$$\left[u' \frac{\partial u}{\partial k} - u \frac{\partial u'}{\partial k} \right]_0^r = 2k \int_0^r u^2(r') dr' \quad u' = \frac{\partial u}{\partial r}$$

En étudiant cette relation pour $r \rightarrow 0$ et $r \rightarrow \infty$, montrer qu'au voisinage du pôle $k = i\kappa$

$$S(k) \simeq \frac{-iN^2}{k - i\kappa}$$

8. Montrer que la fonction

$$k \cot \delta(k) = ik \frac{g(k) + g(-k)}{g(k) - g(-k)}$$

est analytique en k au voisinage de $k = 0$, tend vers une constante pour $k \rightarrow 0$ et est une fonction paire de k . En déduire que l'on peut écrire

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4)$$

Démontrer les relations

$$r_0 = \frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1}{\kappa a} \right) \quad N^2 = \frac{2\kappa}{1 - \kappa r_0}$$

qui relient les paramètres (κ, N) du deuteron aux caractéristiques (a, r_0) de la diffusion de basse énergie. Calculer r_0 sachant que $B = 2.22$ MeV et $a = 5.40$ fm, et comparer au résultat expérimental $r_0 = 1.73$ fm.

13.5.4 Approximation de Born

1. Calculer l'amplitude de diffusion $f_B(\vec{q})$, $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$, à l'approximation de Born lorsque le potentiel a la forme dite de Yukawa

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

En déduire $d\sigma/d\Omega$ et σ_{tot} .

2. Examiner la limite $\mu \rightarrow 0$ avec $V_0/\mu \rightarrow e^2 = \text{cste}$: le potentiel de Yukawa tend vers le potentiel coulombien $V(r) = e^2/r$. Montrer que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{16E^2 \sin^4 \theta/2} \quad (13.73)$$

où $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ est l'énergie incidente. Ce résultat a été obtenu par Rutherford en utilisant un raisonnement de mécanique classique (la mécanique quantique n'existait pas encore!), et il est appelé *section efficace de Rutherford*. C'est aussi le résultat obtenu par un traitement rigoureux du potentiel coulombien en mécanique quantique. Il est remarquable que l'approximation de Born, dont la validité est plus que douteuse dans ce cas, donne le résultat correct pour la section efficace (mais non pour l'amplitude $f(\theta)$).

13.5.5 Optique neutronique

1. *Diffusion par une lame mince*. On considère un faisceau de neutrons de basse énergie de vecteur d'onde k dans le vide, qui traverse une lame très mince d'épaisseur δ perpendiculairement à cette lame ; dans un premier temps on néglige les effets liés au spin. Les neutrons sont détectés après leur passage dans la lame en un point d'ordonnée z sur l'axe Oz perpendiculaire à la lame, l'origine O étant choisie au centre de la lame. Si un neutron est diffusé par un noyau de la lame situé à une distance s de O , montrer que l'amplitude de probabilité pour observer le neutron diffusé en z est

$$\varphi_s = -\frac{a}{r} e^{ikr} \quad r = \sqrt{s^2 + z^2}$$

où a est la longueur de diffusion. L'amplitude de probabilité pour trouver un neutron en z est la somme de l'onde incidente $\exp(ikz)$ et de l'onde diffusée par la lame

$$\varphi(z) = e^{ikz} - a \sum \frac{e^{ikr}}{r}$$

où la somme porte sur tous les noyaux de la lame ; en déduire

$$\varphi(z) = e^{ikz} - 2\pi a \rho \delta \left. \frac{e^{ikr}}{ik} \right|_z^\infty$$

où ρ est la densité volumique de noyaux. La limite $r \rightarrow \infty$ donne un résultat nul si l'on moyenne sur les oscillations et on en déduit

$$\varphi(z) = \left(1 - 2i\pi \frac{a\rho\delta}{k} \right) e^{ikz}$$

2. Indice de réfraction. Lorsque les neutrons traversent la lame, celle-ci se comporte comme un milieu d'indice de réfraction n , qui, comme en optique, transforme le vecteur d'onde $k \rightarrow k' = nk$ ou de façon équivalente la longueur d'onde $\lambda \rightarrow \lambda' = \lambda/n$. En comparant avec le résultat de la question 1 lorsque $(n-1)k\delta \ll 1$, déduire

$$n = 1 - \frac{2\pi a\rho}{k^2} = 1 - \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi}$$

Lorsque $n < 1$, un faisceau de neutrons arrivant en incidence quasi-rasante sur la surface plane d'un cristal peut subir une réflexion totale (la différence d'indice entre le vide et l'air est négligeable) : si l'angle d'incidence est $(\pi/2 - \theta)$, $\theta \ll 1$, montrer que l'incidence critique est

$$\theta_c = \lambda \left(\frac{\rho a}{\pi} \right)^{1/2}$$

Estimer numériquement θ_c pour des valeurs typiques : $\lambda = 1 \text{ nm}$, $\rho = 10^{29} \text{ m}^{-3}$ et $a = 10 \text{ fm}$. La propriété de réflexion totale est utilisée pour construire des guides de neutrons, qui font partie des instruments de base de l'optique neutronique.

3. Effets de spin : noyaux de spin 1/2. Dans les questions suivantes on étudie les effets liés au spin des neutrons et des noyaux. Reprenant les résultats de l'exercice 3.3.9 et utilisant (13.46), montrer que les amplitudes f_a , f_b et f_c de cet exercice sont données en fonction des longueurs de diffusion triplet a_t et singulet a_s pour des noyaux de spin 1/2 par

$$f_a = -\frac{1}{2}(a_t + a_s) \quad f_b = -\frac{1}{2}(a_t - a_s) \quad f_c = -a_t$$

Montrer que l'intensité diffusée par le cristal est

$$\mathcal{I} = \frac{1}{16}(3a_t + a_s)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{3\mathcal{N}}{16}(a_t - a_s)^2$$

où \mathcal{N} est le nombre de noyaux diffuseurs. Le premier terme de \mathcal{I} correspond à une diffusion cohérente et le second à une diffusion incohérente (exercice 1.6.7). On définit une section efficace cohérente et une section efficace incohérente en intégrant \mathcal{I} sur les angles

$$\sigma_{\text{coh}} = \frac{\pi}{4}(3a_t + a_s)^2 \quad \sigma_{\text{inc}} = \frac{3\pi}{4}(a_t - a_s)^2$$

Dans le cas de la diffusion par l'hydrogène, $a_t = 5.4 \text{ fm}$ et $a_s = -23.7 \text{ fm}$. Évaluer numériquement σ_{coh} et σ_{inc} et montrer que $\sigma_{\text{inc}} \gg \sigma_{\text{coh}}$. Cette propriété est particulière à l'hydrogène, car en général les deux sections efficaces sont du même ordre de grandeur. Montrer que la longueur de diffusion à utiliser dans le calcul de l'indice de réfraction est celle définie par la diffusion cohérente

$$a_{\text{eff}} = \frac{3}{4}a_t + \frac{1}{4}a_s$$

Quelle est l'interprétation physique des poids 3/4 et 1/4 ? Quel est le signe de a_{eff} pour l'hydrogène ? Peut-on obtenir une réflexion totale des neutrons sur de l'hydrogène liquide ?

4. *Diffusion par des noyaux de spin j .* On suppose que les noyaux diffuseurs ont un spin j ; soit

$$\vec{I} = \vec{J} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

le moment angulaire total du système noyau+neutron, $\hbar\vec{\sigma}/2$ étant l'opérateur de spin du neutron. Montrer que l'amplitude de diffusion noyau+neutron s'écrit dans l'espace des spins en fonction de deux longueurs a et b

$$-\hat{f} = a + \frac{b}{\hbar} (\vec{\sigma} \cdot \vec{J})$$

Soit $a_+ = a_{j+1/2}$ et $a_- = a_{j-1/2}$ les deux longueurs de diffusion correspondant aux diffusions dans les états de moment angulaire total $i_{\pm} = j \pm 1/2$. Montrer que

$$a_+ = a + bj \quad a_- = a - b(j+1)$$

et inversement

$$a = \frac{1}{2j+1} [(j+1)a_+ + ja_-] \quad b = \frac{1}{2j+1} [a_+ - a_-]$$

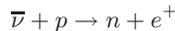
5. *Diffusions cohérente et incohérente.* Si les noyaux et les neutrons ne sont pas polarisés, quelles sont les probabilités que la diffusion ait lieu dans les états $i_+ = j + 1/2$ et $i_- = j - 1/2$? En utilisant les résultats de l'exercice 1.6.7, montrer que les sections efficaces cohérente et incohérente sont données par

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{coh}} &= \frac{4\pi}{(2j+1)^2} [(j+1)a_+ + ja_-]^2 = 4\pi a^2 \\ \sigma_{\text{inc}} &= \frac{4\pi j(j+1)}{(2j+1)^2} [a_+ - a_-]^2 = 4\pi j(j+1)b^2 \end{aligned}$$

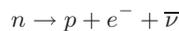
Vérifier que l'on retrouve bien les résultats de la question 3 lorsque $j = 1/2$.

13.5.6 Section efficace d'absorption de neutrinos

L'objectif de l'exercice est de calculer la section efficace d'absorption des neutrinos par des neutrons



à partir de la vie moyenne du neutron, qui se désintègre suivant la réaction (1.2)



Ce calcul est possible car l'interaction responsable des deux phénomènes est la même, l'interaction faible, et les deux processus peuvent être reliés. L'élément de matrice de transition pour le calcul de la vie moyenne du neutron peut s'écrire

$$T_{fi} = G_F \mathcal{M}_{fi} \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle$$

où les fonctions d'onde de l'état initial et de l'état final sont des ondes planes normalisées dans un volume \mathcal{V} et de la forme

$$\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

G_F est la constante de Fermi, ou constante de couplage des interactions faibles, \mathcal{M}_{fi} un élément de matrice sans dimensions dépendant des spins¹⁵. On appelle $E_0 = (m_n - m_p)c^2 \simeq 1.2 \text{ MeV}$ l'énergie disponible dans la désintégration (on peut prendre à une excellente approximation $m_\nu = 0$). Soit $\vec{p}_n = 0$ (supposant le neutron immobile), $\vec{P} = \vec{p}_p$, $\vec{p} = \vec{p}_e$ et $\vec{q} = \vec{p}_\nu$ les impulsions dans l'état initial et dans l'état final, $K = P^2/(2m_p)$, E et cq l'énergie cinétique du proton et l'énergie totale de l'électron et du neutrino. La conservation de l'énergie-impulsion s'écrit

$$\vec{P} + \vec{p} + \vec{q} = 0 \quad K + E + cq = E_0$$

Montrer que l'on peut négliger K : $K \ll E$, cq . Soit $d\Gamma/dE$ la probabilité de désintégration du neutron, par unité d'énergie E de l'électron final. On peut montrer qu'il n'y a pas de corrélations entre l'impulsion de l'électron et celle du neutrino. Montrer que dans ces conditions la probabilité de transition s'écrit en fonction de la densité d'états \mathcal{D} de l'électron et du neutrino

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma}{dE} &= \frac{2\pi}{\hbar} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \mathcal{V}^{-2} \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_\nu(E - E_0) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{pE}{c^2} \right] \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(E_0 - E)^2}{c^3} \right] \end{aligned}$$

$\langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle$ représente la somme sur les spins finaux et la moyenne sur les spins initiaux de l'élément de matrice de spin. Pour obtenir la vie moyenne $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur E . L'intégrale

$$I(E_0) = \int_{m_e c^2}^{E_0} dE E (E_0 - E)^2 \sqrt{E^2 - m_e^2 c^2}$$

peut se calculer exactement, mais nous nous contenterons d'une approximation ultrarelativiste négligeant la masse de l'électron

$$I(E_0) \simeq \int_0^{E_0} dE E^2 (E_0 - E)^2 = \frac{E_0^5}{30}$$

En déduire l'expression de la vie moyenne

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma \sim \frac{G_F^2 E_0^5}{60\pi^3 \hbar (\hbar c)^6}$$

Quelle est la dimension de $G_F/(\hbar c)^3$? Estimer G_F à partir de la vie moyenne $\tau \simeq 900 \text{ s}$ et comparer avec la valeur précise

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 1.17 \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$$

2. Montrer que la section efficace différentielle d'absorption des neutrinos par les neutrons est donnée par

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar c} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \frac{Ep}{(2\pi\hbar)^3 c^2}$$

15. \mathcal{M}_{fi} dépend aussi de deux constantes sans dimension de l'ordre de 1, $g_V = 1$, la constante de couplage vectorielle, et $g_A = 1.25$, la constante de couplage axiale.

où E est l'énergie du positron e^+ et en déduire

$$\sigma_{\text{tot}} \sim \frac{1}{\pi} \left[\frac{G_F}{(\hbar c)^3} \right]^2 (\hbar c)^2 E^2$$

Vérifier que σ_{tot} a bien les dimensions d'une surface. Estimer numériquement σ_{tot} pour des neutrinos solaires de 8 MeV, et en déduire que le libre parcours moyen des neutrinos solaires dans la Terre se mesure en années-lumière.

3. La théorie de Fermi utilisée dans cet exercice donne une section efficace isotrope : l'interaction a lieu uniquement dans l'onde s , $l = 0$. En utilisant (13.51), montrer que le résultat obtenu pour la section efficace d'absorption ne peut pas être valable à très haute énergie et estimer l'énergie au-delà de laquelle la théorie de Fermi doit être modifiée. Cette modification est connue, c'est la théorie électro-faible de Glashow-Salam-Weinberg, composante du modèle standard qui unifie interactions faibles et électromagnétiques, et où la constante de Fermi est reliée à la charge de l'électron et à la masse des bosons W^\pm et Z^0 : $G_F \sim e^2/M_W^2$.

13.6 Bibliographie

On trouvera un exposé de la théorie des collisions plus complet que celui de ce chapitre dans Merzbacher [1970], chapitres 11 et 19, Messiah [1959], chapitres X et XIX, Ballentine [1998], chapitre 16 ou Landau et Lifschitz [1966], chapitres XVII et XVIII. La théorie de la diffusion à basse énergie est exposée par Bethe et Morrison [1956], chapitres IX à XI, ou dans Cohen-Tannoudji [1999].

Chapitre 14

Particules identiques

EN PHYSIQUE CLASSIQUE, il n'existe pas d'identité stricte de deux particules : on peut toujours distinguer deux boules de billard par un trait de peinture sans modifier leurs propriétés mécaniques et dans une collision on peut toujours suivre chaque boule individuellement. En revanche, en physique quantique, rien ne permet de distinguer entre deux électrons, deux protons, deux atomes d'hélium 4... : ces particules sont strictement identiques. Toutefois, il convient de faire la distinction entre identiques et indiscernables¹, distinction que nous allons expliquer sur un exemple. À des températures $\lesssim 1$ K et à des pressions $\gtrsim 30$ MPa, ${}^3\text{He}$ est un solide cristallin. Deux atomes d' ${}^3\text{He}$ situés en des nœuds différents du réseau sont identiques, mais discernables : leur position dans le réseau permet de les étiqueter. En revanche, dans ${}^3\text{He}$ liquide, les atomes se déplacent et sont indiscernables. Cette identité/indiscernabilité a des implications remarquables sur la courbe de fusion à des températures $\lesssim 300$ mK, parce que le liquide est plus ordonné que le solide (*cf.* par exemple Le Bellac *et al.* [2004], exercice 5.7.6). En d'autres termes, pour que deux particules identiques soient indiscernables, il faut qu'elles puissent se déplacer de façon à « se rendre compte » qu'elles sont identiques. Le spectre de rotation-vibration d'une molécule diatomique homonucléaire (§ 14.1.2) donne un autre exemple de la distinction identité/indiscernabilité. Toutefois Ginsberg *et al.* [2007] ont montré l'indiscernabilité de deux condensats de Bose-Einstein distants de $160 \mu\text{m}$.

La section 14.1 énonce le postulat de symétrisation, introduit les statistiques quantiques et développe quelques applications simples. La section 14.2 traite la diffusion de particules identiques. Lorsque l'on a affaire à N particules identiques, $N \gg 1$, ou états collectifs de N particules, les effets des statistiques quantiques jouent un rôle crucial à basse température. Nous examinerons les états collectifs de fermions dans la section 14.3 et les états collectifs de bosons dans la section 14.4, en développant l'aspect condensation de Bose-Einstein.

1. Selon le *Petit Robert* : entités identiques = entités parfaitement semblables tout en étant distinctes, et indiscernable = qui ne peut être distingué d'une entité de même nature.

14.1 Bosons et fermions

14.1.1 Symétrie ou antisymétrie du vecteur d'état

Afin d'introduire le concept d'indiscernabilité quantique sur un exemple concret, commençons par le cas de deux particules « presque » identiques, deux atomes d'oxygène ^{16}O et ^{18}O , l'analogie du trait de peinture étant le choix de deux isotopes différents pour les noyaux, et considérons un état $|\Psi\rangle$ formé d'un atome d'oxygène ^{16}O (particule 1) et d'un atome d'oxygène ^{18}O (particule 2) dans leur état fondamental. Nous appellerons $|a\rangle$ et $|b\rangle$ deux états possibles pour chaque particule. Ce seront par exemple des états propres des opérateurs \vec{P} , \vec{J} , ... étiquetés par l'impulsion \vec{p} de l'atome, la composante j_z de son spin^2 , ...

$$|a\rangle = |\vec{p}, j_z, \dots\rangle \quad |b\rangle = |\vec{p}', j'_z, \dots\rangle$$

Nous noterons $|a_1 \otimes b_2\rangle$ l'état à deux particules où la particule 1 est dans l'état $|a\rangle$ et la particule 2 dans l'état $|b\rangle$, par exemple³, $|a_1 \otimes b_2\rangle = |\vec{p}(1) \otimes \vec{p}'(2)\rangle$. Pour fixer les idées, on peut supposer que les particules ont interagi par exemple dans une collision (figure 14.1) et qu'elles se trouvent dans un état intriqué $|\Psi\rangle$. Les tests effectués sur les particules 1 et 2 sont bien individualisés, les deux tests s'effectuant dans des régions d'espace très éloignées, comme dans les expériences discutées dans la section 6.3. Deux détecteurs D_1 et D_2 permettent de déterminer \vec{p}, j_z, \dots pour chacune des deux particules : D_1 détecte l'atome de ^{16}O avec une impulsion \vec{p} , D_2 détecte l'atome de ^{18}O avec une impulsion \vec{p}' (figure 14.1a), ce qui permet d'effectuer un test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ sur l'état $|\Psi\rangle$. La probabilité pour que l'état $|\Psi\rangle$ passe le test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ est

$$P_{\Psi \rightarrow [a_1, b_2]} = |\langle a_1 \otimes b_2 | \Psi \rangle|^2 \quad (14.1)$$

On peut aussi envisager la configuration inverse et mesurer la probabilité que le détecteur D_1 enregistre l'atome de ^{18}O et D_2 l'atome de ^{16}O (figure 14.1b), qui est *différente* de (14.1a) : cette probabilité correspond au test $|a_2 \otimes b_1\rangle$, où l'atome de ^{18}O a une impulsion \vec{p} et l'atome de ^{16}O une impulsion \vec{p}' , et sauf cas particulier

$$P_{\Psi \rightarrow [a_2, b_1]} \neq P_{\Psi \rightarrow [a_1, b_2]}$$

Supposons maintenant les particules 1 et 2 identiques, deux atomes de ^{16}O par exemple. Comme il n'est pas possible de les suivre dans la collision, elles sont non seulement identiques, elles sont indiscernables. Si les énergies mises en jeu dans l'interaction entre les deux particules sont de quelques eV, rien ne

2. Les atomes de ^{16}O et de ^{18}O ont un spin 2 (état 3P_2 , cf. § 16.2.2) et l'état fondamental est 5 fois dégénéré. Si nécessaire on peut lever cette dégénérescence par effet Zeeman dans un champ magnétique.

3. Nous avons procédé à une légère modification de la notation, car la notation $|\vec{p}_1 \otimes \vec{p}'_2\rangle$ pourrait être ambiguë : la particule 1 est dans l'état d'impulsion \vec{p} , et non \vec{p}_1 .

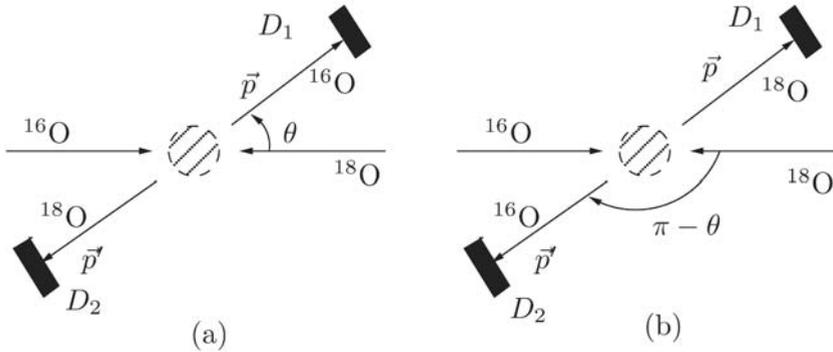


FIG. 14.1 – Diffusion ^{16}O - ^{18}O . (a) Angle de diffusion θ . (b) Angle de diffusion $(\pi - \theta)$.

distingue *a priori* ce cas du cas précédent, car les interactions ^{16}O - ^{18}O et ^{16}O - ^{16}O sont strictement identiques. Ce n'est qu'à des énergies de l'ordre du MeV que des différences dues aux noyaux pourraient se faire sentir, et pourtant les deux cas vont différer de façon radicale, même à basse énergie. Lorsque les deux particules sont identiques, cela n'a plus de sens de parler du test $|a_1 \otimes b_2\rangle$: il peut être commode de numéroter formellement les deux particules, et donc de parler des tests $|a_1 \otimes b_2\rangle$ ou $|a_2 \otimes b_1\rangle$, mais une telle numérotation n'a pas de signification physique. Il n'est pas physiquement acceptable d'écrire un état de la forme $|a_1 \otimes b_2\rangle$ (sauf éventuellement si $a \equiv b$), car on ne peut pas affirmer que la particule 1 est dans l'état a et la particule 2 dans l'état b ou l'inverse, étant donné que l'on ne peut pas les distinguer. Le problème se pose donc de la définition correcte de l'état $|a \otimes b\rangle$. Cet état doit être physiquement identique à $|b \otimes a\rangle$ et ne peut en différer que par une phase, qui dépend éventuellement de a et de b

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle &= e^{i\theta_{ab}} |b \otimes a\rangle \\ |b \otimes a\rangle &= e^{i\theta_{ba}} |a \otimes b\rangle \end{aligned} \tag{14.2}$$

On en déduit⁴

$$e^{i\theta_{ba}} e^{i\theta_{ab}} = 1 \tag{14.3}$$

Définissons les nouveaux vecteurs

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle' &= e^{i\theta_{ab}/2} |a \otimes b\rangle \\ |b \otimes a\rangle' &= e^{i\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle \end{aligned} \tag{14.4}$$

4. Si l'on admet que θ_{ab} est indépendant de a et b : $\theta_{ab} = \theta_{ba} = \theta$, et il en découle directement $\exp(2i\theta) = 1$, $\exp(i\theta) = \pm 1$.

Nous avons au lieu de (14.2)

$$\begin{aligned} |b \otimes a\rangle' &= e^{-i\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle = e^{i\theta_{ba}/2} |a \otimes b\rangle \\ &= e^{i(\theta_{ab} + \theta_{ba})/2} |a \otimes b\rangle' = \pm |a \otimes b\rangle' \end{aligned}$$

car d'après (14.3)

$$e^{i(\theta_{ab} + \theta_{ba})/2} = \pm 1$$

On peut donc toujours choisir les phases des vecteurs $|a \otimes b\rangle$ et $|b \otimes a\rangle$ de telle sorte que ces vecteurs soient symétriques ou antisymétriques dans la permutation $a \leftrightarrow b$

- symétrique $|a \otimes b\rangle = + |b \otimes a\rangle$ (14.5)

- antisymétrique $|a \otimes b\rangle = - |b \otimes a\rangle$ (14.6)

Il en résulte que les amplitudes $\langle a \otimes b | \Psi \rangle$ sont aussi, soit symétriques, soit antisymétriques

- symétrique $\langle a \otimes b | \Psi \rangle = \langle b \otimes a | \Psi \rangle$ (14.7)

- antisymétrique $\langle a \otimes b | \Psi \rangle = - \langle b \otimes a | \Psi \rangle$ (14.8)

Cette propriété de symétrie ou d'antisymétrie est caractéristique du couple de particules identiques considérées. Elle ne *peut pas* dépendre des états $|\Psi\rangle$ ou $|a \otimes b\rangle$. Supposons en effet que pour le même couple de particules on ait une amplitude symétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle$ et une amplitude antisymétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_2\rangle$

$$\begin{aligned} \langle a \otimes b | \Phi_1 \rangle &= \langle b \otimes a | \Phi_1 \rangle \\ \langle a \otimes b | \Phi_2 \rangle &= - \langle b \otimes a | \Phi_2 \rangle \end{aligned}$$

La linéarité de la mécanique quantique nous permet aussi de choisir un état combinaison linéaire de $|\Phi_1\rangle$ et de $|\Phi_2\rangle$

$$|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1 | \Psi \rangle + |\Phi_2\rangle \langle \Phi_2 | \Psi \rangle$$

où l'on a supposé $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = 0$. On aurait alors

$$\langle a \otimes b | \Psi \rangle = \langle a \otimes b | \Phi_1 \rangle \langle \Phi_1 | \Psi \rangle + \langle a \otimes b | \Phi_2 \rangle \langle \Phi_2 | \Psi \rangle$$

Cette amplitude de probabilité n'est ni symétrique, ni antisymétrique dans l'échange $a \leftrightarrow b$ et elle est physiquement inacceptable. Il est nécessaire que $\langle \Phi_1 | \Psi \rangle = 0$, ou que $\langle \Phi_2 | \Psi \rangle = 0$, pour *tous* les états $|\Psi\rangle$. Si $\langle \Phi_2 | \Psi \rangle = 0$, les transitions $\Psi \rightarrow \Phi_2$ sont interdites et $|\Phi_2\rangle$ n'appartient pas à l'espace des états à deux particules. Il existe seulement deux possibilités pour le comportement dans l'échange de deux états, $a \leftrightarrow b$, correspondant à deux types d'amplitudes :

- les amplitudes symétriques (14.7) : les particules sont alors appelées des *bosons* ;
- les amplitudes antisymétriques (14.8) : les particules sont alors appelées des *fermions*.

Le caractère bosonique ou fermionique d'une espèce de particules est appelé sa *statistique*. Ainsi que nous allons le voir dans un instant, les électrons sont un exemple de fermions, et on dit aussi que les électrons *obéissent à la statistique de Fermi (ou Fermi-Dirac)*, tandis que les photons, qui sont des bosons, *obéissent à la statistique de Bose (ou Bose-Einstein)*.

L'opération qui consiste à échanger les numérotations est une transformation passive (§ 8.1.1). On peut aussi échanger les états a et b en déplaçant les particules dans l'espace, ce qui est une transformation active. Dans cette transformation active, le déplacement peut engendrer une phase non triviale pour des raisons topologiques, ainsi que nous l'avons vu dans la section 12.6. On montre (voir par exemple Comtet *et al.* [1992]) que dans cet échange le facteur de phase ne peut être que ± 1 dans un espace à trois dimensions. Si l'on associe l'indiscernabilité à l'impossibilité de suivre les particules dans leur mouvement dans l'espace, alors il ne peut exister que des bosons ou des fermions. Cependant, à deux dimensions, des facteurs de phase différents de ± 1 sont autorisés, ce qui entraîne l'existence de « statistiques fractionnaires » et de particules appelées *anyons*, qui ne sont ni des fermions, ni des bosons.

Nous avons déjà remarqué qu'il est commode de numéroter artificiellement les particules : $1, 2, \dots$. La relation (14.7) implique alors que le vecteur d'état d'un système de deux bosons doit être symétrique dans un échange des numérotations $1 \leftrightarrow 2$

$$|a \otimes b\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a_1 \otimes b_2\rangle + |a_2 \otimes b_1\rangle \right) \quad (14.9)$$

et (14.8) que celui de deux fermions doit être antisymétrique

$$|a \otimes b\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a_1 \otimes b_2\rangle - |a_2 \otimes b_1\rangle \right) \quad (14.10)$$

L'échange $a \leftrightarrow b$ est bien sûr équivalent à celui des numérotations $1 \leftrightarrow 2$. Si les particules n'ont pas de degrés de liberté internes (spin, etc.), l'état des particules peut être caractérisé par leur fonction d'onde $u_a(\vec{r}) = \langle \vec{r} | a \rangle$ et $u_b(\vec{r}) = \langle \vec{r} | b \rangle$, et la fonction d'onde du système est dans le cas de bosons

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1) \right) \quad (14.11)$$

et dans le cas de fermions

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1) \right) \quad (14.12)$$

Nous venons d'écrire le vecteur d'état, ou la fonction d'onde, de deux particules identiques sans spin *indépendantes*. En présence d'interactions, la fonction d'onde sera une combinaison linéaire de fonctions d'onde du type (14.11) ou (14.12), mais même en l'absence d'interactions, le vecteur d'état, ou la fonction d'onde, ne sont pas de simples produits tensoriels : l'espace des états pour un couple de particules identiques n'est pas l'intégralité de $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, mais seulement le sous-espace formé des vecteurs symétriques dans un échange des numérotations s'il s'agit de deux bosons, et antisymétriques s'il s'agit de deux fermions. Ces deux espaces sont invariants par l'évolution temporelle, car le hamiltonien doit être invariant dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$: $[H, P_{12}] = 0$, où P_{12} est l'opérateur de permutation des numérotations.

Le raisonnement que nous avons suivi pour deux particules et qui nous a permis de distinguer entre le cas symétrique et le cas antisymétrique ne se généralise pas à trois particules et plus, car l'identité des particules n'entraîne plus automatiquement la symétrie ou l'antisymétrie du vecteur d'état. Considérons le cas de trois particules identiques et appelons P une permutation des indices 1, 2 et 3

$$(1, 2, 3) \xrightarrow{P} (P1, P2, P3)$$

par exemple la permutation qui échange 1 et 3 (transposition)

$$(1, 2, 3) \xrightarrow{P_{13}} (3, 2, 1)$$

Ces permutations peuvent être représentées par des matrices dans un espace à six dimensions. Les 6 permutations possibles sont la permutation identité (I), les 3 permutations de deux indices P_{ij} , ou transpositions, la permutation circulaire P_{123} et son carré P_{123}^2 . Comme ces permutations ne commutent pas toutes entre elles, par exemple $P_{12}P_{23} \neq P_{23}P_{12}$, les seuls vecteurs propres communs aux six permutations sont complètement symétriques ou complètement antisymétriques. En fait il existe 4 sous-espaces invariants⁵.

- Un espace à une dimension symétrique dans toute transposition, sous-tendu par un vecteur propre commun aux six permutations.
- Un espace à une dimension antisymétrique dans toute transposition, sous-tendu par l'autre vecteur propre commun aux six permutations.
- Deux espaces invariants à deux dimensions partiellement symétriques.

Le raisonnement suivi pour deux particules repose sur le fait que les deux sous-espaces invariants sont à une seule dimension

$$P_{12}|a \otimes b\rangle = \pm |b \otimes a\rangle$$

Au-delà de trois particules, la seule conclusion que l'on peut tirer de l'identité des particules est qu'aucun résultat physique ne doit être modifié quand on

5. La construction explicite de ces quatre sous-espaces est donnée dans Ballentine [1998], chapitre 17 ou Peres [1993], chapitre 5.

permuté les numérotations des particules de l'ensemble. Considérons donc une propriété physique $A(1, 2, 3)$ et un opérateur unitaire U_P qui représente l'action de la permutation dans l'espace de Hilbert des états

$$U_P A(1, 2, 3) U_P^{-1} = A(P1, P2, P3)$$

L'unitarité de U_P se déduit de $U_P^2 = I$. Soit $|\Psi\rangle$ le vecteur d'état des trois particules identiques. L'identité des particules implique que la valeur moyenne de A vérifie

$$\langle \Psi | A(1, 2, 3) | \Psi \rangle = \langle \Psi | A(P1, P2, P3) | \Psi \rangle$$

Pour un système de trois particules identiques, cette égalité est vérifiée non seulement par les états complètement symétriques ou antisymétriques, mais aussi par les états partiellement symétriques⁶. Pour éliminer ces états partiellement symétriques qui ne semblent pas exister dans la nature, nous sommes conduits à énoncer un postulat supplémentaire⁷ de la mécanique quantique.

Postulat de symétrisation. Le vecteur d'état d'un système de N particules identiques est, soit symétrique dans l'échange de la numérotation deux quelconques des particules dans le cas de bosons, soit antisymétrique dans le cas de fermions.

Le postulat de symétrisation entraîne que la fonction d'onde de N bosons (fermions) doit être symétrique (antisymétrique) dans l'échange de deux quelconques des numérotations de deux particules. Dans le cas des fermions, la fonction d'onde s'écrit donc comme un déterminant, appelé *déterminant de Slater*. Écrivons explicitement le cas de trois fermions identiques indépendants

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 | a \otimes b \otimes c \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} u_a(\vec{r}_1) & u_a(\vec{r}_2) & u_a(\vec{r}_3) \\ u_b(\vec{r}_1) & u_b(\vec{r}_2) & u_b(\vec{r}_3) \\ u_c(\vec{r}_1) & u_c(\vec{r}_2) & u_c(\vec{r}_3) \end{vmatrix} \quad (14.13)$$

Dans ce cas, si par exemple $u_a = u_b$, la fonction d'onde s'annule. Ceci est appelé *principe de Pauli*, bien que ce « principe » découle en fait de l'antisymétrisation. On énonce souvent ce principe sous la forme : *il est impossible*

6. En fait les sous-espaces invariants forment des « rayons généralisés », et tous les vecteurs d'un tel sous-espace sont physiquement équivalents. En effet, d'après le lemme de Schur, les opérateurs invariants sous les permutations sont des multiples de l'identité dans les sous-espaces invariants, et leur valeur moyenne dans ces sous-espaces est indépendante du choix du représentant du « rayon généralisé ». En particulier l'évolution temporelle conserve les sous-espaces invariants car le hamiltonien est invariant sous toute permutation : voir Messiah et Greenberg [1964]. En fait, s'il existait des particules identiques dont les états soient partiellement symétriques, on pourrait les transformer en bosons ou fermions en ajoutant des nombres quantiques supplémentaires, voir la note 8 et l'exercice 14.5.1 : l'adjonction de la couleur permet aux quarks d'être des fermions.

7. Toutefois Peres [1993], chapitre 5, montre que les « parastatistiques » se heurtent à de sérieuses difficultés d'interprétation physique, ce qui justifie le postulat de symétrisation. On peut aussi invoquer l'argument topologique mentionné ci-dessus pour se restreindre au cas des fermions et des bosons.

de mettre deux fermions ou plus dans le même état. La signification de cet énoncé est évidente si les fermions sont indépendants. S'ils ne le sont pas, il implique que les fonctions d'onde admissibles sont des combinaisons linéaires de déterminants de Slater.

14.1.2 Spin et statistique

Dans les équations (14.11) à (14.13), nous avons supposé les particules sans degré de liberté interne, et en particulier sans spin. Lorsque l'on tient compte des degrés de liberté internes, l'échange des numérotations doit se faire sur *tous* les nombres quantiques caractérisant l'état des particules. En particulier on doit effectuer cet échange sur les degrés de liberté de spin. Il est remarquable que spin et statistique soient intimement reliés par le *théorème spin-statistique*, qui énonce que les particules de spin entier ($0, \hbar, 2\hbar, \dots$) sont des bosons, tandis que les particules de spin demi-entier ($\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$) sont des fermions. Ainsi les photons, particules de spin 1, sont des bosons, et les électrons, neutrinos, protons et neutrons, particules de spin $1/2$, sont des fermions. La preuve du théorème spin-statistique utilise la théorie quantique relativiste, ou théorie des champs quantifiés relativistes, mais elle nécessite un arsenal mathématique important et la maîtrise de concepts difficiles ; il n'est malheureusement pas possible d'en donner ici une idée, même intuitive. Il est frustrant de constater qu'il n'existe aucun argument élémentaire justifiant ce résultat fondamental, dont l'énoncé est pourtant tout à fait simple⁸.

Après cet énoncé fondamental, revenons sur les vecteurs d'état (14.11) et (14.12). Comme nous venons de le voir, des bosons de spin zéro peuvent parfaitement exister (mésons π , atomes d' ^4He , ...) et un vecteur d'état du type (14.11) représente sans problème l'état d'un système de deux bosons de spin zéro. En revanche, pour un système de deux fermions, le spin ne peut être nul et on doit en tenir compte dans l'écriture du vecteur d'état. Le cas le plus courant et le plus important en pratique est celui des fermions de spin $1/2$: électrons, protons, neutrons, ... Suivant les résultats du § 10.6.1, on peut former avec deux spins $1/2$ soit un moment angulaire un, dont les trois vecteurs de base $|jm\rangle$, notés collectivement χ_t , sont

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |+_1 \otimes +_2\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+_1 \otimes -_2\rangle + |-_1 \otimes +_2\rangle \right) \\ |1, -1\rangle &= |-_1 \otimes -_2\rangle \end{aligned} \quad (14.14)$$

et un moment angulaire zéro

$$\chi_s = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+_1 \otimes -_2\rangle - |-_1 \otimes +_2\rangle \right) \quad (14.15)$$

8. On peut faire le rapprochement avec l'énoncé très élémentaire du théorème de Fermat et la complexité de la preuve d'A. Wiles. Pour une tentative intéressante (mais pas entièrement concluante) de donner une démonstration élémentaire du théorème spin-statistique, voir Berry et Robbins [1997].

Il est évident sur (14.14) et (14.15) que les trois états χ_t sont symétriques dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$ et χ_s est antisymétrique dans ce même échange. Rappelons que ces états sont appelés respectivement triplet et singulet, d'où la notation χ_t et χ_s . Les vecteurs d'état totalement antisymétriques d'un système de deux fermions sont donc, soit antisymétriques d'espace et symétriques de spin⁹

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1) \right) \chi_t \quad (14.16)$$

soit au contraire symétriques d'espace et antisymétriques de spin

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1) \right) \chi_s \quad (14.17)$$

Comme application, supposons les deux fermions de spin $1/2$ dans un état de moment angulaire orbital l dans le référentiel de leur centre de masse. La partie angulaire de la fonction d'onde de la particule relative est l'harmonique sphérique $Y_l^m(\hat{r})$, où $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ est le vecteur joignant les positions des deux fermions. L'échange des numérotations est équivalent à $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, soit aussi $\hat{r} \rightarrow -\hat{r}$. Or, d'après (10.71), la parité des harmoniques sphériques est $(-1)^l$

$$Y_l^m(-\hat{r}) = (-1)^l Y_l^m(\hat{r}) \quad (14.18)$$

Dans le référentiel de leur centre de masse, un système de deux fermions identiques de spin $1/2$ se trouvera dans un état de moment angulaire orbital l pair si son état de spin est singulet, et dans un état de moment angulaire orbital l impair si son état de spin est triplet. On note habituellement S le spin total, L le moment angulaire orbital total, J le moment angulaire total et ${}^{2S+1}L_J$ l'état des deux fermions. Par exemple un état 3P_2 correspond à $S = 1, L = 1, J = 2$ et un état 1D_2 à $S = 0, L = 2, J = 2$. Le cas de deux bosons identiques de spin zéro est encore plus simple : seuls les états de moment angulaire orbital pair sont permis.

Les propriétés de symétrie du vecteur d'état de deux spins $1/2$ se généralisent au cas de l'addition de deux spins \vec{S} quelconques, pour former un spin total $\vec{F} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, $0 \leq F \leq 2s$. La propriété de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan¹⁰

$$C_{j_2 j_1; m_2 m_1}^{j m} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C_{j_1 j_2; m_1 m_2}^{j m}$$

montre que les états de spin total $2F, 2F - 2, \dots$ sont symétriques dans l'échange des numérotations, tandis que les états $2F - 1, 2F - 3, \dots$ sont

9. Pour des états à trois particules et plus, le vecteur d'état n'est pas en général le produit d'une fonction d'onde d'espace symétrique (ou antisymétrique) par un vecteur d'état de spin également symétrique (ou antisymétrique). Dans le cas de trois spins $1/2$, l'état de spin total $S = 3/2$ est complètement symétrique, mais les deux états de spin total $S = 1/2$ sont partiellement symétriques. Si la fonction d'onde spatiale est partiellement symétrique, on peut dire d'une certaine façon que le vecteur d'état global devient complètement symétrique (ou antisymétrique) en ajoutant un nombre quantique de spin.

10. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément B_X.

antisymétriques dans cet échange. Comme application, montrons que ces propriétés de symétrie affectent le spectre de rotation d'une molécule diatomique homonucléaire, c'est-à-dire une molécule dont les deux noyaux sont strictement identiques, appartenant au même isotope, par exemple la molécule $^1\text{H}-^1\text{H} = \text{H}_2$, par opposition à la molécule hétéronucléaire $^1\text{H}-^2\text{H}$ ou $\text{H}-\text{D}$, où un proton est remplacé par un deutéron $\text{D} = ^2\text{H}$: le deutéron est un isotope de l'hydrogène, noyau atomique formé d'un proton et d'un neutron. La dynamique des noyaux est celle d'un rotateur sphérique (cf. § 10.3.1) dont les fonctions d'onde sont les harmoniques sphériques $Y_j^m(\hat{r})$, où \vec{r} est le vecteur joignant les deux noyaux. Les niveaux de rotation, ou le spectre de rotation, sont donnés en fonction de j par (10.54)

$$E_j = \frac{j(j+1)}{2I}$$

où I est le moment d'inertie.

Si l'on choisit l'origine des coordonnées au milieu de la droite joignant les noyaux, le hamiltonien H des électrons est invariant dans l'opération parité Π , $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$: $[\Pi, H] = 0$ (cf. § 8.3.3). On peut donc diagonaliser simultanément Π et H . Soit $|\psi_{\text{el}}\rangle$ un vecteur propre de l'état électronique commun à H et Π . Comme $\Pi^2 = I$, les valeurs propres de Π sont ± 1 , $\Pi|\psi_{\text{el}}\rangle = \pm|\psi_{\text{el}}\rangle$ (cf. (8.52)). Dans la majorité des cas, et en particulier dans celui de la molécule d'hydrogène, l'état fondamental électronique correspond au signe $+$, ce que nous allons admettre dans la discussion qui suit. L'opération d'échange des numérotations des deux noyaux correspond à $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, et dans cette opération la fonction d'onde des noyaux est multipliée par la parité de l'harmonique sphérique, $(-1)^j$. Si les deux noyaux ont un spin s , le moment angulaire total F va de zéro à $2s$. Le vecteur d'état *total* de la molécule doit être symétrique (resp. antisymétrique) dans l'échange des numérotations des deux noyaux si ces noyaux sont des bosons (resp. fermions), et lorsque les deux noyaux sont des bosons (s entier), deux cas sont possibles :

- F pair et j pair,
- F impair et j impair.

Le résultat est identique lorsque les deux noyaux sont des fermions (s demi-entier). La situation inverse prévaut bien sûr dans les rares cas où la parité de $|\psi_{\text{el}}\rangle$ est négative. Dans le cas de la molécule d'hydrogène, le spin des protons est $s = 1/2$, et $F = 0$ (para-hydrogène) ou $F = 1$ (ortho-hydrogène). La valeur de F fixe la parité de j : $F = 1$ correspond à des valeurs de j impaires, et $F = 0$ à des valeurs de j paires. Il n'y a pas de restrictions sur j dans le cas de la molécule H-D. En revanche, l'identité des noyaux n'affecte pas les niveaux de vibration. En effet, les noyaux n'échangent pas leur position comme dans une rotation : ils sont identiques, mais pas indiscernables.

Une autre conséquence importante de la statistique est l'apparition de *forces d'échange*, qui sont en particulier responsables du magnétisme. Le

magnétisme macroscopique correspond à l'alignement d'un nombre macroscopique de spins électroniques dans une même direction, et cet alignement construit un moment magnétique macroscopique. Si l'alignement est produit par un champ magnétique externe et disparaît en l'absence de ce champ, on a affaire à un matériau *paramagnétique*. Si l'alignement persiste en l'absence de champ, on a affaire à un matériau *ferromagnétique* (fer, cobalt, nickel...). L'aimantation disparaît au-dessus d'une certaine température, appelée *température de Curie*, T_C . Il existe un autre type de magnétisme, *l'antiferromagnétisme*, où les spins sont ordonnés, mais l'ordre est alterné, de sorte que l'aimantation est nulle. Cet ordre antiferromagnétique disparaît aussi au-dessus d'une certaine température, la *température de Néel*, T_N . Pour obtenir un matériau ferromagnétique ou antiferromagnétique, il faut une interaction entre les spins suffisamment intense pour les aligner ou construire un ordre alterné selon le cas. En l'absence d'une telle interaction, l'agitation thermique tend à favoriser un état où l'orientation des spins est aléatoire et l'aimantation nulle. L'origine de cette interaction ne réside pas dans le couplage entre les moments magnétiques des électrons : un calcul simple d'ordre de grandeur montre que la température de Curie, qui est de l'ordre de 10^3 K, ne dépasserait pas 1 K dans cette hypothèse. L'interaction à l'origine du magnétisme provient de la répulsion coulombienne entre électrons combinée avec l'antisymétrisation du vecteur d'état, qui a comme conséquence une compétition énergie cinétique-énergie potentielle (coulombienne). Considérons une paire d'électrons : si les électrons sont dans un état triplet de spin, leur fonction d'onde spatiale est antisymétrique, ce qui entraîne une répulsion coulombienne faible, car la fonction d'onde s'annule lorsque les deux électrons sont voisins. En revanche, l'énergie cinétique est importante, car la fonction d'onde doit varier rapidement au voisinage du point où elle s'annule. La situation inverse prévaut lorsque l'état de spin est singulet. S'il est plus intéressant de minimiser l'énergie potentielle, les deux électrons auront tendance à aligner leur spins, ce qui implique une interaction de type ferromagnétique. Si au contraire l'énergie cinétique l'emporte, on obtiendra une interaction de type antiferromagnétique avec un ordre alterné des spins.

Le théorème spin-statistique a pour conséquence que des noyaux de spin zéro comme ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ... sont des bosons, mais ces particules sont composées, et une question intéressante est de vérifier la cohérence avec le théorème spin-statistique, à partir de leur composition en constituants élémentaires (ou plus élémentaires). Naturellement la question n'a de sens que si la particule reste intacte dans les réactions qu'on lui fait éventuellement subir, par exemple parce que les énergies mises en jeu ne sont pas suffisantes pour la dissocier en ses constituants. Plutôt que de raisonner en toute généralité, nous allons nous contenter d'examiner un cas particulier, celui du deutéron. Soit $|A\rangle$ le vecteur d'état du deutéron et $\langle a \otimes b | A \rangle = \langle ab | A \rangle$ l'amplitude pour trouver dans le deutéron le proton dans l'état $|a\rangle$ et le neutron dans l'état $|b\rangle$, où nous avons supprimé le produit tensoriel pour alléger les notations. Introduisons

un second deutéron $|A_2\rangle$ en supposant pour l'instant qu'un nombre quantique distingue le proton et le neutron de ce noyau de ceux du précédent. En nous inspirant de la chromodynamique quantique, imaginons que nous puissions attribuer une couleur aux protons et aux neutrons, verte pour le premier noyau et rouge pour le second. Nous aurons donc une seconde amplitude $\langle a'_2 b'_2 | A'_2 \rangle$, le prime indiquant qu'il s'agit de neutrons et de protons rouges, tandis que l'amplitude correspondante pour le proton et le neutron verts est notée $\langle a_1 b_1 | A_1 \rangle$. Formons l'état à deux deutérons $|A_1 A'_2\rangle$. L'amplitude pour trouver le proton et le neutron verts dans les états a_1 et b_1 , le proton et le neutron rouges dans les états a'_2 et b'_2 est, en utilisant les propriétés du produit tensoriel

$$\langle a_1 b_1 a'_2 b'_2 | A_1 A'_2 \rangle = \langle a_1 b_1 | A_1 \rangle \langle a'_2 b'_2 | A'_2 \rangle$$

Mais on ne peut pas peindre les protons et les neutrons en rouge ou en vert, et il nous faut revenir au cas réel, où l'amplitude est $\langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle$. Comme le proton et le neutron sont des fermions, cette amplitude doit être antisymétrique dans les échanges de numérotation $a_1 \leftrightarrow a_2$ et $b_1 \leftrightarrow b_2$

$$\begin{aligned} \langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle &= \langle a_1 b_1 | A_1 \rangle \langle a_2 b_2 | A_2 \rangle - \langle a_2 b_1 | A_1 \rangle \langle a_1 b_2 | A_2 \rangle \\ &\quad - \langle a_1 b_2 | A_1 \rangle \langle a_2 b_1 | A_2 \rangle + \langle a_2 b_2 | A_1 \rangle \langle a_1 b_1 | A_2 \rangle \end{aligned}$$

Cette amplitude est *symétrique* dans l'échange $A_1 \leftrightarrow A_2$

$$\langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle = \langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_2 A_1 \rangle \quad (14.19)$$

et le deutéron est donc un boson. De façon générale, une particule composée d'un nombre pair de fermions est un boson, et c'est un fermion si ce nombre est impair. Ainsi le proton, formé de trois quarks de spin $1/2$, est un fermion, tandis que le méson π , formé d'un quark et d'un antiquark, est un boson. L'atome d' ^4He , formé de deux protons, deux neutrons et deux électrons, est un boson, alors que son isotope, l'atome d' ^3He , formé de deux protons, un neutron et deux électrons, est un fermion, ce qui a pour conséquence un comportement totalement différent de ces deux isotopes à basse température. On remarque que ces résultats sont compatibles avec le théorème spin-statistique, puisque qu'avec un nombre impair de particules de spin demi-entier on ne peut former qu'une particule de spin demi-entier, un fermion, tandis qu'avec un nombre pair de particules de spin demi-entier on ne peut former qu'une particule de spin entier, un boson.

14.2 Diffusion de particules identiques

Revenons à la figure 14.1 que l'on peut interpréter comme décrivant la diffusion ^{16}O - ^{18}O dans le référentiel du centre de masse. Nous supposons la dégénérescence du niveau fondamental levée par un champ magnétique : les atomes sont dans le niveau Zeeman le plus bas (*cf.* § 15.2.3). Soit $f(\theta)$

l'amplitude de diffusion d'un angle θ de la figure 14.1a : les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle θ . L'amplitude de diffusion de la figure 14.1b est alors $f(\pi - \theta)$: les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle $\pi - \theta$. Supposons, ce qui est le cas le plus plausible, que les détecteurs D_1 et D_2 ne fassent pas la distinction entre les deux isotopes. Le taux de comptage du détecteur D_1 (et aussi celui de D_2) sera alors proportionnel à

$$p(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \quad (14.20)$$

Ce résultat donne aussi la section efficace différentielle (13.12) $d\sigma/d\Omega$. Dans (14.20) nous avons additionné les *probabilités*, car les états finaux [^{16}O dans D_1 , ^{18}O dans D_2] et [^{16}O dans D_2 , ^{18}O dans D_1] sont des états finaux *différents* en principe, même si en pratique les détecteurs sont incapables de faire la différence. Dans le calcul de la section efficace totale, il faut prendre garde à ne pas faire de double comptage en multipliant (13.2) par un facteur 1/2 (ou, de façon équivalente, en restreignant l'intervalle d'intégration sur θ à $0 \leq \theta \leq \pi/2$)

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int d\Omega (|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2) \quad (14.21)$$

Passons maintenant au cas de la diffusion ^{16}O - ^{16}O . Bien que les interactions de physique atomique entre les deux isotopes soient strictement identiques, les résultats sont totalement différents. En effet les processus de la figure 14.1a et 14.1b ne peuvent plus être distingués, *même en principe*, et il faut donc ajouter les *amplitudes*. L'amplitude de diffusion $f(\theta)$ est définie en attribuant formellement des numéros aux deux particules, les particules 1 et 2 étant déviées de l'angle θ . L'échange des deux atomes correspond à $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. L'amplitude totale s'obtient en additionnant $f(\theta)$ et $f(\pi - \theta)$, le signe + étant imposé par la symétrie dans l'échange $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. Au lieu de (14.20), la probabilité de déclencher D_1 est

$$p(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (14.22)$$

et la section efficace totale vaut

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int d\Omega |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (14.23)$$

L'addition d'amplitudes suggère que la section efficace différentielle pourra exhiber des interférences, et c'est ce qui est effectivement observé dans de nombreux exemples. On remarque que, compte tenu de la parité des polynômes de Legendre $P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$, seules les valeurs de l paires interviennent dans la décomposition en ondes partielles de

$$f_{\text{tot}}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) \quad f_{\text{tot}}(\theta) = f_{\text{tot}}(\pi - \theta)$$

L'exemple ci-dessus est celui la diffusion de deux bosons de spin zéro. La discussion est un peu plus complexe lorsque les particules ont un spin. Limitons-nous à la diffusion de deux fermions identiques de spin 1/2, par exemple deux

neutrons. Dans ce cas on peut définir comme au § 13.2.4 une amplitude de diffusion $\hat{f}(\theta)$ qui est une matrice 4×4 dans l'espace produit tensoriel des deux spins. Si \mathcal{P}_t et \mathcal{P}_s sont les projecteurs sur les états triplet et singulet, et si la diffusion ne change pas le spin total, on pourra écrire

$$\hat{f}(\theta) = [f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)]\mathcal{P}_s + [f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)]\mathcal{P}_t \quad (14.24)$$

ce qui assure l'antisymétrie espace+spin de l'amplitude. Si l'on développe suivant (13.16) $[f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)]$ et $[f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)]$ en ondes partielles, la diffusion aura lieu dans les ondes $l = 0, 2, \dots$ (ou ondes s, d, \dots) pour des neutrons dans l'état singulet, et dans les ondes $l = 1, 3, \dots$ (ou ondes p, f, \dots) pour des neutrons dans l'état triplet. La section efficace s'obtient comme au § 13.2.4. Si la polarisation initiale de l'ensemble des deux neutrons est notée α et la polarisation finale β , la section efficace différentielle sera

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = |\langle\beta|\hat{f}(\theta)|\alpha\rangle|^2 \quad (14.25)$$

Si on ne mesure pas la polarisation des neutrons finaux, on doit sommer sur β et si l'état initial est une superposition incohérente d'états de polarisation $|\alpha\rangle$ avec une probabilité p_α

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{\beta} \langle\alpha|\hat{f}^{\dagger}|\beta\rangle\langle\beta|\hat{f}|\alpha\rangle \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle\alpha|\hat{f}^{\dagger}\hat{f}|\alpha\rangle = \text{Tr}(\rho_{\text{in}}\hat{f}^{\dagger}\hat{f}) \end{aligned} \quad (14.26)$$

où ρ_{in} est l'opérateur statistique initial des états de spin

$$\rho_{\text{in}} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

Lorsque les neutrons initiaux ne sont pas polarisés, $\rho_{\text{in}} = I/4$ et

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{non pol}} &= \frac{1}{4} \text{Tr}(\hat{f}^{\dagger}\hat{f}) = \frac{1}{4} \text{Tr} \left[(f_s^{\text{tot}*}\mathcal{P}_s + f_t^{\text{tot}*}\mathcal{P}_t)(f_s^{\text{tot}}\mathcal{P}_s + f_t^{\text{tot}}\mathcal{P}_t) \right] \\ &= \frac{1}{4} \text{Tr} \left[|f_s^{\text{tot}}|^2\mathcal{P}_s + |f_t^{\text{tot}}|^2\mathcal{P}_t \right] = \frac{1}{4} |f_s^{\text{tot}}|^2 + \frac{3}{4} |f_t^{\text{tot}}|^2 \\ &= \frac{1}{4} |f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4} |f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)|^2 \end{aligned} \quad (14.27)$$

Les poids $1/4$ et $3/4$ sont bien sûr reliés au fait qu'il y a un seul état singulet et trois états triplets. La section efficace totale s'obtient par (14.23). Lorsque la diffusion est indépendante du spin, $f_s = f_t = f$, ce qui est le cas de la diffusion coulombienne de deux particules chargées, par exemple deux électrons (exercice 13.5.4)

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{non pol}} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)]$$

et le terme d'interférences est réduit d'un facteur deux par rapport à ce que l'on obtiendrait dans le cas (interdit par le théorème spin-statistique!) de la diffusion de deux fermions de spin zéro.

14.3 États collectifs de fermions

14.3.1 Le gaz de Fermi à température nulle

La statistique a une influence déterminante sur le comportement d'un système de N particules identiques, $N \gg 1$, que l'on peut appeler le comportement collectif d'un tel système. Commençons par les fermions, en examinant le cas de N fermions sans interactions. On peut par exemple supposer que ces N fermions indépendants se trouvent dans un puits de potentiel dont les niveaux d'énergie ε_α pour une particule individuelle sont étiquetés par un indice α . L'indice α représente la *totalité* des nombres quantiques nécessaires pour spécifier l'état α : impulsion, spin... Il peut parfaitement arriver, et c'est même le cas général, que plusieurs niveaux ε_α correspondent à la même valeur de l'énergie : autrement dit, les niveaux d'énergie du hamiltonien d'une particule dans le puits de potentiel sont dégénérés. Essayons de construire le niveau d'énergie fondamental de l'ensemble des N fermions. Comme on peut mettre au maximum un fermion dans un état ε_α , l'état de plus basse énergie est obtenu en remplissant les niveaux un à un à partir du niveau le plus bas, jusqu'au moment où les N fermions ont trouvé leur place dans un niveau (figure 14.2). L'état de plus grande énergie $\varepsilon_{\alpha, \max}$ que l'on a dû utiliser pour placer tous les fermions est appelé *niveau de Fermi* et noté ε_F ¹¹. Prenons comme puits de potentiel une boîte cubique de volume \mathcal{V} : un ensemble de fermions dans une boîte est appelé *gaz de Fermi*. L'état quantique d'un fermion est alors spécifié par la donnée de son impulsion \vec{p} et de la composante m_z de son spin : $\alpha = \{\vec{p}, m_z\}$. En l'absence de champ extérieur, l'énergie est purement cinétique, $\varepsilon = \vec{p}^2/(2m)$ et indépendante de m_z . À chaque valeur de \vec{p} correspondent $2s + 1$ états de même énergie et la somme sur α devient d'après (9.134)

$$\sum_{\alpha} = \sum_{\vec{p}, m_z} = (2s + 1) \sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{(2s + 1)\mathcal{V}}{h^3} \int d^3p \quad (14.28)$$

À l'énergie de Fermi ε_F correspond une *impulsion de Fermi* p_F

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \text{ ou en général } \varepsilon_F = \sqrt{p_F^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (14.29)$$

11. Du point de vue de la thermodynamique, le système de fermions que nous considérons est un système à température nulle $T = 0$. Le niveau de Fermi est aussi le potentiel chimique, puisqu'à température nulle le potentiel chimique est l'énergie nécessaire pour ajouter une particule. À température non nulle, la probabilité d'occupation des niveaux au-dessus du niveau de Fermi est différente de zéro, et le potentiel chimique ne coïncide plus avec le niveau de Fermi.

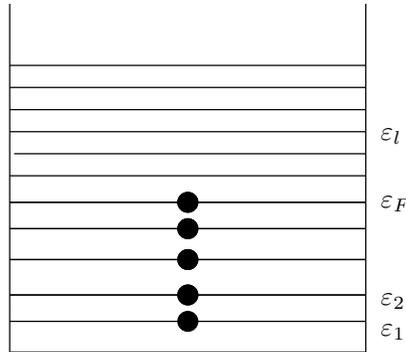


FIG. 14.2 – Remplissage des niveaux du gaz de Fermi.

souvent appelée *moment de Fermi*. Comme l'énergie est une fonction croissante de p , tous les états $\{\vec{p}, m_z\}$ tels que $p \leq p_F$ auront un nombre d'occupation égal à un. Il est maintenant immédiat de calculer l'impulsion de Fermi

$$N = \frac{(2s+1)\mathcal{V}}{h^3} \int_{p \leq p_F} d^3p = \frac{(2s+1)\mathcal{V}}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 \quad (14.30)$$

Si $n = N/\mathcal{V}$ est la densité de fermions, le moment de Fermi vaut

$$p_F = \left[\frac{6\pi^2}{2s+1} \right]^{1/3} \hbar n^{1/3} \quad (14.31)$$

Cette équation est valable aussi bien dans le régime non relativiste que relativiste. La sphère de rayon p_F est appelée *sphère de Fermi* et sa surface la *surface de Fermi*. Ces notions se généralisent au cas de la physique du solide, où l'on n'a plus la symétrie sphérique, mais une symétrie déterminée par le réseau cristallin : la surface de Fermi, qui acquiert alors une forme plus compliquée que celle d'une sphère, est un objet fondamental dans l'étude des propriétés électromagnétiques des métaux. On déduit de (14.31) l'énergie de Fermi dans le cas non relativiste où $\varepsilon = p^2/(2m)$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \left[\frac{6\pi^2}{2s+1} \right]^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} \quad (14.32)$$

La cas usuel est $s = 1/2$. L'énergie de Fermi est l'énergie caractéristique d'un système de N fermions dans une boîte de volume \mathcal{V} .

Il est utile de donner un ordre de grandeur dans le cas particulier le plus important de gaz de Fermi, celui des électrons de conduction dans un métal. Prenons l'exemple du cuivre, dont la masse volumique est 8.9 g.cm^{-3} et la masse atomique 63.5, ce qui correspond à une densité n de 8.4×10^{28} atomes par m^3 . Le cuivre ayant un électron de conduction par atome, ce chiffre donne

aussi la densité d'électrons ; reportant cette valeur dans (14.32) avec $s = 1/2$, on trouve pour le niveau de Fermi $\varepsilon_F \simeq 7.0 \text{ eV}$. Ceci est un ordre de grandeur typique pour les électrons de conduction dans un métal : l'énergie de Fermi est de quelques eV.

Calculons maintenant l'énergie du gaz de Fermi. D'après (14.28) avec $s = 1/2$, on trouve pour l'énergie du gaz

$$E = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{p_F} p^2 dp \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \quad (14.33)$$

où nous avons utilisé l'expression (14.30) de p_F en fonction de N dans le cas $s = 1/2$. Une autre expression intéressante est celle de l'énergie par particule E/N

$$\frac{E}{N} = (3\pi^2)^{2/3} \frac{3\hbar^2}{10m} n^{2/3} \quad (14.34)$$

L'énergie cinétique moyenne d'une particule augmente comme $n^{2/3}$. Dans le cas d'un gaz d'électrons, l'énergie potentielle moyenne est de l'ordre de e^2/d , où $d \propto n^{-1/3}$ est la distance moyenne entre deux électrons. L'énergie potentielle moyenne par particule est donc $\propto n^{1/3}$, et plus un gaz de Fermi est dense, plus l'énergie cinétique $\propto n^{2/3}$ l'emporte sur l'énergie potentielle. Ce résultat est à l'opposé de celui d'un gaz classique, et contrairement à un gaz classique, *un gaz de Fermi est d'autant plus proche d'un gaz parfait que sa densité est grande !*

On peut donner une image intuitive du gaz de Fermi, en remarquant que la dispersion Δp sur l'impulsion est de l'ordre de p_F , tandis que l'ordre de grandeur de la dispersion sur la position est $\mathcal{V}^{1/3}$. On tire donc de (14.31)

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar N^{1/3} \quad (14.35)$$

En raison du principe de Pauli, le \hbar de l'inégalité de Heisenberg est transformé en $\hbar N^{1/3}$: le volume occupé dans l'espace de phase est plus grand que pour des particules non identiques.

14.3.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Les manipulations de fonctions d'onde à N particules sont très fastidieuses, et pour cette raison on préfère utiliser un formalisme opératoire ou formalisme du *champ de Schrödinger*, souvent improprement appelé formalisme de la « seconde quantification ». Dans cette section nous allons établir ce formalisme dans le cas des fermions¹², et nous le transposerons dans la section

12. Afin de simplifier les notations, nous supposons que les fermions sont polarisés, de façon à pouvoir négliger les degrés de liberté de spin. Il est aussi possible de considérer des fermions de spin zéro, ce qui serait évidemment absurde dans une théorie invariante de Lorentz. En revanche, une théorie invariante de Galilée s'accommode parfaitement de fermions de spin zéro.

suivante au cas des bosons. Soit P une permutation arbitraire de $(1, \dots, N)$

$$(1, \dots, N) \xrightarrow{P} (P1, \dots, PN) \tag{14.36}$$

Cette permutation est représentée dans l'espace de Hilbert à N fermions $\mathcal{H}^{(N)}$ par un opérateur unitaire U_P

$$[U_P \Phi](\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \Phi(\vec{r}_{P1}, \dots, \vec{r}_{PN}) \tag{14.37}$$

Si δ_P est la signature de la permutation P , nous devons avoir d'après le postulat d'antisymétrisation pour les fermions

$$[U_P \Phi](\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \delta_P \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \tag{14.38}$$

Soit $\{u_\alpha(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \alpha \rangle\}$ un ensemble de fonctions d'onde orthonormées à une particule¹³

$$\int d^3r u_\alpha^*(\vec{r}) u_\beta(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta} \tag{14.39}$$

formant une base de l'espace des états à un fermion (relation de fermeture)

$$\sum_\alpha u_\alpha(\vec{r}) u_\alpha^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{14.40}$$

Une base des états à N fermions peut être construite à l'aide des fonctions d'onde normalisées

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \delta_P u_{\alpha_1}(\vec{r}_{P1}), \dots, u_{\alpha_N}(\vec{r}_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{\alpha_1}(\vec{r}_1) & \dots & u_{\alpha_1}(\vec{r}_N) \\ u_{\alpha_2}(\vec{r}_1) & \dots & u_{\alpha_2}(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{\alpha_N}(\vec{r}_1) & \dots & u_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \end{aligned} \tag{14.41}$$

L'idée de départ du formalisme opératoriel est de construire une base de l'espace de Hilbert pour N fermions en se donnant pour N fermions *indépendants* les *nombre d'occupation* n_α de chaque état $|\alpha\rangle$. En raison du principe de Pauli, le nombre n_α ne peut valoir que $n_\alpha = 0$: état $|\alpha\rangle$ non occupé, ou $n_\alpha = 1$: état $|\alpha\rangle$ occupé. Comme $n_\alpha = 0$ ou 1 , n_α vérifie $n_\alpha^2 = n_\alpha$, et de plus $\sum_\alpha n_\alpha = N$ et $E = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$ (voir la note 13). On pourra faire correspondre à un ensemble de nombres d'occupation $\{n_{\alpha_i}\}$ d'états individuels $|\alpha_i\rangle$ un état à N fermions

$$|\Phi_{n_{\alpha_1}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots}\rangle \equiv |n_{\alpha_1}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots\rangle \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_{\alpha_i} = N \tag{14.42}$$

13. Si $H^{(1)}$ est le hamiltonien pour un seul fermion, on peut par exemple prendre comme fonctions $u_\alpha(\vec{r})$ les fonctions propres d'un hamiltonien à une particule

$$H^{(1)} u_\alpha(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) u_\alpha(\vec{r}) = \varepsilon_\alpha u_\alpha(\vec{r})$$

Les états (14.42) sont appelés *états de Fock*, et ils forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert des états à N fermions. Dans l'état (14.41), $n_{\alpha_i} = 1$ pour $1 \leq i \leq N$ et $n_{\alpha_i} = 0$ pour $i > N$. Une fonction d'onde à N fermions du type (14.41) s'écrit en général

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | n_{\alpha_1}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots \rangle \quad (14.43)$$

Afin d'alléger les notations, posons $n_{\alpha_i} = n_i$. Nous allons définir l'opérateur d'annihilation c_i par son action sur un état de nombres d'occupation n_1, \dots, n_i, \dots

$$c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\eta_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (14.44)$$

c_i détruit un fermion dans l'état i . Le facteur $(-1)^{\eta_i}$ est choisi de façon à assurer l'antisymétrie dans l'échange de deux fermions, et pour définir η_i , il faut ordonner les nombres quantiques i . Cet ordre est arbitraire, mais il est fixé une fois pour toutes. Le nombre η_i est alors donné par

$$\eta_i = \sum_{k=1}^{i-1} n_k \quad (14.45)$$

Déterminons l'adjoint c_i^\dagger de c_i à l'aide de la définition de l'opérateur adjoint

$$\begin{aligned} \langle n'_1, \dots, n'_i, \dots | c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\eta_i} n_i \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_i, n_i-1} \dots \\ &= \langle n_1, \dots, n_i, \dots | c_i^\dagger |n'_1, \dots, n'_i, \dots\rangle^* \end{aligned}$$

Cette équation sera vérifiée si l'action de c_i^\dagger est donnée par

$$c_i^\dagger |n'_1, \dots, n'_i, \dots\rangle = (-1)^{\eta_i} (1 - n'_i) |n'_1, \dots, n'_i + 1, \dots\rangle \quad (14.46)$$

L'équation (14.46) montre que c_i^\dagger crée un fermion dans l'état i , pourvu que $n'_i = 0$; si $n'_i = 1$, le résultat est zéro, ce qui rend compte du principe de Pauli selon lequel on ne peut pas mettre plus d'un fermion dans le même état. Les opérateurs c_i et c_i^\dagger obéissent à des *relations d'anticommutation canoniques* (RAC). En effet, d'après (14.44) et (14.46)

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{2\eta_i} (1 - n_i)(1 + n_i) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \\ &= (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \\ c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{2\eta_i} (2 - n_i)n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \end{aligned}$$

L'*anticommutateur*

$$\{c_i, c_i^\dagger\} := c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i \quad (14.47)$$

est donc un multiple de l'identité

$$\{c_i, c_i^\dagger\} = I$$

Le facteur $(-1)^{n_i}$, qui assure l'antisymétrie du vecteur d'état, conduit à des relations d'anticommutation pour les opérateurs c_i et c_j ainsi que pour c_i^\dagger et c_j^\dagger pour $i \neq j$. On montre (exercice 14.5.6) que les relations d'anticommutation complètes sont

$$\boxed{\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} I \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \quad i \neq j} \quad (14.48)$$

L'opérateur N_i nombre de fermions dans l'état i est

$$N_i = c_i^\dagger c_i \quad N_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (14.49)$$

et l'opérateur nombre total de fermions

$$N = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^\dagger c_i \quad (14.50)$$

En effet N compte le nombre total de fermions

$$N |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left(\sum_{i=1}^{\infty} n_i \right) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (14.51)$$

Les opérateurs c_i et c_i^\dagger changent le nombre de fermions d'une unité, et ils n'agissent pas dans $\mathcal{H}^{(N)}$ mais dans l'espace \mathcal{H}_F somme directe des $\mathcal{H}^{(N)}$, appelé espace de Fock

$$\mathcal{H}_F = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}^{(N)} \oplus \dots \quad (14.52)$$

L'espace à zéro particule $\mathcal{H}^{(0)}$, ou état du vide $|0\rangle$, est annihilé par tous les c_i :

$$c_i |0\rangle = 0 \quad \forall i \quad (14.53)$$

14.3.3 Opérateurs de champ et hamiltonien

À partir des opérateurs c_i et c_i^\dagger et d'un ensemble complet de fonctions d'onde à une particule $\{u_i(\vec{r}, t)\}$ on construit les *opérateurs de champ* $\psi(\vec{r}, t)$ et $\psi^\dagger(\vec{r}, t)$ agissant dans \mathcal{H}_F

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(\vec{r}, t) \\ \psi^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^\dagger u_i^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (14.54)$$

Dans (14.54), les champs sont écrits dans le point de vue de Heisenberg ; les champs dans le point de vue de Schrödinger sont donnés par $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t = 0)$.

On montre (exercice 14.5.6) que les opérateurs ψ et ψ^\dagger sont indépendants du choix de la base $\{u_i\}$. Ils vérifient les RAC à temps égaux

$$\{\psi(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)\} = \{\psi^\dagger(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}', t)\} = 0 \quad \{\psi(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}', t)\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')I \quad (14.55)$$

La dernière relation se déduit de la relation de fermeture (14.40).

La relation d'orthogonalité (14.39) permet quant à elle de mettre l'opérateur nombre de particules sous la forme

$$N = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (14.56)$$

On en déduit les relations de commutation de N avec ψ^\dagger et ψ en utilisant

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (14.57)$$

On obtient les deux relations de commutation qui sont conjuguées hermitiennes

$$[N, \psi(\vec{r})] = -\psi(\vec{r}) \quad [N, \psi^\dagger(\vec{r})] = \psi^\dagger(\vec{r}) \quad (14.58)$$

L'interprétation physique de (14.58) est claire : ψ (ψ^\dagger) diminue (augmente) le nombre de fermions d'une unité. Notre objectif est maintenant d'écrire dans le point de vue de Schrödinger l'expression dans l'espace de Fock du hamiltonien H en fonction des opérateurs de champ. Une étape intermédiaire consiste à montrer une importante identité pour la fonction d'onde à N fermions. Soit $|\Phi_N\rangle$ un état à N fermions, vecteur propre de N

$$N|\Phi_N\rangle = N|\Phi_N\rangle \quad (14.59)$$

Nous nous proposons de montrer que la fonction d'onde correctement normalisée

$$\Phi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \Phi_N \rangle$$

peut se mettre sous la forme

$$\Phi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \psi(\vec{r}_1) \dots \psi(\vec{r}_N) | \Phi_N \rangle \quad (14.60)$$

ce que l'on peut aussi écrire

$$|\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \psi^\dagger(\vec{r}_N) \dots \psi^\dagger(\vec{r}_1) |0\rangle \quad (14.61)$$

L'opérateur $\psi^\dagger(\vec{r})$ appliqué au vide crée un état propre de la position. Pour comprendre l'origine de l'équation (14.60), on remarque tout d'abord que Φ_N est manifestement antisymétrique dans l'échange $\vec{r}_i \leftrightarrow \vec{r}_j$, en raison des RAC (14.55). Une deuxième observation est que (avec $\vec{r}_i \rightarrow i$) le produit $\psi(1) \dots \psi(N)$ détruit N fermions, et par conséquent

$$\psi(1) \dots \psi(N) | \Phi_N \rangle \propto |0\rangle$$

Évaluons la normalisation de Φ_N

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \frac{1}{N!} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \sum_n \langle \Phi_N | \psi^\dagger(N) \cdots \psi^\dagger(1) \cdots | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi(1) \cdots \psi(N) | \Phi_N \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \int d^3 r_2 \cdots d^3 r_N \langle \Phi_N | \psi^\dagger(N) \cdots \psi^\dagger(2) \mathbf{N} \psi(2) \cdots \psi(N) | \Phi_N \rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'expression (14.56) de \mathbf{N} et le fait qu'une somme $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$ sur un système complet d'états propres de \mathcal{H}_F peut être remplacée par le projecteur sur le vide $|0\rangle\langle 0|$. Nous remarquons ensuite que

$$\int d^3 r_2 \psi^\dagger(2) \mathbf{N} \psi(2) = \int d^3 r_2 \psi^\dagger(2) \psi(2) (\mathbf{N} - 1) = \mathbf{N}(\mathbf{N} - 1)$$

et par récurrence

$$\mathcal{N} = \frac{1}{N!} \langle \Phi_N | \mathbf{N}(\mathbf{N} - 1) \cdots (\mathbf{N} - N + 1) | \Phi_N \rangle = 1$$

ce qui montre que Φ_N est normalisée à l'unité. Comme cas particulier nous pouvons écrire le déterminant de Slater (14.41) comme

$$\Phi_{\alpha_1 \cdots \alpha_N}(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \psi(\vec{r}_N) \cdots \psi(\vec{r}_1) | n_{\alpha_1}, \cdots, n_{\alpha_N} \rangle \quad (14.62)$$

avec $n_{\alpha_i} = 1, 1 \leq i \leq N$, et l'ordre des opérateurs de champ assure que le signe global est correct (exercice 14.5.6). La supériorité du formalisme opératoire est manifeste : (14.62) comprend un seul terme, au lieu des $N!$ termes du déterminant de Slater (14.41).

Venons-en maintenant au hamiltonien. Nous supposons que les fermions de masse m sont soumis à un potentiel externe $U(\vec{r})$ et qu'ils interagissent deux à deux *via* un potentiel $W(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$. Nous allons montrer que l'expression du hamiltonien est

$$\begin{aligned} H &= \int d^3 r \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\vec{r}) + \int d^3 r \psi^\dagger(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi^\dagger(\vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2) W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (14.63)$$

On remarquera l'ordre des deux derniers termes dans la seconde ligne de (14.63), qui est crucial pour que le signe de cette ligne soit correct. Le hamiltonien se décompose en énergie cinétique \mathcal{K} , énergie potentielle à un corps \mathcal{U} et énergie potentielle à deux corps \mathcal{W}

$$H = \mathcal{K} + \mathcal{U} + \mathcal{W} \quad (14.64)$$

Il est immédiat de montrer que les opérateurs nombre de particules \mathbf{N} (14.50) et H commutent : $[\mathbf{N}, H] = 0$, car chacun des termes de H contient autant d'opérateurs de création que d'opérateurs d'annihilation. Le hamiltonien (14.63) *ne change pas le nombre de particules*. Il existe donc une base de

$\mathcal{H}^{(N)}$ formée de vecteurs propres $|\Phi_{EN}\rangle$ communs à H et à \mathbf{N} .

$$H|\Phi_{EN}\rangle = E|\Phi_{EN}\rangle \quad \mathbf{N}|\Phi_{EN}\rangle = N|\Phi_{EN}\rangle \quad (14.65)$$

Pour justifier l'expression de H , examinons la quantité suivante J définie par

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \psi(1) \cdots \psi(N) H | \Phi_{EN} \rangle \quad (14.66)$$

où nous avons utilisé (14.56) et la notation allégée $\vec{r}_i \rightarrow i$. J peut aussi s'écrire

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | [\psi(1) \cdots \psi(N), H] | \Phi_{EN} \rangle$$

car $H|0\rangle = 0$. En utilisant N fois la relation

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (14.67)$$

nous obtenons

$$J = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{j=0}^N \langle 0 | \psi(1) \cdots \psi(j-1) [\psi(j), H] \psi(j+1) \cdots \psi(N) | \Phi_{EN} \rangle$$

Nous devons donc calculer le commutateur $[\psi(j), H]$, ce que nous allons faire successivement pour les termes \mathcal{K} , \mathcal{U} et \mathcal{W} dans (14.64). Commençons par \mathcal{K}

$$[\psi(j), \mathcal{K}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r [\psi(j), \psi^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \psi(\vec{r})]$$

Utilisant à nouveau (14.57) nous obtenons

$$[\psi(j), \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r})] = \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \psi(\vec{r})$$

soit

$$[\psi(j), \mathcal{K}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 \psi(\vec{r}_j) \quad (14.68)$$

et de même

$$[\psi(j), \mathcal{U}] = U(\vec{r}_j) \psi(\vec{r}_j) \quad (14.69)$$

Pour traiter le terme \mathcal{W} , nous partons de

$$[\psi(j), \psi^\dagger(1) \psi^\dagger(2) \psi(2) \psi(1)] = [\psi(j), \psi^\dagger(1) \psi^\dagger(2)] \psi(2) \psi(1)$$

et nous utilisons à nouveau (14.57) pour obtenir

$$\begin{aligned} [\psi(j), \psi^\dagger(1) \psi^\dagger(2) \psi(2) \psi(1)] &= (\{\psi(j), \psi^\dagger(1)\} \psi^\dagger(2) \\ &\quad - \psi^\dagger(1) \{\psi(j), \psi^\dagger(2)\}) \psi(2) \psi(1) \\ &= \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_j) \psi^\dagger(2) \psi(2) \psi(1) \\ &\quad - \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_j) \psi^\dagger(1) \psi(2) \psi(1) \end{aligned}$$

soit, pour le commutateur $[\psi(j), \mathcal{W}]$

$$[\psi(j), \mathcal{W}] = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) W(\vec{r}, \vec{r}_j) \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}_j) = X(j) \psi(\vec{r}_j) \quad (14.70)$$

Combinant les équations (14.68) à (14.70) nous déduisons le commutateur $[\psi(j), H]$

$$[\psi(j), H] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + U(j) + X(j) \right] \psi(j) \quad (14.71)$$

Ce résultat intermédiaire est intéressant car il donne les équations du mouvement des opérateurs de champ dans le point de vue de Heisenberg

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\psi(\vec{r}, t), H] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + X(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (14.72)$$

Nous reportons ce résultat dans l'expression de J

$$\begin{aligned} J &= \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + U(j) \right) \Phi_{EN} \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{j=1}^N \langle 0 | \psi(1) \cdots \psi(j-1) X(j) \psi(j+1) \cdots \psi(N) | \Phi_{EN} \rangle \end{aligned}$$

Nous pouvons enfin commuter $X(j)$ avec $\psi(1) \cdots \psi(j-1)$ en utilisant

$$[\psi(i), X(j)] = W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi(i)$$

et finalement

$$\begin{aligned} J &= \left[\sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + U(\vec{r}_j) \right) + \sum_{i < j} W(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] \Phi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= E \Phi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \end{aligned} \quad (14.73)$$

ce qui montre que Φ_{EN} est bien solution de l'équation de Schrödinger pour N fermions dans un potentiel $U(\vec{r})$ interagissant entre eux *via* un potentiel à deux corps W ; ceci met un point final à la justification de l'expression (14.63) du hamiltonien.

14.3.4 Autres formes du hamiltonien

Pour conclure cette section, nous allons donner deux autres formes utiles du hamiltonien. Examinons d'abord le terme d'énergie cinétique que nous recevons

$$\mathcal{K} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \frac{\vec{P}^2}{2m} \psi(\vec{r}) = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}, t) K \psi(\vec{r}, t)$$

où \vec{P} est l'opérateur impulsion, avec

$$\vec{P}^2 u_j(\vec{r}) = -\hbar^2 \nabla^2 u_j(\vec{r}) \quad \text{ou} \quad \langle \vec{r} | \vec{P}^2 | j \rangle = -\hbar^2 \nabla^2 u_j(\vec{r})$$

Insérons les expressions (14.54) de $\psi(\vec{r})$ et $\psi^\dagger(\vec{r})$ dans l'expression de \mathcal{K} qui devient

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2m} \int d^3 r c_i^\dagger c_j \langle i | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{P}^2 | j \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} c_i^\dagger c_j \langle i | \nabla^2 | j \rangle$$

Répétant les mêmes manipulations sur les deux autres termes, H prend la forme

$$H = \sum_{ij} c_i^\dagger c_j \langle i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U | j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ijlm} c_i^\dagger c_j c_m c_l \langle ij | W | lm \rangle \quad (14.74)$$

avec

$$\langle ij | W | lm \rangle = W_{ij;lm} = \int d^3 r_1 d^3 r_2 u_i^*(\vec{r}_1) u_j^*(\vec{r}_2) W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) u_l(\vec{r}_1) u_m(\vec{r}_2) \quad (14.75)$$

En général le potentiel W est invariant par translation : $W = W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Si de plus $U = 0$, le système de fermions est invariant par translation, et il est naturel de choisir comme fonctions d'onde u_i des ondes planes, afin de mettre en évidence la conservation de l'impulsion, en quantifiant dans une boîte de volume \mathcal{V}

$$u_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \quad (14.76)$$

Le terme d'énergie cinétique est évidemment diagonal car nous utilisons une représentation où \vec{P} est diagonal, et les éléments de matrice (14.75) de W sont

$$\langle ij | W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | lm \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \exp \left[-i(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1 + \vec{k}_j \cdot \vec{r}_2 - \vec{k}_l \cdot \vec{r}_3 - \vec{k}_m \cdot \vec{r}_4) \right] W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Effectuons le changement de variables de jacobien unité

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (14.77)$$

Comme W ne dépend pas \vec{R} , l'intégrale sur \vec{R} donne la conservation de l'impulsion

$$\int d^3 R e^{-i(\vec{k}_i + \vec{k}_j - \vec{k}_l - \vec{k}_m) \cdot \vec{R}} = \mathcal{V} \delta_{\vec{k}_i + \vec{k}_j; \vec{k}_l + \vec{k}_m} \quad (14.78)$$

L'intégrale sur \vec{r} fait apparaître la transformée de Fourier \tilde{W} de W

$$\tilde{W}(\vec{q}) = \int d^3 r e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} W(\vec{r}) \quad (14.79)$$

avec

$$\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_l = \vec{k}_m - \vec{k}_j \quad (14.80)$$

Il est commode d'étiqueter les quatre vecteurs d'onde de la façon suivante (figure 14.3)

$$\vec{k}_l = \vec{k} \quad \vec{k}_m = \vec{k}' \quad \vec{k}_i = \vec{k} + \vec{q} \quad \vec{k}_j = \vec{k}' - \vec{q}$$

et avec ces notations, le hamiltonien devient

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{W}(\vec{q}) c_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}} \quad (14.81)$$

Le terme d'interaction se représente graphiquement sous forme d'un diagramme de Feynman (figure 14.3) : les impulsions entrantes sont $\hbar\vec{k}$ et $\hbar\vec{k}'$, les impulsions sortantes $\hbar(\vec{k} - \vec{q})$ et $\hbar(\vec{k}' + \vec{q})$ et le transfert d'impulsion est $\hbar\vec{q}$.

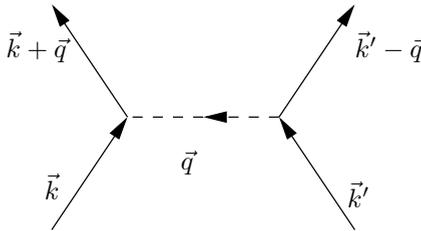


FIG. 14.3 – Diagramme de Feynman pour le terme d'interaction dans (14.81).

Comme application de (14.74), calculons la valeur moyenne de l'énergie dans l'état $|\Phi_0\rangle$ de N fermions indépendants défini par les nombres d'occupation $n_i = 1, 1 \leq i \leq N, n_i = 0, i > N$, correspondant par exemple à un état de N fermions à température nulle (§ 14.3.1)

$$|\Phi_0\rangle = |n_1 = 1, \dots, n_N = 1\rangle \quad (14.82)$$

Il suffit donc de tenir compte des états $1 \leq i \leq N$. L'action de c_i^\dagger sur $|\Phi_0\rangle$ et c_i sur $\langle\Phi_0|$ est évidente

$$c_i^\dagger |\Phi_0\rangle = 0 \quad \langle\Phi_0| c_i = 0$$

et utilisant les relations d'anticommutation nous déduisons

$$\langle\Phi_0| c_i^\dagger c_j^\dagger c_m c_l |\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0| \delta_{jm} c_i^\dagger c_l - c_i^\dagger c_m c_j^\dagger c_l |\Phi_0\rangle = \delta_{jm} \delta_{il} - \delta_{im} \delta_{jl} \quad (14.83)$$

Reportant cette équation dans le calcul de la valeur moyenne de H donne

$$\langle\Phi_0| H |\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} (K + U)_{ii} n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (W_{ij;ij} - W_{ij;ji}) n_i n_j \quad (14.84)$$

L'introduction des nombres d'occupation n_i permet de sommer jusqu'à l'infini. Le terme $W_{ij;ij}$ est appelé terme direct et $W_{ij;ji}$ terme d'échange; ce deuxième terme a manifestement pour origine l'antisymétrie du vecteur d'état.

Le résultat (14.84) pour la valeur moyenne de H est en fait un résultat de premier ordre de la théorie des perturbations (§ 15.1.2). On peut obtenir un résultat plus précis en utilisant une méthode appelée *approximation de Hartree-Fock*, exercice 14.5.7. Cette approximation montre que, dans le sous-espace des états occupés $1 \leq i \leq N$, on peut remplacer le potentiel à un corps U et le potentiel à deux corps W de H par un potentiel effectif à un corps U_{eff} dont les éléments de matrice sont donnés par

$$[U_{\text{eff}}]_{ml} = U_{ml} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (W_{jm;jl} - W_{mj;jl}) \quad (14.85)$$

et à prendre comme nouvelle base dans le sous-espace $1 \leq i \leq N$, au lieu des fonctions d'onde $u_i(\vec{r})$, les fonctions d'onde $\tilde{u}_l(\vec{r})$ qui diagonalisent le hamiltonien effectif

$$\sum_l [K + U_{\text{eff}}]_{ml} \tilde{u}_l(\vec{r}) = \tilde{\varepsilon}_m \tilde{u}_m(\vec{r}) \quad (14.86)$$

Comme les fonctions d'onde $\tilde{u}_l(\vec{r})$ servent aussi à calculer les éléments de matrice de W dans (14.85), la méthode de Hartree-Fock est appelée « autocohérente ». En résumé, le point essentiel de cette approximation est de permettre le remplacement d'un potentiel à deux corps par un potentiel effectif à un corps calculé de façon autocohérente. Chaque particule se déplace dans le champ moyen créé par les autres particules : la méthode de Hartree-Fock est en fait une approximation de champ moyen. Ceci se voit le plus clairement dans la déduction qui consiste à briser la hiérarchie BBGKY, en écrivant que la fonction de distribution à deux particules est le produit de deux fonctions de distribution à une particule : la méthode de Hartree-Fock néglige les corrélations. Les détails sont renvoyés à l'exercice 14.5.7. On peut aussi déduire (14.86) à l'aide d'un argument variationnel (§ 15.1.4), qui montre que le déterminant de Slater construit avec les fonction d'onde \tilde{u}_i déterminées de façon autocohérente est la meilleure fonction d'onde de ce type.

14.4 États collectifs de bosons

14.4.1 La condensation de Bose-Einstein

Le cas des bosons est plus complexe que celui des fermions. Il faut distinguer le cas où le nombre de bosons est variable (photons, phonons, ...), cas qui a été étudié au chapitre 11, et celui où il est fixé (atomes d' ^4He , alcalins). Dans ce dernier cas, à température strictement nulle et en supposant les bosons sans interactions, on obtient l'état fondamental de l'ensemble en mettant

tous les bosons dans l'état ε_0 de plus basse énergie. Comme dans le cas des fermions, nous nous limitons à des particules de spin zéro. Le problème consiste à montrer que si la température n'est pas nulle, une fraction *finie* des bosons reste dans cet état fondamental : c'est ce que l'on appelle la *condensation de Bose-Einstein*. Le cas de figure habituellement étudié dans les manuels de mécanique statistique est celui de la condensation dans une boîte de volume \mathcal{V} , où les fonctions d'onde sont des ondes planes (14.76) $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})/\sqrt{\mathcal{V}}$. Cette condensation ne se produit pas dans tous les cas de figure, par exemple elle ne se produit pas dans une boîte à deux dimensions, mais on montre qu'elle se produit dans une boîte à trois dimensions. La température où se produit (éventuellement) la condensation de Bose-Einstein peut être estimée en écrivant que les deux longueurs caractéristiques du problème, la longueur d'onde thermique λ_T et la distance moyenne entre bosons $d \propto n^{-1/3}$, où n est la densité de particules, sont du même ordre de grandeur : $\lambda_T \sim n^{-1/3}$. Un calcul exact confirme cette estimation. Si λ_T est la longueur d'onde thermique définie par¹⁴

$$\lambda_T = \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{1/2} \quad (14.87)$$

la température de la condensation est donnée, pour une boîte à trois dimensions, par $\lambda_T = 2.61 n^{-1/3}$.

La condensation de Bose-Einstein est une transition de phase, et en toute rigueur il est nécessaire de prendre la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $n = N/V$ fixé pour s'assurer de l'existence d'une telle transition (*cf.* Huang [1963], appendice C ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 4). Si le nombre de particules reste fini, un condensat est possible même si la transition de phase n'existe pas à la limite thermodynamique. En toute rigueur, il faut faire la distinction entre la condensation (transition de phase) et la formation d'un condensat (fraction finie des particules dans l'état fondamental).

L'hélium 4 superfluide a longtemps été le seul cas d'intérêt physique où la condensation de Bose-Einstein avait (peut-être) une application, le problème étant que la fraction d'atomes dans l'état fondamental est de l'ordre de 10 % à $T = 0$, ce qui est vraiment très loin du gaz parfait. Aujourd'hui, depuis la mise en évidence expérimentale en 1995 de la condensation de Bose-Einstein dans des gaz d'alcalins¹⁵ à des températures $\lesssim 1\mu\text{K}$, le cas intéressant est celui de la condensation dans un piège où les atomes se trouvent dans un potentiel $U(\vec{r})$. En pratique, le potentiel $U(\vec{r})$ est approximativement un potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions, avec le plus souvent une symétrie de révolution : les fréquences vérifient $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Afin de simplifier les formules, nous allons supposer les trois fréquences identiques :

14. λ_T est la longueur d'onde de de Broglie d'une particule dont l'énergie $\sim kT$. Le facteur 2π est conventionnel.

15. On a aussi obtenu des condensats avec de l'hydrogène polarisé et des atomes d'⁴He dans un état métastable.

$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$. Les niveaux d'énergie sont alors de la forme

$$\varepsilon_\alpha = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z) = \hbar\omega\ell_\alpha \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

Nous avons fixé le zéro d'énergie de sorte que l'énergie de l'état fondamental soit nulle : $\varepsilon_0 = \varepsilon(n_x = n_y = n_z = 0) = 0$. Le nombre d'occupation n_α du niveau ε_α est donné en fonction de $\beta = 1/k_B T$ et du potentiel chimique μ par

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} - 1} = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega\ell_\alpha} - 1} \quad (14.88)$$

où nous avons défini la fugacité z par $z = \exp(\beta\mu)$. Pour une température T fixée, n_α est une fonction croissante de z , et on doit avoir $0 < z < 1$ car $n_\alpha \geq 0$. À la limite $z \rightarrow 0$, on retrouve la statistique de Maxwell-Boltzmann, mais nous nous intéressons à la limite opposée $z \rightarrow 1$. Le nombre d'atomes dans l'état $\varepsilon_0 = 0$ est

$$N_0 = \frac{z}{1 - z} \quad (14.89)$$

et N_0 diverge lorsque $z \rightarrow 1$. Le point essentiel dans la condensation de Bose-Einstein est le suivant : lorsque $T \rightarrow 0$ à nombre total d'atomes N fixé, on observe une saturation de la population des niveaux excités, et lorsque les niveaux excités sont saturés, les atomes n'ont plus d'autre choix que de s'accumuler dans l'état fondamental. Inversement on peut maintenir fixe la température et ajouter des atomes jusqu'à saturation des niveaux excités. Le régime qui nous intéresse est celui où $k_B T \gg \hbar\omega$, une condition qui peut sembler surprenante dans la mesure où la condensation de Bose-Einstein est un phénomène de très basse température. En fait, le régime opposé $k_B T \ll \hbar\omega$ n'est pas intéressant, car l'état fondamental serait occupé de façon macroscopique dans ce cas qui est régi par la statistique de Maxwell-Boltzmann. On observe d'ailleurs que la condition $k_B T \gg \hbar\omega$ est toujours réalisée dans une boîte suffisamment grande¹⁶, car le premier niveau excité est de la forme $\varepsilon_1 \sim \mathcal{V}^{-2/3}$. Soit N' le nombre d'atomes dans l'ensemble des états excités : notre objectif est de trouver une borne supérieure N'_{\max} pour N' . Pour ce faire, nous utilisons le développement suivant

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \sum_{p=1}^{\infty} e^{-px}$$

16. En revanche, la somme sur α est donnée par une intégrale sur \vec{k} qui converge à trois dimensions d'espace, cas où N'_{\max} reste fini, mais qui diverge à deux dimensions, auquel cas il n'y a pas de condensation.

Compte tenu de ce que la population (14.88) d'un niveau excité est maximale pour $z = 1$ ($\mu = 0$)¹⁷, nous obtenons la borne supérieure

$$\begin{aligned} N'_{\max} &\leq \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{\alpha \neq 0} e^{-p\beta\hbar\omega\ell_{\alpha}} = \sum_{p=1}^{\infty} \left(\sum_{n_x, n_y, n_z=0}^{\infty} e^{-p\beta\hbar\omega\ell_{\alpha}} - 1 \right) \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} \left[\left(\frac{1}{1 - e^{-p\beta\hbar\omega}} \right)^3 - 1 \right] \end{aligned} \quad (14.90)$$

On peut maintenant développer le terme entre crochets de (14.90) pour $y = p\beta\hbar\omega \ll 1$

$$\left[\left(\frac{1}{1 - e^{-y}} \right)^3 - 1 \right] = \frac{1}{y^3} + \frac{3}{2y^2} + \dots \quad (14.91)$$

et sommer terme à terme pour obtenir¹⁸

$$N'_{\max} = \zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 + \frac{3\zeta(2)}{2} \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^2 + \dots \quad (14.92)$$

L'échange de la sommation sur p et de la sommation dans le membre de droite de (14.91) n'est pas valable pour les termes ultérieurs du développement. À l'ordre dominant en $(k_B T/\hbar\omega)$, la fraction de particules dans l'état fondamental est bornée inférieurement par

$$\frac{N_0}{N} \geq \frac{N - N'_{\max}}{N} \simeq 1 - \frac{\zeta(3)}{N} \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 = 1 - \left(\frac{T}{T_C^0} \right)^3 \quad (14.93)$$

où la température critique de la transition de Bose-Einstein T_C^0 est donnée par

$$N = \zeta(3) \left(\frac{k_B T_C^0}{\hbar\omega} \right)^3 \quad (14.94)$$

Ces résultats se généralisent à un potentiel $U(\vec{r})$ de forme quelconque (mais suffisamment régulière) si l'on utilise une approximation semi-classique (exercice 14.5.8). La température de transition et N_0/N , (14.93) et (14.94), sont spécifiques de l'oscillateur harmonique : par exemple, dans le cas de la condensation de Bose-Einstein dans une boîte, la température critique est donnée en fonction de la densité n par (14.87) et N_0/N par

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_C^0} \right)^{3/2} \quad (14.95)$$

17. La valeur $\mu = 0$ est valable à la limite thermodynamique. Pour N fini, $\mu \sim 1/N$ (cf. Huang [1963], chapitre 12 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 5).

18. On rappelle que la fonction de Riemann $\zeta(n)$ est définie par

$$\zeta(n) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p^n}$$

avec $\zeta(3/2) \simeq 2.612$, $\zeta(2) = \pi^2/6 \simeq 1.645$, $\zeta(3) \simeq 1.202$.

14.4.2 L'équation de Gross-Pitaevskii

Nous avons jusqu'à présent traité les bosons comme des particules indépendantes. Il nous faut maintenant examiner l'influence des interactions sur la condensation, en nous limitant au cas de la température nulle : $T = 0$. Le potentiel d'interaction W entre deux alcalins est bien connu, mais il n'est pas possible de l'utiliser directement¹⁹. En effet, nous allons nous servir de techniques inspirées de l'approximation de Hartree-Fock ou de champ moyen, qui négligent les corrélations à deux particules et plus. Ceci suppose que l'interaction soit traitée à l'approximation de Born, ce qui n'est pas possible avec le potentiel W . On a recours au pseudo-potentiel du § 13.2.3, valable pour les faibles énergies, et donné en fonction de la longueur de diffusion a et de la masse m des bosons par (13.44)

$$W(\vec{r})_{\bullet} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r}) \frac{d}{dr}(r_{\bullet}) \quad (14.96)$$

La condition de validité de l'approximation de Born est que l'état de diffusion soit en moyenne peu différent d'une onde plane, ce qui implique $|a|/r \ll 1$ en moyenne, soit $|a| \ll n^{-1/3}$, où n est la densité d'atomes. Nous verrons au § 14.4.3 que le petit paramètre de la théorie est effectivement $(na^3)^{1/2}$, et ce paramètre est de l'ordre de 1 % dans des conditions expérimentales typiques. Dans ces conditions, (14.96) peut être remplacé par

$$W(\vec{r}) \rightarrow W_0 \delta(\vec{r}) \quad W_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (14.97)$$

Il ne faut surtout pas utiliser ce potentiel au-delà de l'approximation de Born : en fait l'amplitude de diffusion exacte du potentiel²⁰ (14.97) est strictement nulle ! En première approximation, tous les bosons ont pour fonction d'onde celle de l'état fondamental $\varphi(\vec{r})$, et la fonction d'onde d'ensemble symétrisée est

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \varphi(\vec{r}_i) \quad (14.98)$$

la fonction $\varphi(\vec{r})$ étant normalisée par

$$\int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (14.99)$$

Le hamiltonien de l'ensemble des N bosons est

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{P}_i^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] + W_0 \sum_{i < j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (14.100)$$

19. Un calcul exact de mécanique statistique d'équilibre avec le potentiel exact donnerait un état stable formé de molécules. Les condensats de Bose-Einstein sont des états métastables. Pour former des molécules, il faut passer par l'intermédiaire de collisions à trois corps afin de conserver l'énergie-impulsion, et ces collisions sont très peu probables à faible densité.

20. Le pseudo-potentiel et les conditions de sa validité sont étudiées très en détail dans Huang [1963], chapitre 13.

et l'énergie de l'état (14.98) se calcule immédiatement

$$E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = N \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} \varphi)^2 + U(\vec{r}) |\varphi(\vec{r})|^2 + \frac{N-1}{2} W_0 |\varphi(\vec{r})|^4 \right] \quad (14.101)$$

La densité de bosons est $n(\vec{r}) = N |\varphi(\vec{r})|^2$, et ceci suggère d'introduire une « fonction d'onde de l'état condensé », ou fonction d'onde macroscopique²¹

$$\psi(\vec{r}) = N^{1/2} \varphi(\vec{r}) \quad |\psi(\vec{r})|^2 = n(\vec{r}) \quad (14.102)$$

L'expression (14.101) de l'énergie se réécrit en fonction de $\psi(\vec{r})$

$$E = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} \psi)^2 + U(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} W_0 |\psi(\vec{r})|^4 \right] \quad (14.103)$$

Comme $N \gg 1$, nous avons remplacé $N - 1$ par N . Pour trouver la forme optimale de ψ , nous allons utiliser une méthode variationnelle en prenant des variations indépendantes par rapport à ψ et ψ^* , avec la contrainte d'un nombre de particules fixé

$$N = \int d^3r |\psi(\vec{r})|^2 \quad (14.104)$$

Il faut donc introduire un multiplicateur de Lagrange, le potentiel chimique μ , et minimiser $E - \mu N$. La minimisation par rapport à ψ^* a pour résultat

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + W_0 |\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) \quad (14.105)$$

Cette équation est l'équation de Gross-Pitaevskii indépendante du temps, aussi appelée équation de Schrödinger non linéaire²².

Nous allons maintenant supposer $a > 0$, ce qui correspond à des interactions effectives répulsives ; le cas attractif $a < 0$ ne conduit pas à une transition de phase, bien que l'on puisse observer des condensats de quelques milliers d'atomes. Si l'on met suffisamment d'atomes dans un piège avec des interactions répulsives, on observera un équilibre mécanique dû à une compensation entre les forces harmoniques, qui tendent à ramener les atomes vers le centre du piège, et les forces répulsives, qui tendent à augmenter la taille du condensat. Le rayon R du condensat va devenir très grand par rapport à l'extension de la fonction d'onde du fondamental

$$R \gg \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$$

21. Une introduction lumineuse au concept de fonction d'onde macroscopique est donnée dans Feynman *et al.* [1965], vol III, chapitre 21.

22. Cette équation intervient dans de nombreux domaines de la physique : mécanique des fluides, propagation dans les fibres optiques, etc.

L'énergie cinétique devient alors beaucoup plus petite que l'énergie potentielle

$$\frac{E_{\text{cin}}}{E_{\text{pot}}} \sim \frac{\hbar^2/(mR^2)}{m\omega^2 R^2} = \left(\frac{\hbar}{m\omega R^2} \right)^2 \ll 1$$

et l'équation de Gross-Pitaevskii se simplifie

$$[U(\vec{r}) + W_0 |\psi(\vec{r})|^2] \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) \quad (14.106)$$

La solution de (14.106) s'écrit en fonction de la densité $n(r)$, si on suppose le piège à symétrie sphérique

$$n(r) = |\psi(r)|^2 = \frac{\mu - U(r)}{W_0} \quad (14.107)$$

La limite r_{max} du condensat est donnée par $U(r_{\text{max}}) = \mu$. L'équation (14.107) s'écrit aussi

$$\mu = W_0 n(r) + U(r) \quad (14.108)$$

Comme μ est le potentiel chimique, cette équation implique que l'énergie nécessaire pour ajouter un atome au condensat est, dans le cadre de notre approximation, la somme de l'énergie potentielle $U(r)$ dans le piège et du terme $W_0 n(r)$ proportionnel à la densité, représentant l'interaction type champ moyen de l'atome supplémentaire avec les atomes du condensat.

Reste à exprimer μ en fonction du nombre d'atomes. La condition de normalisation de n est

$$N = \int d^3r n(r) = \frac{1}{W_0} \int_{r=0}^{r_{\text{max}}} [\mu - U(r)] d^3r \quad (14.109)$$

où r_{max} est déterminé en fonction de μ par

$$U(r_{\text{max}}) = \frac{1}{2} m\omega^2 r_{\text{max}}^2 = \mu$$

ce qui donne

$$N = \frac{8\pi}{15} \left(\frac{2\mu}{m\omega^2} \right)^{3/2} \frac{\mu}{W_0} \quad (14.110)$$

De l'équation familière en thermodynamique $\mu = \partial E / \partial N$ (rappelons que $T = 0$) et $\mu \propto N^{2/5}$ on déduit l'énergie par boson E/N

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{7} \mu \quad (14.111)$$

ce qui montre que $\mu \neq E/N$.

14.4.3 L'approximation de Bogoliubov

Le formalisme du champ de Schrödinger que nous avons établi pour les fermions se transpose sans difficulté aux bosons. Aux opérateurs c_i et c_i^\dagger on substitue des opérateurs a_i et a_i^\dagger qui obéissent à des relations de *commutation* canoniques (RCC), analogues à celles écrites pour le champ électromagnétique (11.92)

$$[a_i, a_i^\dagger] = \delta_{ij} I \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (14.112)$$

On définit par analogie avec (14.54) des champs bosoniques $\psi(\vec{r}, t)$ et $\psi^\dagger(\vec{r}, t)$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i u_i(\vec{r}, t) \\ \psi^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i^\dagger u_i^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (14.113)$$

qui obéissent, au lieu de (14.55), à des relations de commutation à temps égaux

$$[\psi(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)] = [\psi^\dagger(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}', t)] = 0 \quad [\psi(\vec{r}, t), \psi^\dagger(\vec{r}', t)] = \delta(\vec{r} - \vec{r}') I \quad (14.114)$$

L'opérateur nombre de bosons N et les relations de commutation de N avec ψ et ψ^\dagger sont identiques à (14.56) et (14.58). La fonction d'onde à N bosons est donnée par (14.60) et le hamiltonien par (14.63). Nous nous plaçons dans le cas invariant par translation ($U = 0$), c'est-à-dire dans une boîte de volume \mathcal{V} , et compte tenu de (14.81) et de (14.97), le hamiltonien effectif est

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}^0 a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{W_0}{2\mathcal{V}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'} \quad (14.115)$$

avec $\varepsilon_{\vec{k}}^0 = \hbar^2 k^2 / 2m$. Comme première application du formalisme opératoire, nous allons retrouver l'équation de Gross-Pitaevskii. L'équation du mouvement du champ ψ est donnée par la même formule que dans le cas des fermions (14.72)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= (K + U)\psi(\vec{r}, t) + \int d^3 r' \psi^\dagger(\vec{r}', t) W(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}', t) \psi(\vec{r}, t) \\ &= [K + U + W_0 \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)] \psi(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (14.116)$$

Remplaçons l'opérateur de champ ψ par un champ classique, en conservant la même notation. L'interprétation physique de $|\psi|^2$ est la même que précédemment, car le nombre de bosons est d'après (14.56)

$$N = \int d^3 r |\psi(\vec{r})|^2 \quad (14.117)$$

et $|\psi(\vec{r})|^2$ est la densité $n(\vec{r})$. Le remplacement par un champ classique dans (14.116) nous donne une équation du mouvement pour ce champ : l'équation de Gross-Pitaevskii est donc une approximation classique, qui néglige les fluctuations quantiques. Un condensat de Bose-Einstein est, en première approximation, un état classique d'un champ atomique.

Poursuivant cette approche à l'équation de Gross-Pitaevskii, nous allons maintenant prendre en compte les fluctuations quantiques en décomposant l'opérateur de champ en une partie classique et un champ quantique que nous allons traiter à l'ordre le plus bas

$$\psi = \sqrt{N_0} + \delta\psi \tag{14.118}$$

La partie classique $\sqrt{N_0}$ est uniforme en raison de l'invariance par translation, et elle est normalisée par le nombre N_0 de bosons dans l'état fondamental d'impulsion nulle $\hbar\vec{k} = 0$. Nous supposons que $(N - N_0) \ll N$: le nombre de bosons dans les états excités $\vec{k} \neq 0$ doit rester petit, et l'opérateur $\delta\psi$ sera traité comme une correction. La décomposition (14.118) revient à remplacer les opérateurs a_0 et a_0^\dagger par $\sqrt{N_0}$, et manifestement elle ne conserve pas le nombre de particules. C'est un inconvénient de cette approche initiale de Bogoliubov ; on peut éviter cette approximation (voir par exemple Castin [2001], section 7, ou Leggett [2001], section VIII), mais le formalisme devient plus lourd et nous nous en tiendrons à (14.118) dans cet exposé élémentaire. Le développement de $\delta\psi$ contient uniquement des impulsions $\hbar\vec{k} \neq 0$

$$\delta\psi = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \tag{14.119}$$

Dans ces conditions, en reportant la décomposition (14.118) dans l'expression (14.115) de H et en conservant seulement les termes quadratiques en $\delta\psi$ et $\delta\psi^\dagger$, on obtient

$$H = \frac{N_0^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} (\varepsilon_{\vec{k}}^0 + 2n_0 W_0) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{n_0 W_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \right) \tag{14.120}$$

Le facteur 2 devant $n_0 W_0$ est dû à l'addition du terme direct et du terme d'échange, voir (14.84) : le signe (-) devant le terme d'échange devient un signe (+) dans le cas de bosons. L'expression précédente pour H a l'inconvénient de faire intervenir N_0 , qui est inconnu. Il est préférable de tout exprimer en fonction de N en utilisant

$$N = N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

et (14.120) se met sous la forme suivante, en symétrisant le deuxième terme et en remplaçant N par sa valeur numérique N

$$H = \frac{N^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(\varepsilon_{\vec{k}}^0 + n_0 W_0 \right) \left(a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} \right) + \frac{n_0 W_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \right) \quad (14.121)$$

Comme N est peu différent de N_0 , on peut remplacer n_0 par n dans le cadre de nos approximations ; les termes aa et $a^\dagger a^\dagger$ ne conservent pas le nombre de particules excitées, et on considère que les particules dans l'état fondamental $\vec{k} = 0$ jouent le rôle de réservoir de particules $\vec{k} \neq 0$. Le hamiltonien (14.121) est diagonalisé grâce à la *transformation de Bogoliubov*, qui est une transformation canonique : elle préserve les relations de commutation²³. Cette transformation consiste à définir des opérateurs $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^\dagger$ par

$$a_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger \quad a_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} - v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger \quad (14.122)$$

où les coefficients réels $u_{\vec{k}}$ et $v_{\vec{k}}$ vérifient $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$. En inversant (14.122), on s'assure que les relations de commutation de $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^\dagger$ sont bien les RCC

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, I \quad [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}] = [b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}'}^\dagger] = 0$$

Le vide $|\Psi_0\rangle$ des nouveaux opérateurs est défini par $b_{\vec{k}}|\Psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{k} \neq 0$. Le choix suivant des coefficients $u_{\vec{k}}$ et $v_{\vec{k}}$

$$u_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_{\vec{k}}}{\varepsilon_{\vec{k}}} + 1 \right) \quad v_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_{\vec{k}}}{\varepsilon_{\vec{k}}} - 1 \right)$$

avec $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}}^0 + nW_0$ et

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\vec{k}}^0 + nW_0)^2 - (nW_0)^2} \quad (14.123)$$

permet d'éliminer les termes en $b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}^\dagger$ et de diagonaliser le hamiltonien en le mettant sous la forme du hamiltonien d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants

$$H = \frac{N^2 W_0}{2\mathcal{V}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \varepsilon_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{\vec{k}}^0 + nW_0 - \varepsilon_{\vec{k}}) \quad (14.124)$$

23. Cette transformation est identique à celle utilisée pour obtenir les états comprimés dans le § 11.4.1.

L'équation (14.123) définit une loi de dispersion pour les *excitations élémentaires*, ou *quasi-particules* : l'opérateur $b_{\vec{k}}^\dagger$ appliqué à $|\Psi_0\rangle$ crée une excitation élémentaire d'impulsion $\hbar\vec{k}$ et d'énergie $\varepsilon_{\vec{k}}$, et le condensat se comporte comme un gaz d'excitations élémentaires indépendantes. Pour des petites valeurs de k on trouve une loi de dispersion linéaire

$$\varepsilon_{\vec{k}} \simeq \left(\frac{\hbar n W_0}{m} \right) k = \left(\frac{4\pi\hbar^2 n a}{m^2} \right) k = \hbar c_s k \quad (14.125)$$

Ce calcul confirme que l'on doit avoir $a > 0$: le cas $a < 0$ conduit à des instabilités, car l'argument de la racine carrée dans (14.123) peut devenir négatif. L'équation (14.125) définit une vitesse du son $c_s = nW_0/m$. Les excitations élémentaires dans le condensat sont donc des phonons, comme ceux de l' ^4He . La densité d'atomes dans les états excités peut se calculer comme

$$n_{\text{exc}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\vec{k} \neq 0} v_{\vec{k}}^2 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{m c_s}{\hbar} \right)^3$$

équation qui se met sous la forme

$$\frac{n_{\text{exc}}}{n} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (n a^3)^{1/2} \quad (14.126)$$

Notre approximation de départ (14.118) reposait sur la condition $n_{\text{exc}}/n \ll 1$. La cohérence de notre calcul implique la condition $(n a^3)^{1/2} \ll 1$, et le petit paramètre est $(n a^3)^{1/2}$. Le calcul de l'énergie de l'état fondamental E_0 est plus délicat. Comme l'état fondamental est caractérisé par $b_{\vec{k}}|\Psi_0\rangle = 0$, on pourrait naïvement penser que

$$\frac{E_0}{\mathcal{V}} = \frac{n^2 W_0}{2} - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\varepsilon_{\vec{k}}^0 + n W_0 - \varepsilon_{\vec{k}})$$

mais ce résultat est incorrect, parce que l'on utilise le potentiel (14.97) en dehors de son domaine de validité. Le calcul correct donne

$$\frac{E_0}{\mathcal{V}} = \frac{n^2 W_0}{2} \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (n a^3)^{1/2} \right] \quad (14.127)$$

En résumé, le petit paramètre de l'approximation de Bogoliubov est $(n a^3)^{1/2}$. La condition $(n a^3)^{1/2} \ll 1$ est précisément celle de validité de l'approximation de Born pour le pseudo-potentiel, et elle est bien vérifiée dans des conditions expérimentales typiques où ce paramètre $\lesssim 1\%$. Il reste à généraliser l'approximation de Bogoliubov au cas d'un piège non invariant par translation. Cette généralisation est possible, et nous renvoyons le lecteur intéressé à la bibliographie.

La propriété la plus remarquable des condensats de Bose-Einstein est celle de superfluidité, c'est-à-dire l'existence d'écoulements présentant une viscosité nulle, propriété que ces condensats partagent avec d'autres systèmes physiques. $L^4\text{He}$ est superfluide à des températures $\lesssim 3\text{K}$, $L^3\text{He}$ à des températures $\lesssim 2\text{mK}$, et la supraconductivité présente de nombreux traits communs avec la superfluidité. Cependant, la superfluidité est un phénomène dont la description théorique est complexe, parce qu'elle fait intervenir des situations hors équilibre, et son étude détaillée sort du cadre de ce livre. Dans la situation simple de l'écoulement d'un superfluide dans un tore, on montre que la circulation de la vitesse le long d'un contour fermé tracé à l'intérieur du tore est quantifiée en unités de $2\pi\hbar/m$. Un écoulement correspondant à une circulation $2\pi p\hbar/m$, p entier, est en fait un état métastable de très longue durée de vie. On observe également des vortex, ou tourbillons, dans un superfluide, et à nouveau la circulation de la vitesse est quantifiée en unités de $2\pi\hbar/m$ le long d'un contour fermé tracé autour du cœur du vortex.

14.5 Exercices

14.5.1 Particule Ω^- et couleur

L'hypéron Ω^- (masse $1675\text{ MeV}/c^2$) est une particule de spin $3/2$, composée de trois quarks étranges de spin $1/2$. Le modèle des quarks requiert que la fonction d'onde spatiale ne s'annule pas. En déduire que les trois quarks ne peuvent pas être tous identiques. Au début des années 1970, cette observation a été un des arguments en faveur de l'introduction du concept de « couleur » (à l'origine de la chromodynamique quantique) permettant de distinguer entre les quarks : les trois quarks du Ω^- ont des couleurs différentes.

14.5.2 Parité du méson π

1. Si l'on envoie des mésons π^- de basse énergie sur une cible de deutérium, ces mésons peuvent être capturés et former des états liés analogues à ceux d'un atome d'hydrogène. Donner l'expression de l'énergie de ces états liés méson π -deutérium, sachant que la masse du méson π est de l'ordre de $139\text{ MeV}/c^2$ et celle du deutérium de $1875\text{ MeV}/c^2$. Le méson π est capturé dans un état de nombre quantique principal n élevé et termine sa cascade radiative dans le niveau fondamental²⁴ $1s$ après émission de photons. Montrer que l'énergie de ces photons se place dans le domaine des rayons X.

2. Une fois arrivé dans l'état $1s$, le méson π subit une interaction nucléaire qui entraîne la réaction



avec deux neutrons n dans l'état final. Sachant que le spin du noyau de deutérium (ou deutéron) est 1 et que celui du méson π^- est nul, quel est l'état de moment angulaire initial de la réaction ? Montrer que les deux neutrons finaux ne peuvent être que dans l'état de moment angulaire orbital total $L = 1$ et de spin total $S = 1$, c'est-à-dire dans l'état 3P_1 . Si l'on attribue par convention une parité positive aux nucléons (protons et neutrons), et

24. La réaction nucléaire a aussi une petite probabilité de se produire dans un état ns , $n \neq 1$, c'est-à-dire pour des états où la probabilité de présence est non nulle à l'origine, mais cela ne change pas l'argument.

sachant que le moment angulaire orbital du deuteron est nul²⁵ (le deuteron est un état 3S_1), en déduire que le méson π a une parité négative. La parité est conservée dans la réaction.

14.5.3 Fermions de spin 1/2 dans un puits infini

On considère deux fermions identiques de spin 1/2 dans un puits de potentiel cubique infini de côté L . Si ces deux fermions sont sans interaction entre eux, quelles sont les valeurs propres possibles de l'énergie totale et les fonctions d'onde correspondantes (espace et spin) ? On suppose que les deux fermions interagissent *via* un potentiel

$$V = V_0 \delta^{(3)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

où \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sont les positions des deux fermions. Montrer que les états triplets ne sont pas affectés par ce potentiel.

14.5.4 Désintégration du positronium

Le positronium est un état lié électron-positron ($e^- - e^+$) ; le positron est une particule ayant la même masse m_e que l'électron et une charge opposée $-q_e$.

1. On ne tient pas compte dans cette question du spin des deux particules. Sachant que les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène pour un proton infiniment lourd sont de la forme ($e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$)

$$E_n = \frac{E_0}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

quels sont les niveaux d'énergie du positronium ?

2. L'électron et le positron ont un spin 1/2. L'état de plus basse énergie, ou état fondamental, $n = 1$, a un moment angulaire orbital $l = 0$ (onde s). Quelles sont les valeurs possibles du moment angulaire total j du positronium dans cet état $n = 1$?

3. Le positronium dans son état fondamental se désintègre en deux²⁶ photons

$$e^- + e^+ \rightarrow 2\gamma$$

Dans le référentiel où le positronium est au repos, les deux photons partent avec des impulsions opposées. On choisit pour axe Oz la direction de l'impulsion de l'un des photons. En utilisant la conservation du moment angulaire, montrer que les deux photons ont nécessairement la même polarisation circulaire, soit droite, soit gauche. Suggestion : dessiner un schéma de la désintégration.

4. En examinant l'effet d'une rotation de π autour de l'axe Oy et en tenant compte de l'identité des deux photons, montrer que seul un des deux états de moment angulaire j du positronium peut se désintégrer en deux photons²⁷.

5. Soit Π l'opérateur parité, qui agit sur l'état $|A\rangle$ d'une particule A suivant $\Pi|A\rangle = \eta_A|A\rangle$, où η_A est la parité de A . On peut montrer que $\eta_{e^-}\eta_{e^+} = -1$. En déduire que la parité de

25. Le deuteron a aussi une petite composante d'onde d , et donc une composante 3D_1 , mais cela n'affecte en rien l'argument.

26. La désintégration $e^- + e^+ \rightarrow \gamma$ est interdite par la conservation de l'énergie-impulsion.

27. L'autre état doit se désintégrer en trois photons.

l'état fondamental du positronium est -1 . On peut écrire les deux états possibles pour les deux photons sous la forme

$$(i) |\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|DD\rangle + |GG\rangle) \quad (ii) |\Phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|DD\rangle - |GG\rangle)$$

où $|D\rangle$ et $|G\rangle$ représentent des états de polarisation circulaire droite et gauche. Lequel des états (i) ou (ii) est obtenu dans la désintégration du positronium²⁸, sachant que la parité est conservée ?

14.5.5 lame séparatrice et fermions

On reprend l'expérience décrite dans la figure 11.3, en remplaçant les photons incidents par des fermions dans un même état de spin. Les opérateurs correspondant aux modes a et b vérifient les RAC

$$\{a, a^\dagger\} = \{b, b^\dagger\} = I$$

Montrer que l'opérateur G (11.115) est remplacé par

$$G = ab^\dagger - a^\dagger b$$

et calculer l'action de $U(\lambda) = \exp(i\lambda G)$ sur les opérateurs a et b . Que se passe-t-il à la sortie de la lame si l'état à l'entrée de la lame est $|1_a 1_b\rangle$?

14.5.6 Fonctions d'onde et opérateurs de champ

1. Écrire la représentation matricielle des opérateurs c_i, c_i^\dagger et N_i avec le choix suivant de vecteurs de base

$$|n_i = 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |n_i = 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Vérifier les RAC (14.48) en utilisant les propriétés du facteur η_i (14.45).

2. Soit S une matrice unitaire. Définissons les opérateurs b_j à partir des c_i par

$$b_j = \sum_k S_{jk} c_k$$

Montrer que cette transformation est une transformation canonique, c'est-à-dire qu'elle préserve les relations d'(anti)commutation

$$\{b_j, b_m^\dagger\} = \delta_{jm} I \quad \{b_j, b_m\} = \{b_j^\dagger, b_m^\dagger\} = 0$$

Au lieu d'une base de fonctions d'onde orthonormées $u_i(\vec{r})$ (14.54), on choisit une autre base

$$v_j = \sum_k S_{jk}^{-1} u_k$$

Montrer que l'opérateur de champ est

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j b_j v_j(\vec{r})$$

²⁸ Les corrélations de polarisation des deux photons ont été mesurées par Wu et Shakhonov [1950], qui ont pu vérifier que la parité de l'état fondamental était bien -1 .

3. Montrer que la fonction d'onde (14.62) est identique au déterminant de Slater (14.41). Suggestion : les niveaux étant rangés dans l'ordre

$$\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N$$

montrer que le terme

$$u_{\alpha_1}(\vec{r}_1) u_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots u_{\alpha_N}(\vec{r}_N)$$

a le même signe que dans le développement du déterminant de Slater.

14.5.7 Hiérarchie BBGKY et approximation de Hartree-Fock

1. On définit la matrice statistique à une particule (à un facteur multiplicatif N près) pour un état à N fermions $|\Phi_N\rangle$ par

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}) = \langle \Phi_N | \psi^\dagger(\vec{y}) \psi(\vec{x}) | \Phi_N \rangle = \langle \vec{x} | \rho^{(1)} | \vec{y} \rangle \quad (14.128)$$

Montrer que

$$\text{Tr} \rho^{(1)} = \int d^3 z \rho^{(1)}(\vec{z}, \vec{z}) = N$$

Quelle est l'interprétation physique de $\rho^{(1)}(\vec{z}, \vec{z})$? Écrire $\text{Tr} \rho^{(1)}$ en terme de la fonction d'onde $\Phi_N(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}) = N \int d^3 x_2 \dots d^3 x_N \Phi_N^*(\vec{y}, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \Phi_N(\vec{x}, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$$

Suggestion : utiliser (14.61). Si $|\Phi_N\rangle$ est un état défini par des nombres d'occupation $n_1 = n_2 = \dots = n_N = 1$, tous les autres n_i étant nuls, montrer que

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^N u_i(\vec{x}) u_i^*(\vec{y}) \quad (14.129)$$

où les u_i sont les fonctions propres d'un hamiltonien à une particule h_1

$$h_1 u_i(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + U(\vec{x}) \right] u_i(\vec{x}) = \varepsilon_i u_i(\vec{x}) \quad (14.130)$$

En déduire que l'évolution de $\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t)$ peut s'écrire

$$i\hbar \partial_t \rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}]$$

2. La matrice statistique à deux particules (à un facteur multiplicatif $N(N-1)$ près) est définie par

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \langle \Phi_N | \psi^\dagger(\vec{y}_1) \psi^\dagger(\vec{y}_2) \psi(\vec{x}_2) \psi(\vec{x}_1) | \Phi_N \rangle \quad (14.131)$$

Montrer que $\rho^{(2)}$ est antisymétrique dans l'échange $\vec{x}_1 \leftrightarrow \vec{x}_2$ (ou $\vec{y}_1 \leftrightarrow \vec{y}_2$) et que la trace partielle sur la particule 2 est donnée par

$$\text{Tr}_2 \rho^{(2)} = \int d^3 z \rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{z}; \vec{y}, \vec{z}) = (N-1) \rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y})$$

Quelle est l'interprétation physique de $\rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}; \vec{x}, \vec{y})$? Donner l'expression de $\rho^{(2)}$ dans le cas de fermions indépendants et vérifier que $\text{Tr}_2 \rho^{(2)} = (N-1) \rho^{(1)}$.

3. On se propose d'obtenir l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ lorsque le hamiltonien est donné par (14.63). Montrer que la contribution de \mathcal{W} à cette évolution est

$$i\hbar\partial_t^{\mathcal{W}}\rho^{(1)} = \int d^3z [W(\vec{z}, \vec{x}_1) - W(\vec{z}, \vec{y}_1)]\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{z}; \vec{y}_1, \vec{z})$$

et que l'équation d'évolution complète peut s'écrire sous la forme

$$i\hbar\partial_t\rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}] + \text{Tr}_2([W, \rho^{(2)}])$$

Suggestion : justifier l'égalité

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W | \vec{y}_1 \vec{y}_2 \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{y}_1) \delta^{(3)}(\vec{x}_2 - \vec{y}_2) W(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

L'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ fait intervenir $\rho^{(2)}$, on montrerait de même que celle de $\rho^{(2)}$ fait intervenir $\rho^{(3)}$, etc. : c'est la hiérarchie dite BBGKY²⁹.

4. *Approximation de Hartree.* Pour « briser la hiérarchie BBGKY », on utilise l'approximation de Hartree : on suppose que $\rho^{(2)}$ s'exprime en fonction de $\rho^{(1)}$, autrement dit on néglige les corrélations à deux particules

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) \simeq \rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{y}_2) \quad (14.132)$$

Montrer que l'action de \mathcal{W} se réduit alors à celle d'un potentiel à une particule

$$W_{\text{eff}}(\vec{x}_1) = \int d^3z W(\vec{z}, \vec{x}_1)\rho^{(1)}(\vec{z}, \vec{z})$$

Soit $\tilde{u}_i(\vec{x})$ les fonctions propres du hamiltonien effectif à une particule

$$h_1^{\text{eff}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + U(\vec{x}) + W_{\text{eff}}(\vec{x}) \quad h_1^{\text{eff}}\tilde{u}_i(\vec{x}) = \tilde{\varepsilon}_i\tilde{u}_i(\vec{x})$$

Montrer que

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^N \tilde{u}_i(\vec{x})\tilde{u}_i^*(\vec{y}) \quad (14.133)$$

où les \tilde{u}_i vérifient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + U(\vec{x}) + \sum_{k=1}^N \int d^3z \tilde{u}_k^*(\vec{z})W(\vec{z}, \vec{x})\tilde{u}_k(\vec{z}) \right] \tilde{u}_i(\vec{x}) = \tilde{\varepsilon}_i\tilde{u}_i(\vec{x}) \quad (14.134)$$

Ces équations sont les équations de Hartree. Le potentiel effectif

$$W_{\text{eff}}(\vec{x}) = \sum_{k=1}^N \int d^3z \tilde{u}_k^*(\vec{z})W(\vec{z}, \vec{x}_1)u_k(\vec{z})$$

dépend des fonctions inconnues $\tilde{u}_i(\vec{x})$. Pour déterminer les \tilde{u}_i , on part de $\tilde{u}_i = u_i$ pour calculer W_{eff} et on procède par itération jusqu'au moment où l'équation (14.134) est satisfaite; la méthode de Hartree est une méthode autocohérente.

29. Born, Bogoliubov, Green, Kirkwood et Yvon.

5. *Approximation de Hartree-Fock.* L'approximation faite pour obtenir les équations de Hartree n'obéit pas à la propriété d'antisymétrie de $\rho^{(2)}$ dans l'échange $\vec{x}_1 \leftrightarrow \vec{x}_2$. L'approximation de Hartree-Fock consiste à écrire

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) \simeq \rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{y}_2) - \rho^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{y}_1)\rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_2) \quad (14.135)$$

Vérifier que cette hypothèse est correcte pour des fermions indépendants. Montrer que l'on doit ajouter au membre de gauche de (14.134) le terme d'échange

$$- \sum_{k=1}^N \int d^3z \tilde{u}_k^*(\vec{z})W(\vec{z}, \vec{x})\tilde{u}_k(\vec{x})\tilde{u}_i(\vec{z}) \quad (14.136)$$

14.5.8 Approximation semi-classique pour la condensation dans un piège

1. On se propose d'étudier la condensation de Bose-Einstein pour des bosons non relativistes de spin zéro et de masse m , soumis à un potentiel extérieur $U(\vec{r})$ supposé lentement variable dans l'espace. En examinant le décompte des niveaux dans une boîte de volume ℓ^3 telle que $U(\vec{r})$ soit lentement variable sur une distance ℓ , montrer que la densité de niveaux s'écrit

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int d^3r \sqrt{\varepsilon - U(\vec{r})} \theta[\varepsilon - U(\vec{r})]$$

où $\theta(x)$ représente la fonction de Heaviside. Une deuxième méthode consiste à utiliser une approximation semi-classique de la densité d'états

$$\rho(\varepsilon) = \int \frac{d^3p d^3r}{h^3} \delta[\varepsilon - H(\vec{p}, \vec{r})]$$

Écrire le hamiltonien $H(\vec{p}, \vec{r})$ d'une particule et retrouver le résultat précédent pour $\rho(\varepsilon)$. Dans le cas de bosons libres confinés dans une boîte de volume \mathcal{V} , que vaut $U(\vec{r})$? Retrouver dans ce cas l'expression usuelle de $\rho(\varepsilon)$.

2. On prend pour $U(\vec{r})$ l'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

Calculer $\rho(\varepsilon)$. On donne

$$\int_0^1 du u^2 (1 - u^2)^{1/2} = \frac{\pi}{16}$$

Par un choix judicieux du zéro d'énergie, le potentiel chimique peut être choisi nul à la transition de Bose-Einstein. Retrouver (14.94).

3. Dans l'expérience de Mewes *et al.* [1996], des atomes de sodium sont confinés dans un piège magnétique et leur énergie potentielle est celle d'un oscillateur harmonique tridimensionnel de fréquence $\omega = 2\pi \times 122 \text{ Hz}$; le nombre d'atomes dans le piège est $N = 15 \times 10^6$. Quelle est la température de transition? (En réalité le piège est asymétrique, et ω représente une valeur moyenne.)

4. Revenant à une énergie potentielle quelconque, montrer que pour $T = T_C$ la densité de particules en fonction de \vec{r} est donnée par

$$n(\vec{r}) = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_{U(\vec{r})}^{\infty} \frac{[\varepsilon - U(\vec{r})]^{1/2}}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon$$

Quel choix a-t-on fait pour le zéro d'énergie ? Montrer qu'à la transition

$$n(\vec{r}=0) = \left(\frac{2\pi m k_B T_C}{\hbar^2} \right)^{3/2} \zeta(3/2)$$

si $U(\vec{r})$ a un minimum absolu à $r = 0$. Calculer numériquement cette densité pour l'expérience de Mewes *et al.* [1996]. La masse de l'atome de sodium utilisé dans l'expérience vaut $m = 3.8 \times 10^{-26}$ kg.

14.6 Bibliographie

Pour un exposé très lucide sur les particules identiques, voir Ballentine [1998], chapitre 17 ou Peres [1993], chapitre 5. Les présentations de Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 7, Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 4, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre XIV ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 16 sont également utiles. Le théorème spin-statistique est démontré dans Streater et Wightman [1964]. Pour les états collectifs on pourra consulter Diu *et al.* [1990], chapitre 4, Balian [1991], chapitres 10 et 12 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 5. On trouvera un exposé introductif sur les condensats de Bose-Einstein dans Cohen-Tannoudji *et al.* [2005] et des exposés très complets dans Cohen-Tannoudji [1999], Castin [2001], Leggett [2001], ou Pethick et Smith [2002]. Bien que l'édition originale de ces deux livres date de près d'un demi-siècle, la lecture de Pines et Nozières [1989] (fermions) et Nozières et Pines [1990] (bosons) est toujours aussi stimulante. Enfin, pour un exposé magistral sur les fluides quantiques, on se reportera à Leggett [2006].

Chapitre 15

Atomes à un électron

CE CHAPITRE EST CONSACRÉ à une introduction à la physique atomique limitée aux atomes à un électron, le cas des atomes complexes étant renvoyé au chapitre suivant. Après un bref exposé dans la section 15.1 des méthodes de perturbation et variationnelle, nous discuterons dans la section 15.2 les structures fine et hyperfine des niveaux d'énergie ainsi que l'effet d'un champ magnétique sur ces niveaux. La section 15.3 examinera le couplage d'un atome avec un champ électromagnétique et des applications importantes de ce couplage comme l'effet photoélectrique ou le taux d'émission spontanée. La section 15.4 sera consacrée à la détection des photons, un sujet important de l'optique quantique. Enfin nous donnerons dans la section 15.5 une introduction à un sujet en pleine expansion depuis une vingtaine d'années, la manipulation d'atomes par laser, en traitant le refroidissement Doppler et les pièges magnéto-optiques.

15.1 Méthodes d'approximation

15.1.1 Généralités

En physique classique, il est exceptionnel que l'on puisse résoudre analytiquement les équations de Newton ou celles de Maxwell, étant donné les conditions initiales à un temps $t = t_0$ et les forces dans le premier cas, les sources du champ électromagnétique dans le second. En général on doit avoir recours à une méthode de résolution approchée : intégration numérique des équations, méthode de perturbation ou autre. La situation n'est pas différente en physique quantique : il est exceptionnel que l'on sache « résoudre l'équation de Schrödinger » de façon exacte, c'est-à-dire obtenir l'évolution temporelle du vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ en fonction de sa valeur $|\varphi(t_0)\rangle$ à un temps initial $t = t_0$. Dans le cas où le hamiltonien est indépendant du temps, ce qui sera le cas considéré dans cette section, la connaissance de cette évolution temporelle suppose que l'on sache diagonaliser le hamiltonien, c'est-à-dire trouver

ses valeurs propres et ses vecteurs propres. Sauf cas très particulier (puits carré, oscillateur harmonique, atome d'hydrogène...), on ne sait pas diagonaliser exactement le hamiltonien et on doit utiliser des méthodes approchées : intégration numérique de l'équation de Schrödinger, méthode de perturbation ou autre méthode.

Dans cette section, nous allons exposer la méthode des perturbations indépendante du temps. Cette méthode consiste à utiliser comme point de départ un hamiltonien H_0 que l'on sait diagonaliser exactement, et que l'on perturbe en lui ajoutant un terme W afin d'obtenir le hamiltonien « exact » $H = H_0 + W$, dans le cadre d'un domaine d'approximation prédéfini : cf. la section 4.3. On écrira

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W \quad (15.1)$$

où l'on a introduit un paramètre réel λ tel que $H = H_0$ si $\lambda = 0$ et $H = H_0 + W$ si $\lambda = 1$. Si $\lambda \rightarrow 0$, on peut espérer que la perturbation λW est en un certain sens¹ « petite » par rapport à H_0 . Il peut arriver que l'on puisse effectivement faire varier λ . Par exemple si λW correspond à l'interaction d'un système atomique avec un champ électromagnétique extérieur, on peut modifier à volonté la valeur de ce champ extérieur et donc $\lambda : \lambda \rightarrow 0$ si le champ s'annule. Mais en général la perturbation est fixée par des données physiques avec lesquelles on ne peut pas jouer. Dans ce cas λ est un paramètre fictif que l'on fait varier de façon artificielle, en lui donnant à la fin des calculs sa valeur physique $\lambda = 1$. Nous avons déjà eu recours à cet artifice dans l'exposé de la théorie des perturbations dépendant du temps de la section 9.5.3, en écrivant la perturbation sous la forme $\lambda W(t)$ et en rétablissant $\lambda = 1$ à la fin du calcul.

Nous supposons donc connu le spectre de H_0 . Soit $E_0^{(n)}$ ses valeurs propres et $|n, r\rangle$ ses vecteurs propres, r étant un indice de dégénérescence comme au § 2.3.1

$$H_0|n, r\rangle = E_0^{(n)}|n, r\rangle \quad (15.2)$$

Nous cherchons les valeurs propres et vecteurs propres de $H(\lambda)$ sous la forme d'un développement en puissances de λ , appelé *développement perturbatif*. Si $H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$, nous écrivons les développements du vecteur propre $|\varphi(\lambda)\rangle$ et de l'énergie $E(\lambda)$

$$|\varphi(\lambda)\rangle = |\varphi_0\rangle + \lambda|\varphi_1\rangle + \lambda^2|\varphi_2\rangle + \dots \quad (15.3)$$

$$E(\lambda) = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \dots \quad (15.4)$$

Si $\lambda = 0$, $|\varphi(\lambda = 0)\rangle \equiv |\varphi_0\rangle = |n, r\rangle$ et $E = E_0^{(n)}$. Notre hypothèse implicite est qu'un développement en λ existe avec un rayon de convergence non nul, ou, en d'autres termes, que l'énergie est une fonction analytique de λ au point $\lambda = 0$. Il est nécessaire de distinguer deux cas.

1. Définir rigoureusement qu'un opérateur est « petit » par rapport à un autre est un problème mathématique des plus complexes.

- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de H_0 est simple, et on parle alors de théorie des perturbations non dégénérée.
- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de H_0 est dégénérée avec une dégénérescence N , et on parle alors de théorie des perturbations dégénérée.

Nous allons traiter successivement ces deux cas, sans entrer dans les détails de la méthode générale du calcul à tous les ordres en λ . Nous nous contenterons de l'ordre non trivial le plus bas en λ , en renvoyant aux ouvrages classiques pour le cas général.

15.1.2 Cas d'une valeur propre simple de H_0

Nous partons de $H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle$ et posons $|\varphi_0\rangle = |n\rangle$ avec $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$, ainsi que $E_0 = E_0^{(n)}$ afin d'alléger les notations. En pratique nous nous intéressons au développement perturbatif (15.4) de l'énergie et le développement perturbatif (15.3) du vecteur $|\varphi(\lambda)\rangle$ est un auxiliaire de calcul, ce qui nous permet de fixer $|\varphi(\lambda)\rangle$ par une condition commode : $\langle\varphi_0|\varphi(\lambda)\rangle = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$. Avec cette condition $|\varphi(\lambda)\rangle$ n'est pas en général unitaire, mais il est toujours possible de le normaliser si nécessaire. Nous avons, à l'ordre λ inclus, d'une part

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = H_0|\varphi_0\rangle + \lambda W|\varphi_0\rangle + \lambda H_0|\varphi_1\rangle$$

et d'autre part

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = (E_0 + \lambda E_1)|\varphi(\lambda)\rangle = E_0|\varphi_0\rangle + \lambda E_1|\varphi_0\rangle + \lambda E_0|\varphi_1\rangle$$

d'où, en identifiant les termes d'ordre λ ,

$$W|\varphi_0\rangle + H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_0\rangle + E_0|\varphi_1\rangle$$

Multipliant à gauche les deux membres de cette équation par le bra $\langle\varphi_0|$ et tenant compte de $\langle\varphi_0|H_0 = E_0\langle\varphi_0|$ nous obtenons²

$$E_1 = \langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle \quad (15.5)$$

ce que l'on peut écrire, en appelant ΔE_1 la différence d'énergie entre le cas $\lambda \neq 0$ et le cas $\lambda = 0$ au premier ordre en λ

$$\boxed{\Delta E_1 = \lambda\langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle} \quad (15.6)$$

Le terme en λ^2 n'est pas très difficile à obtenir (exercice 15.6.1)

$$\boxed{\Delta E_2^{(n)} = \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}}} \quad (15.7)$$

2. La formule (15.5) s'obtient immédiatement à partir du théorème de Feynman-Hellmann, exercice 4.4.3, équation (4.49).

Comme application, calculons le déplacement des niveaux de l'oscillateur harmonique à une dimension sous l'influence d'une perturbation anharmonique en q^4

$$\lambda W = \lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} Q^4 \quad (15.8)$$

Utilisant un résultat de l'exercice 11.6.1 on déduit de (15.6) le déplacement du niveau n à l'ordre λ

$$\Delta E_1^{(n)} = \frac{3}{4} \lambda \hbar \omega (2n^2 + 2n + 1) \quad (15.9)$$

Même si λ est petit, le résultat diverge pour les grandes valeurs de n , car plus n est grand, et plus la fonction d'onde est importante aux grandes valeurs de q , et donc plus l'effet de la perturbation en q^4 se fait sentir : la perturbation en λQ^4 n'est jamais « petite ». Nous avons pris comme hypothèse de départ l'existence d'un développement en puissances de λ avec un rayon de convergence non nul. En pratique cette hypothèse d'analyticité à $\lambda = 0$ n'est pas toujours vérifiée, et l'oscillateur anharmonique que nous venons d'examiner en fournit un exemple. En effet, il est facile de comprendre que $E^{(n)}$ ne peut pas être analytique à $\lambda = 0$, car le hamiltonien change brutalement de nature en ce point. Pour $\lambda > 0$ il est borné inférieurement et les états liés sont présents, mais pour $\lambda < 0$ il n'est plus borné inférieurement et les états liés disparaissent ! Le développement n'a plus de sens pour $\lambda < 0$. En fait, le développement perturbatif est dans ce cas un développement asymptotique, qui donne de bons résultats pour $\lambda > 0$ si l'on garde un nombre de termes suffisamment petit, mais qui diverge si on essaie de le pousser trop loin. Ce type de développement est bien connu en mathématiques : un bon exemple en est la formule de Stirling valable pour $n \gg 1$

$$\Gamma(n+1) = n! = \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n} \left(1 + \frac{1}{12n} + \frac{1}{288n^2} + \dots\right) \quad (15.10)$$

qui est un développement asymptotique, non convergent, en puissances de $1/n$. Il existe des méthodes sophistiquées pour sommer ces développements asymptotiques³.

15.1.3 Cas d'un niveau dégénéré

Nous passons maintenant au cas d'un niveau dégénéré, en appelant $\mathcal{H}^{(n)}$ le sous-espace de dimension N de la valeur propre $E_0^{(n)}$; le projecteur $\mathcal{P}^{(n)}$ sur $\mathcal{H}^{(n)}$ s'écrit

$$\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{r=1}^N |n, r\rangle \langle n, r| \quad (15.11)$$

3. Voir par exemple Zinn-Justin [1989], chapitre 37.

Dans le sous-espace $\mathcal{H}^{(n)}$, l'opérateur W est représenté par une matrice $N \times N$ d'éléments $W_{sr}^{(n)} = \langle n, s | W | n, r \rangle$ que l'on peut diagonaliser. Les vecteurs propres $|\varphi_0^{(n,q)}\rangle$ de W dans $\mathcal{H}^{(n)}$ sont des combinaisons linéaires des $|n, r\rangle$

$$|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = \sum_{r=1}^N c_{qr} |n, r\rangle$$

$$W|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_1^{(n,q)} |\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

Les coefficients c_{qr} sont d'ordre zéro en λ , puisque l'on a diagonalisé W sans toucher à la diagonalisation de H_0 , qui est un multiple de l'identité dans $\mathcal{H}^{(n)}$

$$H_0|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_0^{(n)} |\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

La diagonalisation de W dans $\mathcal{H}^{(n)}$ donne le résultat correct pour l'énergie à l'ordre λ . On retrouve les résultats du cas non dégénéré en prenant la dimension de $\mathcal{H}^{(n)}$ égale à un. En résumé, à l'ordre λ , on calcule les niveaux d'énergie et les vecteurs propres comme pour un système à un nombre fini N de niveaux, en diagonalisant la matrice représentative de $H_0 + \lambda W$ dans $\mathcal{H}^{(n)}$. En fait, l'approximation par un système à nombre fini de niveaux est souvent obtenue en négligeant les interactions entre sous-espaces $\mathcal{H}^{(n)}$. Remarquons enfin que les cas quasi-dégénérés sont aussi traités par cette méthode.

15.1.4 Méthode variationnelle

Nous nous limitons à nouveau à l'étude d'un cas simple, la recherche de l'énergie de l'état fondamental, en renvoyant aux traités classiques pour l'application de la méthode variationnelle à d'autres cas. Soit E_0 l'énergie de l'état fondamental d'un hamiltonien H , $|0\rangle$ le vecteur propre correspondant

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle$$

et $|\varphi\rangle$ un vecteur arbitraire unitaire de l'espace de Hilbert des états. Écrivons la valeur moyenne de H dans l'état $|\varphi\rangle$ en décomposant $|\varphi\rangle$ sur la base des états propres $|n\rangle$ de H , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$,

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m | H | n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

On en déduit

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle - \langle 0 | H | 0 \rangle = \sum_n (E_n - E_0) |c_n|^2 \geq 0 \quad (15.12)$$

où nous avons utilisé $\sum_n |c_n|^2 = 1$ et $E_n \geq E_0$. La méthode variationnelle consiste à se donner un vecteur d'essai $|\varphi(\alpha)\rangle$ dépendant d'un paramètre α , ou

de plusieurs paramètres α_i , que l'on essaie de choisir aussi proche que possible de la forme supposée de $|0\rangle$. Le résultat (15.12) montre que

$$\langle H \rangle(\alpha) = \langle \varphi(\alpha) | H | \varphi(\alpha) \rangle \geq E_0$$

Dans le cadre de la paramétrisation choisie, le meilleur résultat pour E_0 sera obtenu en cherchant le minimum de $\langle H \rangle(\alpha)$

$$\left. \frac{d}{d\alpha} \langle H \rangle(\alpha) \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \quad (15.13)$$

et une borne supérieure sur E_0 est

$$E_0 \leq \langle \varphi(\alpha_0) | H | \varphi(\alpha_0) \rangle \quad (15.14)$$

Pour comparer deux choix différents $|\varphi(\alpha)$ et $|\tilde{\varphi}(\beta)\rangle$, on compare les deux minima et le meilleur choix est celui qui donne la valeur minimale de $\langle H \rangle$. Il est immédiat de généraliser à un vecteur dépendant de plusieurs paramètres $\alpha_1, \dots, \alpha_p$: on cherche le minimum de $\langle H \rangle$ par

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \langle H \rangle(\alpha_1, \dots, \alpha_p) \right|_{\alpha_j=\alpha_{j0}} = 0$$

À titre d'exemple, examinons le calcul variationnel de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique, en choisissant comme fonction d'onde d'essai une fonction normalisable de norme unité

$$\langle x | \varphi(\alpha) \rangle = \varphi_\alpha(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha^{3/2} \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad (15.15)$$

Les intégrales nécessaires aux calculs ci-dessous se déduisent de

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + \alpha^2} = \frac{\pi}{\alpha} \quad (15.16)$$

en différentiant $I(\alpha)$ par rapport à α^2 . Partant de la forme (11.9) du hamiltonien de l'oscillateur harmonique, on calcule $\langle H \rangle(\alpha)$

$$\begin{aligned} \langle H \rangle(\alpha) &= \frac{1}{2} \hbar \omega \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{d\varphi_\alpha}{dx} \right)^2 + x^2 \varphi_\alpha^2(x) \right] \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\frac{1}{2\alpha^2} + \alpha^2 \right] \end{aligned}$$

Le premier terme du crochet est l'énergie cinétique et le second l'énergie potentielle. $\langle H \rangle(\alpha)$ est minimum pour $\alpha^2 = \alpha_0^2 = 1/\sqrt{2}$ et

$$\langle H \rangle(\alpha_0) = \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} > E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$$

Pour $\alpha = \alpha_0$, l'énergie cinétique moyenne et l'énergie potentielle moyenne sont égales

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$$

Le choix (15.15) de la fonction d'onde d'essai n'est pas excellent (l'erreur sur l'énergie est $\sim 40\%$!), car la décroissance à l'infini de cette fonction d'onde est beaucoup trop lente. Avec une fonction d'onde d'essai gaussienne, on trouverait bien sûr le résultat exact $\hbar\omega/2$. Un exemple important d'application de la méthode variationnelle sera donné au § 16.1.1 : le calcul de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium.

15.2 Atomes à un électron

15.2.1 Niveaux d'énergie en l'absence de spin

Au chapitre 10, nous avons étudié le spectre de l'atome d'hydrogène, atome à un seul électron ; une généralisation immédiate est donnée par les ions He^+ , Li^{++} , etc. Lorsque le nombre d'électrons est différent de un, il n'existe plus de solution analytique au calcul des niveaux d'énergie. On a recours à des méthodes d'approximation, qui peuvent être très précises dans le cas des atomes légers et en particulier de l'hélium. Un autre cas où l'on peut utiliser une approximation simple est celui des alcalins. En effet, en première approximation, un alcalin est un atome où un électron externe est soumis à un potentiel effectif créé par le noyau atomique et les $(Z - 1)$ autres électrons, appelés électrons des couches internes. Le spectre est alors semblable à celui de l'atome d'hydrogène, avec la différence que l'on n'observe pas de dégénérescence entre des niveaux de moment angulaire orbital différent car le potentiel effectif n'est pas en $1/r$: dans le cas du sodium par exemple le niveau fondamental est un niveau $3s$ et le niveau $3p$ est intermédiaire entre les niveaux $3s$ et $4s$ (figure 10.7).

Les spectres des figures 10.6 et 10.7 sont obtenus en négligeant le spin de l'électron externe ainsi que le spin du noyau atomique. Nous allons traiter successivement les deux modifications introduites par la prise en compte de ces spins : la *structure fine* induite par l'interaction entre le moment angulaire de l'électron et son spin, et la *structure hyperfine* induite par l'interaction du spin nucléaire avec le spin et le moment angulaire orbital de l'électron.

15.2.2 Structure fine

La structure fine est un effet d'origine relativiste dont l'expression correcte s'obtient à partir d'une équation d'onde quantique et relativiste valable pour les particules de spin $1/2$, l'équation de Dirac⁴. Dans le cadre d'une description

4. L'équation de Dirac n'est pas la seule équation d'onde quantique et relativiste : une autre équation relativiste importante est l'équation de Klein-Gordon qui décrit les particules

classique, nous allons donner un argument intuitif, mais qui n'est pas entièrement correct, pour justifier l'expression du hamiltonien de la structure fine. Dans le référentiel où le noyau est au repos, ou référentiel du noyau, le champ électromagnétique est le gradient du potentiel électrostatique $V(r)/q_e$ créé par le noyau et les $(Z - 1)$ électrons des couches internes, et l'électron externe se déplace à une vitesse \vec{v} dans ce référentiel. Dans le référentiel où il est au repos, l'électron voit le noyau se déplacer avec une vitesse $-\vec{v}$, et compte tenu des lois de transformation du champ électromagnétique dans un changement de référentiel d'inertie, cet électron voit non seulement un champ électrique, mais aussi un champ magnétique donné en fonction du champ électrostatique \vec{E} dans le référentiel du noyau par⁵

$$\vec{B} \simeq -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \simeq \frac{1}{q_e c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \left(\frac{\vec{p}}{m_e} \times \vec{r} \right) \quad (15.17)$$

Ce champ magnétique interagit avec le moment magnétique $\vec{\mu} = \gamma \vec{s}$ de l'électron externe en donnant une énergie d'interaction

$$W_{\text{so}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \simeq -\frac{q_e}{m_e} \vec{s} \cdot \vec{B} \quad (15.18)$$

car le facteur gyromagnétique $\gamma \simeq q_e/m_e$. Combinant ces deux équations et introduisant le moment angulaire orbital $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ on en déduit le potentiel spin-orbite

$$W_{\text{so}} = \frac{1}{m_e^2 c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \vec{l} \cdot \vec{s} \quad (15.19)$$

Toutefois notre démonstration est critiquable car nous avons utilisé les formules de transformation entre référentiels d'inertie. Or le référentiel de l'électron est un référentiel accéléré par rapport à celui du noyau puisque l'électron tourne autour du noyau. La prise en compte de ce mouvement de rotation se traduit par un phénomène de précession du spin, la précession de Thomas⁶, qui réduit d'un facteur deux le résultat (15.19). En fin de compte, l'expression quantique correcte du potentiel spin-orbite s'obtient en corrigeant (15.19) par un facteur $1/2$ et en remplaçant les quantités classiques \vec{l} et \vec{s} par les opérateurs \vec{L} et \vec{S}

$$W_{\text{so}} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (15.20)$$

de spin zéro. Toutefois aucune de ces deux équations n'est entièrement cohérente : le mariage de la mécanique quantique et de la relativité exige une théorie de champs quantifiés.

5. Dans l'expression (15.17), on a utilisé l'approximation $v \ll c$: la formule exacte contient un facteur $(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$.

6. Voir par exemple Taylor et Wheeler [1963], § 103, ou Jackson [2001], section 11.8. Comme le « paradoxe » des jumeaux de Langevin, auquel elle est d'ailleurs reliée, la précession de Thomas est un phénomène de relativité restreinte, et non de relativité générale, bien que dans les deux cas on utilise des référentiels accélérés.

Évaluons l'ordre de grandeur de la correction aux niveaux d'énergie pour l'atome d'hydrogène ; comme \vec{L} et \vec{S} sont d'ordre \hbar et que $V(r) = -e^2/r$, nous obtenons dans un état n

$$\langle W_{\text{so}} \rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2 n^3 a_0^3} = \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{1}{n^3} = \frac{\alpha^2 R_\infty}{n^3}$$

où nous avons introduit le rayon de Bohr a_0 , la constante de structure fine α et la constante de Rydberg R_∞ : voir (1.46)–(1.48). Les corrections aux niveaux d'énergie sont donc de l'ordre de α^2 en valeur relative, ce à quoi on s'attend pour des corrections relativistes, car⁷ $(v/c)^2 \sim \alpha^2$.

Examinons l'effet du potentiel (15.20) sur un niveau (nl) , de nombre quantique principal n et de moment angulaire orbital l . Comme l'effet sur les niveaux est faible, $\sim \alpha^2$, on pourra utiliser la théorie des perturbations. Ni le moment angulaire orbital \vec{L} , ni le spin \vec{S} ne commutent avec W_{so} . En revanche, l'opérateur scalaire $\vec{L} \cdot \vec{S}$ commute avec le moment angulaire total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ et de plus, comme $[\vec{L}^2, \vec{L}] = 0$ et $[\vec{L}^2, f(r)] = 0$, le potentiel (15.20) commute avec \vec{L}^2 , ce qui entraîne qu'il ne relie pas des niveaux de l différent. En résumé, le potentiel spin-orbite est diagonal dans une base $|l\ 1/2\ jm_j\rangle$. En l'absence du potentiel spin-orbite, la dégénérescence du niveau (nl) est $2(2l+1)$ et il faudrait en principe appliquer la théorie des perturbations d'un niveau dégénéré. Mais dans le cas présent la situation est très simple, car on connaît déjà la base $|l\ 1/2\ jm_j\rangle$ où W_{so} est diagonal. Le potentiel spin-orbite va partiellement lever la dégénérescence. En effet deux valeurs $j = l \pm 1/2$ du moment angulaire total sont possibles, et d'après (10.138), en utilisant $\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (15.21)$$

soit

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{S} &= -\frac{\hbar^2}{2} (l+1) & j &= l - \frac{1}{2} \\ \vec{L} \cdot \vec{S} &= +\frac{\hbar^2}{2} l & j &= l + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (15.22)$$

Les états de moment angulaire total $j = l - 1/2$ et $j = l + 1/2$ ont donc des énergies différentes et le potentiel spin-orbite lève partiellement la dégénérescence. Naturellement chacun des deux niveaux d'énergie correspondants possède encore une dégénérescence $(2j+1)$. Notons que le potentiel spin-orbite n'affecte pas les ondes s ($l = 0$).

Comme cas particulier, examinons le niveau $2p$ ($l = 1$) de l'hydrogène. Les deux valeurs possibles de j sont $j = 1/2$ et $j = 3/2$. Les niveaux correspondants sont notés $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$. La transition $2p \rightarrow 1s$ est dédoublée, ce qui est facilement confirmé en spectroscopie. Dans le cas de l'hydrogène, les

7. Pour un noyau de charge Z et un électron unique $(v/c)^2 \sim (Z\alpha)^2$.

niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ restent confondus à l'approximation de l'équation de Dirac. La différence d'énergie avec le niveau $2p_{3/2}$ est $\simeq 4.5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 10 GHz en fréquence. Le calcul d'ordre de grandeur précédent donne pour cette différence d'énergie $\sim \alpha^2 R_\infty / 8 \sim 10^{-4}$ eV, en accord qualitatif avec l'expérience. Cependant, l'expérience montre que, contrairement à la prédiction de l'équation de Dirac, les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ ne sont pas confondus : le niveau $2p_{1/2}$ est plus bas de $\simeq 5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 1 GHz. Cette différence, appelée déplacement Lamb, s'explique par des effets d'électrodynamique quantique, la théorie quantifiée du champ électromagnétique et du champ électron-positron.

La notation précédente $(nl)_j$ se généralise aux niveaux plus élevés : pour une onde d ($l = 2$) les valeurs possibles de j sont $3/2$ et $5/2$ et les niveaux sont notés $nd_{3/2}$, $nd_{5/2}$. Pour une onde f ($l = 3$) on aura des niveaux $nf_{5/2}$ et $nf_{7/2}$, etc. Un exemple spectroscopique classique est le dédoublement de la raie jaune du sodium, qui correspond à une transition $3p \rightarrow 3s$: les deux raies sont notées D_1 à 589.6 nm et D_2 à 589.0 nm. En général le niveau $j = l + 1/2$ est plus élevé que le niveau $j = l - 1/2$ car la valeur moyenne $\langle dV/dr \rangle > 0$, mais il y a quelques exceptions. Dans le modèle en couches du noyau (exercice 16.4.4), où le potentiel spin-orbite joue un rôle crucial, cet ordre est systématiquement inversé.

15.2.3 Effet Zeeman

La dégénérescence $(2j + 1)$ du niveau $(nl)_j$ est levée en plongeant l'atome dans un champ magnétique constant \vec{B} : c'est l'*effet Zeeman*. Cet effet provient de l'interaction du champ magnétique avec le moment magnétique orbital dû au mouvement de l'électron sur son orbite, et également avec le moment magnétique associé au spin de cet électron. Le moment magnétique associé à \vec{L} est donné par le facteur gyromagnétique classique (3.30) $\gamma = q_e/(2m_e)$, tandis que le facteur gyromagnétique du spin est $\simeq q_e/m_e$. L'énergie d'interaction se déduit du couplage d'un moment magnétique avec le champ⁸

$$W = -\frac{q_e}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \quad (15.23)$$

On choisit habituellement \vec{B} parallèle à Oz

$$W = -\frac{q_e B}{2m_e} (L_z + 2S_z) \quad (15.24)$$

Lorsque l'énergie Zeeman (15.23) est suffisamment petite par rapport à l'énergie caractéristique de la structure fine du niveau considéré, on peut utiliser la théorie des perturbations non dégénérée dans chaque niveau $(nl)_j$. Si tel n'est

8. Toutefois cet argument ne donne que le terme dominant de l'interaction : voir l'exercice 15.6.5 pour une justification détaillée de (15.23).

pas le cas, il faut diagonaliser simultanément le hamiltonien de la structure fine et celui de l'effet Zeeman : exercice 6.6.4. Nous nous plaçons dans le cas où l'effet Zeeman est petit. Les éléments de matrice de la perturbation dans le niveau $(nl)_j$ de (15.24) sont

$$W_{mm'}^{nlj} = -\frac{q_e B}{2m_e} \langle nljm | L_z + 2S_z | nljm' \rangle \quad (15.25)$$

Les opérateurs \vec{L} et \vec{S} sont des opérateurs vectoriels, et d'après le théorème de Wigner-Eckart (10.150) pour ces opérateurs, les éléments de matrice sont donnés, par exemple pour L_z , par

$$\begin{aligned} \langle nljm | L_z | nljm' \rangle &= \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j || (\vec{J} \cdot \vec{L}) || j \rangle \langle nljm | J_z | nljm' \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle (\vec{J} \cdot \vec{L}) \rangle \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Utilisant

$$\vec{S}^2 = (\vec{J} - \vec{L})^2 \quad \text{et} \quad \vec{L}^2 = (\vec{J} - \vec{S})^2$$

pour exprimer $\vec{J} \cdot \vec{S}$ et $\vec{J} \cdot \vec{L}$, on obtient

$$\langle \vec{J} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}) \rangle = \frac{3}{2} \vec{J}^2 + \frac{1}{2} \vec{S}^2 - \frac{1}{2} \vec{L}^2$$

et on en déduit

$$\begin{aligned} \langle nljm | L_z + 2S_z | nljm' \rangle &= \frac{m\hbar}{2j(j+1)} \left[3j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right] \delta_{mm'} \\ &= m\hbar \left[1 + \frac{1}{2j(j+1)} \left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right) \right] \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Le résultat final s'écrit sous la forme

$$\boxed{W_{mm'}^{nlj} = -g \frac{q_e B}{2m_e} m\hbar \delta_{mm'}} \quad (15.26)$$

Dans le cadre de notre approximation, les déplacements des sous-niveaux Zeeman sont linéaires en B . Ils sont contrôlés par le *facteur de Landé* g

$$\boxed{g = 1 + \frac{1}{2j(j+1)} \left[j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right]} \quad (15.27)$$

On interprète physiquement $gq_e/(2m_e)$ comme un facteur gyromagnétique effectif. Pour un électron libre dans un champ magnétique nous avons vu que le facteur de Landé était égal à 2; c'est aussi le cas pour une onde s , ainsi qu'on peut le vérifier en posant $l = 0$ dans (15.27).

15.2.4 Structure hyperfine

Un effet encore plus fin, de l'ordre de 10^{-6} en valeur relative, est dû à l'interaction du moment magnétique du noyau atomique avec le moment magnétique orbital et le moment magnétique associé au spin de l'électron externe. L'interaction entre un dipôle magnétique nucléaire et un dipôle magnétique électronique est *a priori* plus faible que l'interaction entre deux dipôles électroniques par un facteur $\sim 10^{-3}$: en effet le magnéton de Bohr nucléaire $\mu_N = q_p \hbar / (2m_p)$ est plus petit que le magnéton de Bohr $\mu_B = |q_e| \hbar / (2m_e)$ par un facteur $m_p / m_e \sim 2000$. Rappelons les expressions des opérateurs moments magnétiques de l'électron et du proton

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{S}_e \simeq -2\mu_B \frac{\vec{S}_e}{\hbar} \quad \mu_p = \gamma_p \vec{S}_p \simeq 5.59\mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar} \quad (15.28)$$

On montre en électrodynamique classique⁹ que le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r})$ d'un dipôle ponctuel $\vec{\mu}_n$ à l'origine des coordonnées vaut

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_n - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})\hat{r}] + \frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_n \delta(\vec{r}) \quad (15.29)$$

On peut écrire comme dans (15.23) l'énergie du moment magnétique orbital et du spin de l'électron externe dans ce champ magnétique. Nous allons nous limiter au cas où l'électron est dans une onde s , cas où seul est à prendre en compte le moment magnétique de spin : dans une onde s , il n'y a pas de contribution du moment angulaire orbital au moment magnétique de l'atome. De plus le terme entre crochets dans (15.29) donne une contribution nulle. En effet, si l'on calcule en théorie des perturbations l'énergie magnétique $\langle W' \rangle = -\langle \vec{\mu}_e \cdot \vec{B} \rangle$ correspondant à l'interaction du moment magnétique électronique dû au spin en prenant en compte le terme entre crochets de (15.29), on trouve pour une onde s , dont la fonction d'onde $\varphi(r)$ dépend seulement de r

$$\begin{aligned} \langle W' \rangle &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3r |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3} [(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_e \cdot \hat{r})] \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \left[(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3 \sum_{i,j=1}^3 \mu_{ni} \mu_{ej} I_{ij} \right] \end{aligned}$$

Pour obtenir la deuxième ligne de l'équation précédente, on a découpé la partie radiale de l'intégrale du second terme du crochet de sa partie angulaire en écrivant

$$\int d^3r = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \int \frac{d\Omega}{4\pi}$$

L'intégrale radiale donne

$$4\pi \int_0^\infty r^2 dr |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3} = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

9. Voir par exemple Jackson [2001], section 5.6.

L'intégrale angulaire I_{ij} vaut

$$I_{ij} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \hat{r}_i \hat{r}_j = \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

Pour le montrer, on observe que le seul tenseur d'ordre deux invariant par rotation que l'on peut former avec les indices (i, j) est δ_{ij}

$$I_{ij} = c \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \sum_{ij} \delta_{ij} I_{ij} = 1$$

ce qui montre que $c = 1/3$ et que les deux termes de $\langle W' \rangle$ se compensent. Il reste donc uniquement le terme dit de contact

$$\begin{aligned} W_{\text{contact}} &= -\frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e \delta(\vec{r}) \\ &= -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_n \gamma_e (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_e) \delta(\vec{r}) \end{aligned} \quad (15.30)$$

Nous prendrons comme exemple de structure hyperfine celle de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène : $\mu_n \rightarrow \mu_p$, $n = 1$, $l = 0$. Le vecteur d'état est le produit tensoriel d'une fonction d'onde spatiale déduite de (10.94)

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (15.31)$$

et d'une fonction d'onde de spin, produit tensoriel d'un vecteur d'état dans l'espace de spin de l'électron et dans celui du proton. La partie spatiale et la partie de spin sont entièrement découplées. On prend d'abord la moyenne pour la partie spatiale

$$\begin{aligned} \langle W_{\text{contact}} \rangle_{\text{spat}} &= -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_n \gamma_e |\varphi(0)|^2 (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \\ &= \frac{A}{\hbar^2} (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \end{aligned} \quad (15.32)$$

La constante A vaut

$$A = \frac{2\mu_0}{3} (2\mu_B)(5.59\mu_N) \frac{1}{\pi a_0^3} \simeq 5.87 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

Le hamiltonien effectif est donc $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$, qui agit dans l'espace de Hilbert à quatre dimensions produit tensoriel des deux espaces de spin. En l'absence de perturbation hyperfine, le niveau fondamental $1s_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène possède une dégénérescence d'ordre 4. Il faut diagonaliser $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$ dans ce sous-espace, ce qui est immédiat si l'on introduit le spin total $\vec{S} = \vec{S}_p + \vec{S}_e$ et l'identité

$$\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \vec{S}_p^2 - \vec{S}_e^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left[s(s+1) - \frac{3}{2} \right] \quad (15.33)$$

Suivant les résultats du § 10.6.1, les deux valeurs possibles de s sont $s = 1$ (état triplet) et $s = 0$ (état singulet). Les valeurs propres du hamiltonien sont

$$\begin{aligned} s = 1 \text{ état triplet} & & E_{\text{trip}} &= E_0 + \frac{1}{4} A \\ s = 0 \text{ état singulet} & & E_{\text{sing}} &= E_0 - \frac{3}{4} A \end{aligned}$$

où E_0 est l'énergie en l'absence d'effet hyperfin, et les vecteur propres sont donnés par (10.125) et (10.126). Les deux niveaux sont distants de $A \simeq 5.87 \times 10^{-6}$ eV, ce qui correspond à l'émission d'un photon de longueur d'onde de 21 cm quand l'atome passe du niveau triplet au niveau singulet. Bien que la durée de vie du niveau triplet soit très longue : 10^7 années, et qu'elle soit *a priori* difficile à observer, elle est d'une grande importance en astrophysique. Elle a donné des informations fondamentales¹⁰ sur les nuages d'hydrogène atomique interstellaire, qui constituent de 10 à 50 % de la masse de la galaxie, en permettant les mesures des distributions de masse, vitesses, champs magnétiques, etc.

15.3 Interaction atome-champ électromagnétique

15.3.1 Théorie semi-classique

Dans cette section, nous allons examiner l'interaction entre un champ électromagnétique et un atome, modélisé comme précédemment par un électron externe dans un potentiel à symétrie sphérique. Dans un premier temps, nous utiliserons une *approximation semi-classique*, déjà introduite dans la section 5.3 : le champ électromagnétique est décrit classiquement, tandis que l'atome est décrit de façon quantique. Dans la section 5.3, nous avons postulé une interaction phénoménologique entre une onde électromagnétique et un dipôle électrique, responsable des transitions d'un niveau à un autre. Nous allons compléter les résultats de cette section en justifiant l'approximation dipolaire et en donnant une expression explicite de l'amplitude de transition. À ce point, il vaut la peine de résumer dans le tableau 15.1 les diverses approximations possibles lorsque l'on étudie l'interaction atome (ou molécule)–champ électromagnétique. En principe, on devrait traiter quantiquement à la fois l'atome et le champ, mais il peut être commode d'utiliser une approximation classique pour l'un ou l'autre des deux systèmes, dans la mesure où l'on peut s'assurer de la validité d'une telle approximation.

Suivant l'approche du § 11.3.2, l'onde électromagnétique classique est décrite dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ par un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$

10. Pour plus de détails, voir par exemple Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 13.

TAB. 15.1 – Différents schémas d'approximation.

Champ électromagnétique	Atome	Exemples
classique	classique	rayonnement classique § 1.5.3
classique	quantique	absorption et émission stimulées § 5.4.1, § 15.3.1 à § 15.3.3
quantique	classique	couplage à une source classique exercice 11.6.4
quantique	quantique	émission spontanée § 15.3.4 , 15.5

transverse. Une onde plane de vecteur d'onde \vec{k} et de fréquence ω peut donc s'écrire

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad \vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0 \quad (15.34)$$

Rappelons l'action des opérateurs divergence et rotationnel dans l'espace de Fourier

$$\vec{\nabla} \bullet \rightarrow i\vec{k} \bullet \quad \vec{\nabla} \times \bullet \rightarrow i\vec{k} \times \bullet \quad (15.35)$$

ce qui donne pour les champs électrique et magnétique

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \text{Re} \left[i\omega \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (15.36)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \text{Re} \left[i(\vec{k} \times \vec{A}_0) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (15.37)$$

Le flux d'énergie est donné par le vecteur de Poynting

$$\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{E} \times \vec{B} \quad (15.38)$$

et en moyennant sur le temps, avec $\langle \cos^2(\omega t) \rangle = 1/2$

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \omega^2 |\vec{A}_0|^2 \hat{k} = \mathcal{I}(\omega) \hat{k} \quad (15.39)$$

L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ est reliée au flux de photons \mathcal{F} par

$$\mathcal{I}(\omega) = \hbar \omega \mathcal{F}$$

soit, en appelant n la densité de photons

$$\mathcal{F} = nc = \frac{1}{2\hbar} \varepsilon_0 c \omega |\vec{A}_0|^2 \quad (15.40)$$

Le hamiltonien d'interaction électron+champ s'écrit d'après (11.156)

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{P} - q_e \vec{A}(\vec{R}, t) \right)^2 + V(\vec{R}) \quad (15.41)$$

$V(\vec{R})$ représente l'interaction effective de l'électron externe avec le noyau et les $(Z-1)$ électrons des couches internes. Le hamiltonien (15.41) se décompose en un hamiltonien non perturbé H_0

$$H_0 = \frac{1}{2m_e} \vec{P}^2 + V(\vec{R}) \quad (15.42)$$

et une perturbation

$$W(\vec{R}, t) = -\frac{q_e}{2m_e} \left(\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P} \right) + \frac{q_e^2}{2m_e} \vec{A}^2 \quad (15.43)$$

Au premier ordre en $q_e \vec{A}$, nous pouvons négliger le deuxième terme de (15.43), ou terme diamagnétique, $[q_e^2/(2m_e)] \vec{A}^2$ (exercice 15.6.5) ; de plus le premier terme se simplifie dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ car

$$\begin{aligned} \vec{P} \cdot [\vec{A} f(\vec{r})] &= -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})f(\vec{r}) - i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) \\ &= -i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) = (\vec{A} \cdot \vec{P})f(\vec{r}) \end{aligned}$$

La perturbation $W(\vec{R}, t)$ s'écrit en fin de compte

$$W(\vec{R}, t) = -\frac{q_e}{m_e} [\vec{A}(\vec{R}, t) \cdot \vec{P}] \quad (15.44)$$

Nous nous plaçons dans une représentation où \vec{R} est diagonal : $\vec{R} \rightarrow \vec{r}$. Compte tenu de (15.34)

$$W(\vec{r}, t) = -\frac{q_e}{2m_e} \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0^* \cdot \vec{P} \right] \quad (15.45)$$

Nous pouvons maintenant utiliser les résultats du § 9.5.3 : le terme en $\exp(-i\omega t)$ de (15.45) correspond à l'absorption d'énergie par l'atome et le terme en $\exp(i\omega t)$ à l'émission d'énergie. S'il existe deux niveaux d'énergie E_i et E_f , avec $E_i < E_f$, correspondant à une résonance : $E_f - E_i = \hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega$, l'atome absorbera une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $i \rightarrow f$, et émettra une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $f \rightarrow i$. Dans une interprétation corpusculaire, cela veut bien sûr dire que l'atome absorbe ou émet un photon d'énergie $\hbar\omega_0$, mais cette interprétation sort du cadre de la théorie semi-classique. D'après (9.152), la probabilité par unité de temps d'absorption $i \rightarrow f$ est donnée par

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{q_e}{2m_e} \right)^2 \left| \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{A}_0 \cdot \vec{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \quad (15.46)$$

15.3.2 Approximation dipolaire

Introduisons un vecteur polarisation unitaire \vec{e}_s , $\vec{e}_s^* \cdot \vec{e}_s = 1$, en écrivant $\vec{A}_0 = |\vec{A}_0| \vec{e}_s$. L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ par unité de fréquence est donnée par (15.39)

$$\mathcal{I}(\omega) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \omega^2 |\vec{A}_0(\omega)|^2$$

Récrivons (15.46) en intégrant sur ω et en séparant le module carré de l'élément de matrice de transition des caractéristiques de l'onde incidente

$$\begin{aligned}\Gamma_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{q_e}{2m_e} \right)^2 \int d\omega |\vec{A}_0(\omega)|^2 \left| \vec{e}_s \cdot \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \\ &= \frac{4\pi^2 \alpha}{\hbar \omega_0^2 m_e^2} \mathcal{I}(\omega_0) \left| \vec{e}_s \cdot \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{P} | i \rangle \right|^2\end{aligned}\quad (15.47)$$

L'élément de matrice de transition dans (15.47) se simplifie si l'on remarque que la longueur d'onde émise ou absorbée, $0.1 \mu\text{m} \lesssim \lambda \lesssim 1 \mu\text{m}$, est très grande par rapport aux dimensions atomiques $a_0 \sim 0.1 \text{ nm}$, ce qui permet de remplacer $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par l'unité car $\langle \vec{k} \cdot \vec{r} \rangle \sim ka_0 \sim a_0/\lambda \ll 1$

$$\begin{aligned}\langle f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{P} | i \rangle &= \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \varphi_i(\vec{r}) \\ &\simeq \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \varphi_i(\vec{r})\end{aligned}$$

De plus on peut exprimer \vec{P} à l'aide de la relation de commutation entre \vec{R} et H_0

$$[\vec{R}, H_0] = \frac{i\hbar}{m_e} \vec{P}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\langle f | \vec{P} | i \rangle &= \frac{m_e}{i\hbar} \langle f | \vec{R} H_0 - H_0 \vec{R} | i \rangle \\ &= \frac{m_e}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle f | \vec{R} | i \rangle = im_e \omega_0 \langle f | \vec{R} | i \rangle\end{aligned}\quad (15.48)$$

En physique classique, \vec{r} est le vecteur joignant le noyau situé à l'origine des coordonnées à l'électron externe, et $q_e \vec{r}$ est le moment dipolaire électrique \vec{d} de l'atome. La quantité $\langle f | q_e \vec{R} | i \rangle$ est donc l'élément de matrice \vec{D}_{fi} de l'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D} = q_e \vec{R}$ entre les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$

$$\vec{D}_{fi} = \langle f | \vec{D} | i \rangle = q_e \langle f | \vec{R} | i \rangle \quad (15.49)$$

En reportant ces résultats dans (15.47) on obtient la probabilité de transition par unité de temps pour une polarisation \vec{e}_s

$$\Gamma_{fi} = 4\pi^2 \left(\frac{|\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) \quad (15.50)$$

$$= \frac{4\pi^2 \alpha}{\hbar} |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \mathcal{I}(\omega_0) \quad (15.51)$$

en accord avec (5.69) : le moment dipolaire d introduit phénoménologiquement dans la section 5.3.2 prend une forme explicite pour l'atome à un électron

$$d^2 \rightarrow |\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2 = q_e^2 |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2$$

L'expression (15.50) est plus générale que (15.51), et elle est valable pour tout système atomique ou moléculaire lorsque les règles de sélection des transitions dipolaires électriques sont satisfaites : la probabilité de transition est pilotée par l'élément de matrice de transition du dipôle électrique du système, qui fait intervenir toutes les particules chargées. Un calcul identique permet de déduire le taux d'émission stimulée $\bar{\Gamma}_{if}$, qui est aussi donné par (15.50) : $\bar{\Gamma}_{if} = \Gamma_{fi}$. En effet il suffit de remplacer D_{fi} par $D_{if} = D_{fi}^*$ pour passer de l'absorption à l'émission. Suivant l'argument fondé sur les relations d'Einstein du § 5.4.1, on déduit de Γ_{fi} la probabilité d'émission spontanée d'un photon en sommant sur les deux états possibles de polarisation : $s = 1, 2$ et en prenant la moyenne $\langle \bullet \rangle$ sur les angles et sur les spins

$$B' = \frac{4\omega_0^3}{c^2} \left(\frac{\frac{1}{2} \sum_{s=1}^2 \langle |\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \rangle}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \right) = \frac{2\alpha\omega_0^3}{c^2} \left\langle \sum_{s=1}^2 |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \right\rangle \quad (15.52)$$

L'opérateur moment dipolaire électrique \vec{D} , tout comme l'opérateur position \vec{R} , est un opérateur vectoriel impair. Cette propriété de \vec{D} implique des *règles de sélection* pour les transitions dipolaires électriques. En effet, le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels donne l'expression des éléments de matrice des composantes sphériques (10.145) D_q de \vec{D} : si j_i et j_f sont les moments angulaires de l'état initial i et de l'état final f , et m_i et m_f les nombres quantiques magnétiques, nous obtenons de (10.149)

$$\langle j_f m_f | D_q | j_i m_i \rangle = C_{q m_i; j_f m_f}^{1 j_i} \langle j_f || D || j_i \rangle \quad (15.53)$$

Le coefficient de Clebsch-Gordan ne peut être différent de zéro que si $|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1$ et si $m_f = q + m_i$. De plus les parités de l'état initial et de l'état final doivent être opposées : $\Pi_i \Pi_f = -1$. Les transitions dipolaires électriques obéissent donc aux règles de sélection suivantes.

Règles de sélection pour les transitions dipolaires électriques

$$\boxed{|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1 \quad m_f = m_i + q, q = -1, 0, +1 \quad \Pi_i \Pi_f = -1}$$

Ceci généralise les résultats obtenus au § 10.5.2 dans le cas particulier $j_i = 1$ et $j_f = 0$. Les règles de sélection sur le nombre quantique magnétique m sont directement liées à la conservation du moment angulaire suivant Oz , et des exemples en ont déjà été donnés au § 10.5.2 et à l'exercice 10.7.13.

15.3.3 Effet photoélectrique

Dans la sous-section précédente, nous avons étudié la transition entre deux niveaux en généralisant les résultats de la section 5.3. Nous allons maintenant nous intéresser à une transition vers le spectre continu : une onde électromagnétique de fréquence $\omega > R_\infty/\hbar$ et de polarisation \vec{e}_s arrive sur un atome

d'hydrogène dans son état fondamental. Dans un langage corpusculaire, la condition $\omega > R_\infty/\hbar$ implique que l'énergie des photons est suffisante pour ioniser l'atome en éjectant son électron, ce qui donne un exemple très simple d'effet photoélectrique, et un cas où l'on peut mener jusqu'au bout des calculs analytiques. D'après la règle d'or de Fermi et la définition (13.1) de la section efficace, la section efficace de production des photoélectrons est, au premier ordre de la théorie des perturbations en W

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar\mathcal{F}} |\langle f|W|i\rangle|^2 \frac{\mathcal{V}m_e k_e}{(2\pi)^3 \hbar^2} \quad (15.54)$$

où \vec{k}_e est le vecteur d'onde de l'électron final. Lorsque $\hbar\omega \gg R_\infty$ (mais $\hbar\omega \ll m_e c^2$ de façon à préserver une cinématique non relativiste et à prévenir la production de paires électron-positron¹¹), on peut négliger l'interaction de l'électron final avec le proton et prendre pour état final une onde plane : c'est l'approximation de Born

$$\langle \vec{r}|f\rangle = \varphi_f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}}$$

Notons que l'approximation dipolaire n'est pas valable si l'énergie du photon est trop grande. L'état initial est décrit par la fonction d'onde (15.31) de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. L'élément de matrice $\langle f|W|i\rangle$ est donné par (15.46)

$$\langle f|W|i\rangle = \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \vec{e}_s \cdot \int d^3r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_e) \cdot \vec{r}} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r})\right)$$

soit, en intégrant par parties et en remarquant que $\vec{e}_s \cdot \vec{k} = 0$

$$\begin{aligned} \langle f|W|i\rangle &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \frac{\hbar(\vec{e}_s \cdot \vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}} \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}_e) \cdot \vec{r}} e^{-r/a_0} \\ &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \frac{\hbar(\vec{e}_s \cdot \vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}} \frac{8\pi/a_0}{(q^2 + 1/a_0^2)^2} \end{aligned} \quad (15.55)$$

où nous avons défini $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_e$: $\hbar\vec{q}$ est le transfert d'impulsion entre le photon initial et l'électron final. Pour calculer l'intégrale dans (15.55) nous avons utilisé

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{-\lambda r} &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr e^{-\lambda r} \int_{-1}^{+1} e^{iqr \cos \theta} d \cos \theta \\ &= \frac{2\pi}{q} \int_0^\infty r dr \sin qr e^{-\lambda r} \\ &= \frac{2\pi}{q} \text{Im} \int_0^\infty r dr e^{iqr} e^{-\lambda r} = \frac{4\pi}{q} \text{Im} \frac{1}{(\lambda - iq)^2} = \frac{8\pi\lambda}{(\lambda^2 + q^2)^2} \end{aligned}$$

11. Cette approximation est valable dans le cas des rayons X, dont l'énergie va de 1 à 100 keV.

Rassemblant tous les facteurs dans (15.54) on obtient

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\alpha\hbar}{m_e \omega a_0^5} \frac{|\vec{e}_s \cdot \hat{k}_e|^2 k_e^3}{[(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 + 1/a_0^2]^4}} \quad (15.56)$$

Explicitons (15.56) en choisissant \vec{k} parallèle à Oz et une polarisation linéaire \vec{e}_s parallèle à Ox ; soit $(\Omega = \theta, \phi)$ les angles polaires définissant \hat{k}_e

$$(\vec{e}_x \cdot \hat{k}_e)^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \phi$$

Cette quantité est maximale lorsque \vec{e}_x et \vec{k}_e sont parallèles, soit $\theta = \pi/2$ et $\phi = 0$ ou π . Le dénominateur dans (15.56) varie lentement avec θ , car, dans les conditions cinématiques définies ci-dessus, on déduit de la conservation de l'énergie

$$\frac{k}{k_e} \simeq \frac{\hbar k_e}{2m_e c} = \frac{v_e}{2c} \ll 1$$

où v_e est la vitesse des photoélectrons, et

$$(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 \simeq k_e^2 \left(1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta\right)$$

Les électrons sont donc éjectés de façon préférentielle dans un plan perpendiculaire au vecteur d'onde incident et parallèlement au champ électrique de l'onde. Si l'onde incidente n'est pas polarisée, on doit ajouter de façon incohérente les contributions des polarisations suivant Ox et Oy et faire la moyenne

$$\frac{1}{2} \left[(\vec{e}_x \cdot \hat{k}_e)^2 + (\vec{e}_y \cdot \hat{k}_e)^2 \right] = \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

ce qui donne toujours une émission préférentielle dans le plan perpendiculaire à \vec{k}

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{non pol}} = \frac{16\alpha\hbar}{m_e \omega a_0^5} \frac{k_e^3 \sin^2 \theta}{[(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 + 1/a_0^2]^4} \simeq \frac{16\alpha\hbar}{m_e \omega a_0^5 k_e^5} \frac{\sin^2 \theta}{\left[1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta\right]^8} \quad (15.57)$$

Dans les conditions cinématiques choisies, on peut négliger $1/a_0^2$ par rapport à q^2 , car

$$\frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} \gg R_\infty = \frac{e^2}{2a_0} \Rightarrow (k_e a_0)^2 \gg \frac{m_e e^2}{\hbar^2} a_0 = 1$$

Une remarque importante est que nous avons pu traiter l'effet photoélectrique dans un cadre semi-classique, sans introduire le concept de photon, contrairement à une idée largement répandue selon laquelle le concept de photon est nécessaire pour expliquer l'effet de seuil (§ 1.3.2). Dans l'approche semi-classique, l'effet de seuil est dû à la condition de résonance : l'effet photoélectrique n'est appréciable que si l'onde lumineuse est en résonance entre le niveau fondamental E_0 et un niveau E_C du spectre continu : $E_C - E_0 = \hbar\omega$. L'effet photoélectrique s'explique sans photon, mais pas sans \hbar !

15.3.4 Champ électromagnétique quantifié : émission spontanée

Nous avons souvent fait appel à la notion de photon pour l'interprétation intuitive des résultats de la théorie semi-classique, bien qu'à strictement parler ce concept soit étranger à cette théorie. À moins d'utiliser un argument détourné¹² comme celui du § 5.4.1, on ne peut pas calculer la probabilité d'émission spontanée par un atome dans un état excité, car il n'y a pas de champ électromagnétique classique préexistant et le terme d'interaction $\propto \vec{A} \cdot \vec{P}$ est nul. Il est nécessaire de faire appel au concept de champ électromagnétique quantifié développé dans la section 11.3, car les opérateurs d'annihilation $a_{\vec{k}s}$ et de création $a_{\vec{k}s}^\dagger$ sont susceptibles de changer le nombre de photons. De façon plus précise, si $n_{\vec{k}s}$ est le nombre de photons dans le mode de vecteur d'onde \vec{k} et de polarisation s , nous allons nous intéresser aux transitions avec émission d'un photon : $n_{\vec{k}s} \rightarrow n_{\vec{k}s} + 1$ ou avec absorption d'un photon : $n_{\vec{k}s} \rightarrow n_{\vec{k}s} - 1$, l'émission spontanée dans le mode (\vec{k}, s) correspondant au cas $n_{\vec{k}s} = 0$. Rappelons le développement du champ électromagnétique quantifié (11.98) à $t = 0$ dans un volume $L^3 = \mathcal{V}$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left(a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\hat{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right)$$

Le couplage entre le champ électromagnétique¹³ et l'atome est, au premier ordre en \vec{A}

$$W = -\frac{q_e}{m_e} \vec{A} \cdot \vec{P} \quad (15.58)$$

Ce couplage *indépendant du temps* $\vec{A} \cdot \vec{P}$ fait intervenir les termes

$$a_{\vec{k}s} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\vec{e}_s(\hat{k}) \cdot \vec{P}) \quad (15.59)$$

et

$$a_{\vec{k}s}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{P}) \quad (15.60)$$

Le terme (15.59) détruit un photon et le terme (15.60) crée un photon dans le mode (\vec{k}, s) . Soit $|i, n_{\vec{k}s}\rangle$ un état initial où i décrit l'état de l'atome et

12. Cet argument utilise la distribution de Planck, qui contient implicitement le concept de photon : en effet la probabilité d'occupation d'un mode du champ électromagnétique est donnée par la théorie quantique de l'oscillateur harmonique. Il n'est donc pas surprenant que l'on puisse calculer l'émission spontanée.

13. On doit prendre le champ électromagnétique (11.98) à $t = 0$, c'est-à-dire dans le point de vue de Schrödinger $\vec{A}_S = \vec{A}_H(t = 0) = \vec{A}$, car nous utilisons le point de vue de Schrödinger dans les calculs perturbatifs et les *opérateurs* \vec{A} et \vec{P} doivent être pris dans ce point de vue. Dans les § 15.3.1 à 15.3.3, la dépendance par rapport au temps du champ classique est fixée par une source externe, celle qui produit l'onde électromagnétique incidente, alors que le champ quantifié est indépendant de toute source extérieure.

$|f, n_{\vec{k}s} \pm 1\rangle$ un état final. Les éléments de matrice non nuls de $a_{\vec{k}s}$ et $a_{\vec{k}s}^\dagger$ sont donnés par (11.16) et (11.17)

$$\begin{aligned}\langle n_{\vec{k}s} + 1 | a_{\vec{k}s}^\dagger | n_{\vec{k}s} \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s} + 1} \\ \langle n_{\vec{k}s} - 1 | a_{\vec{k}s} | n_{\vec{k}s} \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s}}\end{aligned}\quad (15.61)$$

Nous allons examiner l'émission spontanée correspondant au cas $n_{\vec{k}s} = 0$ et nous reviendrons brièvement sur l'absorption et l'émission induites en fin de sous-section. La quantité physique intéressante est la probabilité par unité de temps pour que l'atome émette un photon de vecteur d'onde $\simeq \vec{k}$ et de polarisation s dans un angle solide $d\Omega$, $\Omega = (\theta, \phi)$, autour¹⁴ de \vec{k} . Pour obtenir cette probabilité, nous avons besoin de la densité d'états du photon

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \omega^2 d\omega d\Omega \quad (15.62)$$

avec $\omega_k \rightarrow \omega$. La probabilité de transition par unité de temps est donnée par la règle d'or de Fermi (9.152) avec un photon final (\vec{k}, s) d'énergie $\hbar\omega$

$$d\Gamma_{fi}^s(\vec{k}, s) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_i - E_f)) \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \omega^2 d\omega d\Omega \quad (15.63)$$

l'élément de matrice $\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle$ étant donné par (contrairement au § 15.3.2, nous avons maintenant $E_i > E_f$ et $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$)

$$\begin{aligned}\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle &= -\frac{q}{m_e} \langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | \vec{A} \cdot \vec{P} | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle \\ &= -\frac{q}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V} \omega}} \langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | a_{\vec{k}s}^\dagger \\ &\quad \times e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_s^* (\hat{k}) \cdot \vec{P}) | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle \\ &\simeq iq_e \omega_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega \mathcal{V}}} \langle f | (\vec{e}_s^* (\hat{k}) \cdot \vec{R}) | i \rangle\end{aligned}\quad (15.64)$$

Nous avons utilisé l'approximation dipolaire $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \simeq 1$ et exprimé l'élément de matrice de \vec{P} à l'aide de (15.48).

14. En toute rigueur, on doit préciser que l'on se place dans le référentiel où l'atome initial est au repos. La conservation de l'énergie implique dans ce référentiel

$$E_i - E_f = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_{\text{at}}}$$

Le deuxième terme est l'énergie de recul, qui sera discutée en (15.147). En général cette énergie de recul est négligeable : tout se passe comme si l'atome était infiniment lourd, $M_{\text{at}} \rightarrow \infty$.

Pour obtenir la probabilité d'émission d'un photon dans l'angle solide $d\Omega$, il faut intégrer (15.63) sur ω ; la fonction δ fixe l'énergie du photon à

$$\hbar\omega = E_i - E_f = \hbar\omega_0$$

ce qui donne, en utilisant (15.64) et en définissant $\vec{R}_{fi} = \langle f | \vec{R} | i \rangle$

$$\frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} = \frac{\alpha\omega_0^3}{2\pi c^2} |\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \quad (15.65)$$

Une expression équivalente utilise le moment dipolaire $\vec{D} = q_e \vec{R}$

$$\frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{\omega_0^3}{2\pi\hbar c^3} \right) |\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \quad (15.66)$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition Γ , qui est l'inverse de la vie moyenne τ de l'état excité : $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur Ω et sommer sur les deux états de polarisation

$$\Gamma = \frac{1}{\tau} = \sum_{s=1}^2 \int \frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} d\Omega \quad (15.67)$$

Afin de calculer l'élément de matrice sous la forme (15.65) par exemple, nous allons nous placer dans une représentation où \vec{R} est diagonal¹⁵

$$\vec{R}_{fi} = \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi_i(\vec{r}) \quad (15.68)$$

et nous allons séparer la partie radiale dépendant de r et la partie angulaire dépendant de \hat{r} dans l'intégrale (15.68) en écrivant $\vec{r} = r\hat{r}$. Afin de traiter un cas concret, nous prenons comme exemple la transition $2p \rightarrow 1s$ de l'atome d'hydrogène¹⁶. La fonction d'onde initiale s'écrit en fonction de sa partie radiale (10.96) et de sa partie angulaire qui est l'harmonique sphérique $Y_1^m(\hat{r})$

$$\varphi_i^m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4!a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^m(\hat{r}) \quad (15.69)$$

tandis que la fonction d'onde finale est donnée par (15.31). Il est commode d'introduire les composantes sphériques (10.64) des vecteurs $\vec{e}_s(\hat{k})$ et \vec{r} et de remarquer¹⁷ que le produit scalaire $\vec{e}_s^* \cdot \hat{r}$ vaut

$$\vec{e}_s^* \cdot \hat{r} = (\vec{e}_s \cdot \hat{r})^* = \left(\sum_{q=\pm 1,0} e_{sq}^* \hat{r}_q \right)^* = \sum_{q=\pm 1,0} e_{sq} \hat{r}_q^*$$

15. Afin de simplifier les formules, nous ne tenons pas compte du spin, dont on montre facilement qu'il ne joue aucun rôle.

16. Dans le cas général d'un état initial i de moment angulaire (j_i, m_i) et d'un état final f de moment angulaire (j_f, m_f) , on utilisera le théorème de Wigner-Eckart pour exprimer l'élément de matrice des composantes sphériques D_q de \vec{D} sous la forme (15.53).

17. Le produit scalaire de deux vecteurs \vec{a} et \vec{b} est donné en fonction de leurs coordonnées sphériques par

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{q=\pm 1,0} a_q^* b_q = \sum_{q=\pm 1,0} (-1)^q a_{-q} b_q$$

D'autre part le projecteur (11.80) orthogonal à \vec{k} s'écrit en coordonnées sphériques

$$\sum_{s=1}^2 e_{sq}(\hat{k}) e_{sq'}^*(\hat{k}) = \delta_{qq'} - \hat{k}_q \hat{k}_{q'}^*$$

ce qui donne pour la partie angulaire

$$\left| \sum_s \vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \langle f | \hat{r} | i \rangle \right|^2 = \sum_{qq'} (\delta_{qq'} - \hat{k}_q \hat{k}_{q'}^*) \langle f | \hat{r}_q^* | i \rangle \langle i | \hat{r}_{q'} | f \rangle$$

L'élément de matrice $\langle f | \hat{r}_q^* | i \rangle$ se calcule aisément en remarquant que d'après (10.64) \hat{r}_q est proportionnel à l'harmonique sphérique $Y_1^q(\hat{r})$; si le nombre quantique magnétique de l'état initial est m

$$\langle f | \hat{r}_q^* | i, m \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int d^2\hat{r} [Y_1^q(\hat{r})]^* Y_1^m(\hat{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \delta_{qm}$$

en utilisant les relations d'orthogonalité (10.55) des harmoniques sphériques, d'où

$$\left| \sum_s \vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \langle f | \hat{r} | i \rangle \right|^2 = \frac{4\pi}{3} (1 - |\hat{k}_m|^2)$$

Le facteur $(1 - |\hat{k}_m|^2)$ vaut $(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta)$ pour $m = \pm 1$ et $(1 - \cos^2 \theta)$ pour $m = 0$, ce qui donne la distribution angulaire du photon émis si l'état initial a une valeur de m bien déterminée. Si l'état initial est non polarisé, on vérifie que la distribution angulaire est bien sûr isotrope, puisqu'il n'y a pas de direction privilégiée

$$\frac{1}{3} \left[2 \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) + (1 - \cos^2 \theta) \right] = \frac{2}{3}$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition (15.67) on intègre sur Ω et le résultat est le même dans les trois cas $m = \pm 1, 0$

$$\int d\Omega \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) = \int d\Omega (1 - \cos^2 \theta) = \frac{8\pi}{3}$$

La partie angulaire donne donc en tout un facteur $32\pi^2/9$. La partie radiale de l'élément de matrice vaut d'après (15.31) et (15.69)

$$\langle f | r | i \rangle = \frac{1}{a_0^4 \sqrt{4! \pi}} \int_0^\infty r^4 dr \exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right) = \sqrt{\frac{4!}{\pi}} \left(\frac{2}{3}\right)^5 a_0$$

La combinaison des résultats précédents donne la probabilité de transition $\Gamma(2p \rightarrow 1s)$

$$\boxed{\Gamma(2p \rightarrow 1s) = \left[\frac{\alpha \omega_0^3}{2\pi c^2} \right] \left[\frac{4!}{\pi} \left(\frac{4}{9}\right)^5 a_0^2 \right] \left[\frac{32\pi^2}{9} \right]} \quad (15.70)$$

et compte tenu de

$$\omega = \frac{3}{4} \frac{R_\infty}{\hbar} = \frac{3}{8} \frac{\alpha^2 m_e c^2}{\hbar} \quad \text{et de} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m c}$$

on peut mettre le résultat sous la forme finale, en rappelant (*cf.* § 1.5.3) que $\hbar/(m_e c^2) = 1.29 \times 10^{-21}$ s

$$\Gamma(2p \rightarrow 1s) = \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right) \left(\frac{4}{9} \right)^4 \simeq 6.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1} \quad \tau = \frac{1}{\Gamma} \simeq 1.6 \times 10^{-9} \text{ s} \quad (15.71)$$

Revenons sur l'aspect qualitatif de ces résultats. Partant de (15.52) ou de (15.65) avec $|\vec{e}_s^* \cdot R_{fi}| \sim a$, où a est une dimension caractéristique de l'atome ($a \simeq 10^{-10}$ m), nous obtenons l'estimation de la largeur de raie

$$\Gamma \sim \frac{\alpha \omega_0^3}{c^2} a^2 = \alpha \left(\frac{a \omega_0}{c} \right)^2 \omega_0 \sim \alpha^3 \omega_0 \sim \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right)$$

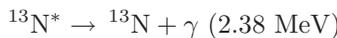
En effet la vitesse v de l'électron sur son orbite¹⁸ est $v \sim \alpha c$. La fréquence caractéristique ω_0 est donnée par $\hbar \omega_0 \sim 1$ eV, soit $\omega_0 \sim 1.5 \times 10^{15}$ rad.s⁻¹, et la vie moyenne τ de l'état excité est estimée à

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \sim 2 \times 10^{-9} \text{ s}$$

La vie moyenne d'états excités se désexcitant par transition dipolaire électrique est effectivement comprise entre $\sim 10^{-7}$ et $\sim 10^{-9}$ s. Il est instructif d'examiner également le cas d'un niveau excité d'un noyau se désintégrant par émission d'un photon γ . L'énergie typique d'un tel photon est ~ 1 MeV, ce qui correspond à une longueur d'onde $\lambda \simeq 10^{-12}$ m. Comme les dimensions du noyau sont de l'ordre du fermi (ou femtomètre), $R \simeq 10^{-15}$ m, le rapport $R/\lambda \ll 1$ et l'approximation dipolaire électrique est *a priori* justifiée. Pour estimer la vie moyenne, il faut multiplier le résultat de physique atomique par un facteur 10^{-18} pour tenir compte du changement d'échelle d'énergie : 1 eV \rightarrow 1 MeV, et par un facteur 10^{10} pour tenir compte du changement de dimension ; $a \rightarrow R$, soit en tout un facteur 10^{-8} . L'estimation pour la vie moyenne de l'état excité d'un noyau est donc

$$\tau_{\text{noyau}} \sim 10^{-8} \tau_{\text{atome}} \sim 10^{-15} \text{ s}$$

Un exemple est la désintégration d'un état excité de l'isotope 13 de l'azote



dont la vie moyenne est de 10^{-15} s, en accord qualitatif avec notre estimation.

18. Les facteurs supposés « voisins de l'unité » de ce type d'estimation ne le sont pas toujours : l'estimation ci-dessus diffère de la valeur exacte (15.71) par un facteur $(8/3)(4/9)^4 \simeq 1/10!$

Revenons brièvement pour conclure à l'émission et l'absorption stimulées. Si l'on prend en compte les facteurs (15.61)–(15.62) pour l'absorption et l'émission stimulées, il n'y a aucune modification à la probabilité d'absorption (15.50). En revanche, si l'atome se trouve dans une cavité de volume \mathcal{V} contenant $\mathcal{N}_{\vec{k}s}$ photons dans le mode (\vec{k}, s) , la probabilité semi-classique d'émission est proportionnelle à la densité $n_{\vec{k}s} = \mathcal{N}_{\vec{k}s}/\mathcal{V}$ de photons, alors que l'utilisation du champ quantifié donne un facteur $(\mathcal{N}_{\vec{k}s} + 1)/\mathcal{V}$. La correction est en général négligeable, sauf dans le cas des cavités micro-ondes supraconductrices où le nombre de photons est petit (§ 11.4.3).

15.3.5 Décohérence par émission de photons

L'émission spontanée de photons par un atome (ou une molécule, un noyau atomique...) est un processus dissipatif (irréversible)

$$\text{atome } (i) \rightarrow \text{atome } (f) + \text{photon } (\vec{k}, \vec{e}_s)$$

Ce processus s'étudie grâce à la méthode de Wigner-Weisskopf (annexe B), qui montre que le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ est donné pour des temps longs par

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\vec{k}, \vec{e}_s} |f, -\hbar\vec{k}; \vec{k}, \vec{e}_s\rangle \frac{W_{fi}/\hbar}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\Gamma/2} e^{-i(E_f + \hbar\omega + E_R)t/\hbar} \quad (15.72)$$

Dans cette équation, Γ^{-1} est la vie moyenne de l'état excité, $E_R = \hbar^2 k_0^2/2M$ l'énergie de recul, \vec{k} le vecteur d'onde du photon émis, $\omega = ck$, $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$ et \vec{e}_s sa polarisation ; typiquement $\Gamma^{-1} \sim 10^{-8}$ s. L'état final du photon est $|\vec{k}, \vec{e}_s\rangle$: son impulsion est $\hbar\vec{k}$. L'état interne $|f\rangle$ de l'atome possède, par conservation de l'impulsion, une impulsion $-\hbar\vec{k}$ si l'état initial $|i\rangle$ est au repos. Pour aller plus loin, il est utile de faire des approximations qui simplifient les expressions sans affecter la physique :

1. W_{fi} est indépendant de \vec{k} , \vec{e} , $W_{fi} = \mathcal{W}$;
2. $k \simeq k_0$;
3. $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - E_R$; ceci tient compte du recul de l'atome.

L'opérateur statistique de l'atome est obtenu en prenant la trace sur les variables du photon

$$\rho_{\text{at}} = \text{Tr}_{\mathcal{E}} |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \sum_{\vec{k}', \vec{e}_s} \langle \vec{k}', \vec{e}_s | \Psi(t)\rangle \langle \Psi(t) | \vec{k}', \vec{e}_s\rangle \quad (15.73)$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{|\mathcal{W}|^2/\hbar^2}{(\omega - \tilde{\omega}_0)^2 + \Gamma^2/4} |-\hbar\vec{k}\rangle \langle -\hbar\vec{k}| = \sum_{\vec{k}} |\gamma(k)|^2 |-\hbar\vec{k}\rangle \langle -\hbar\vec{k}| \quad (15.74)$$

On déduit de (15.74) les cohérences de ρ_{at}

$$\langle \vec{r} | \rho_{\text{at}} | \vec{r}' \rangle = \sum_{\vec{k}} |\gamma(k)|^2 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \quad (15.75)$$

Compte tenu de l'intégrale angulaire

$$\int d\Omega_k e^{-i\vec{k}_0(\vec{r} - \vec{r}')} = 4\pi \frac{\sin k_0 R}{k_0 R} \quad (15.76)$$

avec $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$, nous obtenons le résultat final sous la forme

$$\langle \vec{r} | \rho_{\text{at}} | \vec{r}' \rangle \sim \frac{\sin k_0 R}{k_0 R} \exp\left(-\frac{\Gamma R}{2c}\right) \quad (15.77)$$

La portée des cohérences r_{coh} est donc limitée par la longueur d'onde du photon émis $r_{\text{coh}} \lesssim \lambda_0 \sim 1/k_0$.

Supposons que l'atome soit initialement dans un état de superposition de deux paquets d'ondes de largeur σ dont les centres sont distants de $a \gg \sigma$ (voir (12.129)). Les cohérences sont détruites pour $a \gtrsim \lambda_0$. Ceci a été vérifié dans des expériences d'interférences avec des molécules lourdes genre fullérène (C_{60} de poids moléculaire $\sim 10^3$) : figure 15.1. Ces molécules possèdent un nombre de degrés de liberté très élevé (200 niveaux de vibration) qui interagissent avec l'environnement. L'interfrange i est donné par

$$i = \frac{\lambda_{\text{dB}} D}{a_{\text{eff}}} \quad \lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{mv}$$

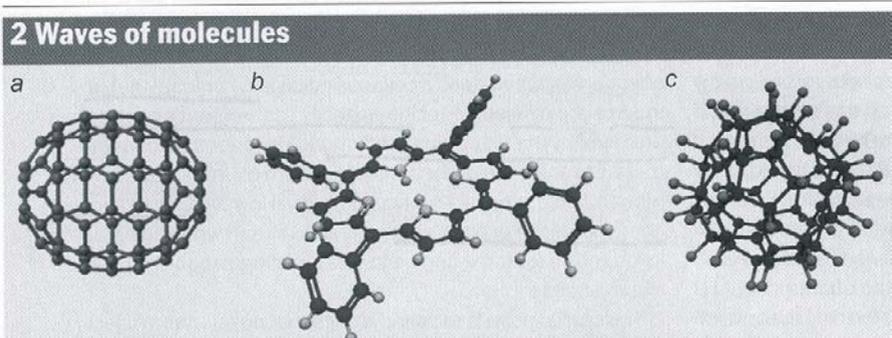


FIG. 15.1 – Molécules utilisées dans les expériences d'interférences : (a) C_{70} , (b) $C_{44}H_{30}N_4$, (c) $C_{60}F_{48}$. D'après Arndt *et al.* [2005], reproduit avec l'aimable autorisation d'A. Zeilinger.

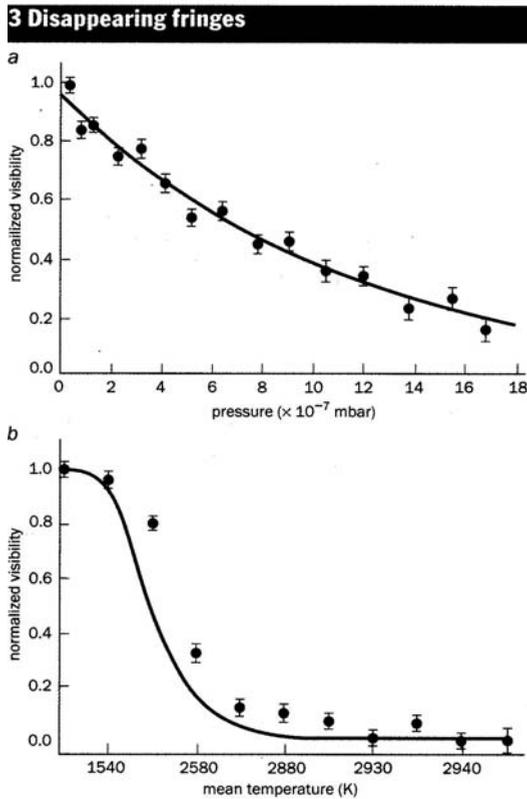


FIG. 15.2 – Brouillage des interférences en raison de la décohérence. Figure du haut : influence de la pression. Figure du bas : influence de la température. D’après Arndt *et al.* [2005], reproduit avec l’aimable autorisation d’A. Zeilinger.

où λ_{dB} est la longueur d’onde de de Broglie, qui est très petite par rapport aux dimensions moléculaires, et a_{eff} la distance effective entre les fentes¹⁹. Les dimensions moléculaires sont en effet ~ 1 nm, $\lambda_{dB} = 0.0025$ nm, alors que $a_{eff} = 1$ μ m.

Deux phénomènes sont principalement à l’origine de la décohérence, qui se traduit par le brouillage des interférences (figure 15.2).

1. L’émission de photons par des états excités : la longueur d’onde λ des photons émis sur le trajet de la molécule entre la source et le détecteur décroît quand T croît, car on excite des niveaux de plus en plus élevés. Trois photons sont émis en moyenne par molécule à 2500 K et conduisent au brouillage des interférences, parce que l’on dispose alors

¹⁹. En effet, l’expérience n’utilise pas directement des fentes d’Young, mais un interféromètre de Talbot-Lau.

d'une information sur le chemin suivi. L'émission d'un photon tel que $\lambda \ll a$ permet en principe de déterminer la trajectoire, et l'information est codée dans l'environnement, même si on ne l'observe pas. Quantitativement, la fonction de décohérence $\eta(\vec{r} - \vec{r}')$ est donnée par

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r} - \vec{r}') &= \eta(\vec{r} - \vec{r}') \rho_0(\vec{r} - \vec{r}') \\ \eta(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{\mathcal{E}_{\text{tot}}} \int_0^\infty d\lambda \mathcal{E}_\lambda \operatorname{sinc} \left(2\pi \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\lambda} \right) \end{aligned} \quad (15.78)$$

avec $\operatorname{sinc} x = \sin x/x$ et \mathcal{E}_λ est le taux d'émission à λ .

2. Les collisions avec le gaz résiduel, qui seront étudiées dans la section 17.3.

La frontière classique/quantique n'est pas fixée par la taille des objets, mais par le type d'interaction avec l'environnement. Une molécule lourde peut se comporter comme un objet quantique (interférences), ou comme un objet classique (pas d'interférences) selon son environnement. Les « gros » objets *apparaissent* classiques parce qu'il est d'autant plus difficile de les isoler de leur environnement qu'ils sont gros, et la décohérence est due à l'information codée dans l'environnement.

15.4 Corrélations de photons

15.4.1 Détection de photons et fonctions de corrélation

Nous avons vu que le concept de photon n'était pas indispensable pour rendre compte de l'effet photoélectrique habituel. On peut se demander s'il existe des situations où la détection du rayonnement électromagnétique ne peut pas être expliquée sans faire appel à ce concept. Avant de donner une réponse positive à cette question dans le § 15.4.2, nous allons d'abord examiner le mécanisme de détection du rayonnement électromagnétique. Réduit à sa plus simple expression, un photodétecteur consiste en un atome qui est ionisé par effet photoélectrique. Le signal est ensuite amplifié et se traduit en fin de compte par un clic du détecteur, mais nous ne nous attarderons pas sur le détail du mécanisme d'amplification. Nous allons écrire un modèle de l'effet photoélectrique, en nous donnant un hamiltonien H composé d'un hamiltonien libre H_0 , somme du hamiltonien atomique et de celui du champ électromagnétique quantifié (11.98), et de l'interaction W que nous écrirons à l'approximation dipolaire comme le produit scalaire de l'opérateur moment dipolaire \vec{D} de l'atome et du champ électrique quantifié \vec{E}

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t = 0) \quad (15.79)$$

où \vec{r} est la position de l'atome : nous supposons que la longueur d'onde du photon est grande par rapport aux dimensions atomiques, de façon à pouvoir utiliser l'approximation dipolaire. Il est commode de se placer dans le point

de vue de l'interaction, où le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ est donné par (11.99), puisque dans notre cas les points de vue de l'interaction et de Heisenberg coïncident. Afin de simplifier les notations, nous allons considérer une seule direction de polarisation, ce qui nous permet de remplacer les opérateurs vectoriels \vec{D} et \vec{E} par des scalaires D et E . Le champ électrique devient²⁰

$$E(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_k \left[a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] = E^{(+)}(t) + E^{(-)}(t) \quad (15.80)$$

avec $\mathcal{E}_k = \sqrt{\hbar \omega_k / 2 \varepsilon_0 \mathcal{V}}$. Les termes $E^{(+)}(t)$ et $E^{(-)}(t)$, ($[E^{(+)}(t)]^\dagger = E^{(-)}(t)$), proportionnels respectivement à $a_{\vec{k}} \exp(-i\omega_k t)$ et à $a_{\vec{k}}^\dagger \exp(+i\omega_k t)$ sont appelés composantes de *fréquence positive* et de *fréquence négative*²¹ de E . Nous appelons $|a\rangle$ et $|b\rangle$ les deux niveaux atomiques²² d'énergie E_a et E_b , où $|a\rangle$ est un état lié et $|b\rangle$ un état du continuum, $\omega_{ba} = (E_a - E_b)/\hbar$ et $\tilde{D}_{ba}(t)$ l'élément de matrice du dipôle donné dans le point de vue de l'interaction par

$$\tilde{D}_{ba}(t) = \langle b | \tilde{D}(t) | a \rangle = e^{i\omega_{ba} t} D_{ba} \quad (15.81)$$

Au premier ordre de la théorie des perturbations, le vecteur d'état atome+champ est donné par ($|\tilde{\Psi}(t=0)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle$)

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{W}(t') |\Psi(t=0)\rangle \quad (15.82)$$

Nous supposons que l'état de l'atome et celui du champ ne sont pas corrélés à $t = 0$

$$|\Psi(t=0)\rangle = |a \otimes \psi_i\rangle \quad (15.83)$$

où $|\psi_i\rangle$ est l'état du champ électromagnétique. Soit $|b \otimes \psi_f\rangle$ un état final possible, orthogonal à $|\Psi(t=0)\rangle$. Au premier ordre, l'amplitude de transition vers cet état est d'après (15.82)

$$\langle b \otimes \psi_f | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ba} t'} D_{ba} \langle \psi_f | E(\vec{r}, t') | \psi_i \rangle \quad (15.84)$$

En utilisant le même raisonnement que dans le § 11.4.3, nous observons que l'approximation séculaire conduit à conserver uniquement la partie à fréquences positives de E , ce qui permet de récrire (15.84)

$$\langle b \otimes \psi_f | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ba} t'} D_{ba} \langle \psi_f | E^{(+)}(\vec{r}, t') | \psi_i \rangle \quad (15.85)$$

20. La légère différence par rapport à (11.98) est absorbée dans une redéfinition de la phase des états atomiques.

21. Cette terminologie a l'origine suivante : un état d'énergie E évolue comme $\exp(-iEt/\hbar) = \exp(-i\omega t)$. En fait ce signe moins est une convention, mais il est choisi une fois pour toutes.

22. Nous utilisons a et b plutôt que i et f , car cette notation sera réservée aux états du champ. La notation (a, b) sera reconduite dans la section suivante.

Le module carré de l'amplitude de transition (15.85) donne la probabilité pour que l'atome soit au temps t dans l'état $|b\rangle$ et le champ dans l'état $|\psi_f\rangle$. Toutefois, nous observons uniquement l'état de l'atome, pas celui du champ, et il nous faut sommer sur tous les états finaux possibles du champ. Pour ce faire, nous nous concentrons pour l'instant sur la partie de l'amplitude de transition (15.84) qui dépend du champ en calculant la quantité intermédiaire $X(t)$

$$\begin{aligned} X(t) &= \sum_f \int_0^t dt' |\langle \psi_f | \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') | \psi_i \rangle|^2 \\ &= \sum_f \int_0^t dt' dt'' \langle \psi_i | \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t'') | \psi_f \rangle \langle \psi_f | \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') | \psi_i \rangle \\ &= \int_0^t dt' dt'' \langle \psi_i | \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t'') \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') | \psi_f \rangle \end{aligned} \quad (15.86)$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture $\sum_f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| = I$ dans l'espace des états du champ. L'état initial du champ n'est pas en général un état pur, mais un mélange décrit par un opérateur statistique ρ

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (15.87)$$

et dans ces conditions

$$X(t) = \int_0^t dt' dt'' \text{Tr} \left[\rho \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t'') \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') \right] \quad (15.88)$$

Cette formule nous conduit à définir la *fonction de corrélation du premier ordre* $G^{(1)}$

$$\boxed{G^{(1)}(\vec{r}, t''; \vec{r}, t') := \text{Tr} \left[\rho \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t'') \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') \right] = \langle \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t'') \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t') \rangle} \quad (15.89)$$

La valeur moyenne dans (15.89) s'annule pour l'état du vide, $\rho = |0\rangle \langle 0|$, et plus généralement elle ne contient aucune contribution des fluctuations de point zéro. L'équation (15.89) conclut le traitement de la partie de la probabilité de transition qui dépend du champ. Pour traiter la partie atome, nous définissons la transformée de Fourier $s(\omega)$ de la *sensibilité du détecteur* $s(t)$

$$s(\omega) = 2\pi \sum_b \xi_b |D_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_b) = \int dt e^{-i\omega t} s(t) \quad (15.90)$$

où ξ_b est la probabilité que le photoélectron soit finalement enregistré par le détecteur après amplification. En portant (15.89) et (15.90) dans l'expression de la probabilité de transition $p(t)$ nous obtenons

$$\boxed{p(t) = \int_0^t dt' dt'' s(t' - t'') G^{(1)}(\vec{r}, t''; \vec{r}, t')} \quad (15.91)$$

Soit $\Delta\omega$ la largeur de bande du rayonnement incident : la détection n'est pas localisée dans le temps, elle dure un temps $\sim 1/\Delta\omega$. Si la sensibilité $s(\omega)$ est indépendante de la fréquence, on a affaire à un « détecteur idéal », pour lequel $s(t' - t'') = s_0\delta(t' - t'')$; on obtient alors une formule très simple pour le taux de détection par unité de temps $w(t)$,

$$w(t) = \frac{dp}{dt} = s_0 \langle \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t) \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t) \rangle \quad (15.92)$$

Cette expression est valable si le temps de corrélation du champ est très grand par rapport au temps de corrélation du détecteur : dans (15.92), on néglige les corrélations temporelles du champ, car $\mathbf{E}^{(-)}$ et $\mathbf{E}^{(+)}$ sont pris au même temps t .

L'expression (15.89) se généralise à la détection du rayonnement par N atomes placés en $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$. Le taux de détection fait intervenir la valeur moyenne

$$\begin{aligned} G^{(N)}(x_1, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_1) &= \text{Tr}[\rho \mathbf{E}^{(-)}(x_1) \dots \mathbf{E}^{(-)}(x_N) \\ &\quad \times \mathbf{E}^{(+)}(x'_1) \dots \mathbf{E}^{(+)}(x'_N)] \\ &= \langle \mathbf{E}^{(-)}(x_1) \dots \mathbf{E}^{(-)}(x_N) \mathbf{E}^{(+)}(x'_1) \dots \mathbf{E}^{(+)}(x'_N) \rangle \end{aligned} \quad (15.93)$$

où nous avons utilisé la notation quadri-dimensionnelle $x = (\vec{r}, t)$. Pour une complète généralité, nous avons choisi des arguments $x'_i \neq x_i$. Par exemple la généralisation de (15.89) serait

$$G^{(1)}(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') = \langle \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}'', t'') \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}', t') \rangle$$

15.4.2 Cohérences

Dans le produit de champs utilisé pour définir (15.93), tous les opérateurs de création sont à gauche de tous les opérateurs d'annihilation : un tel ordre est appelé *ordre normal*, et est noté : $\bullet : \cdot$. Par exemple l'ordre normal : \mathbf{E}^2 : du produit \mathbf{E}^2 est obtenu en omettant un commutateur

$$: \mathbf{E}^2 := \left(\mathbf{E}^{(+)} + \mathbf{E}^{(-)} \right)^2 := \left(\mathbf{E}^{(+)} \right)^2 + \left(\mathbf{E}^{(-)} \right)^2 + 2\mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} \quad (15.94)$$

Nous allons maintenant donner l'interprétation physique et quelques propriétés des fonctions de corrélation, ainsi que quelques applications des fonctions de corrélation d'ordre un et deux. La fonction $G^{(1)}(\vec{r}, t; \vec{r}, t)$ n'est autre que l'intensité lumineuse $\mathcal{I}(\vec{r}, t)$ (à un facteur numérique près) au point \vec{r} et au temps t

$$\mathcal{I}(\vec{r}, t) = \langle \mathbf{E}^{(-)}(\vec{r}, t) \mathbf{E}^{(+)}(\vec{r}, t) \rangle = G^{(1)}(\vec{r}, t; \vec{r}, t) \quad (15.95)$$

En effet, si nous calculons la valeur moyenne de \mathbf{E}^2 (15.94), nous remarquons que $(\mathbf{E}^{\pm})^2$ se comporte en $\exp(\mp 2i\omega t)$, et les valeurs moyennes temporelles de

ces deux termes sont nulles car le temps de réponse du détecteur est très long par rapport à la période du rayonnement : seule subsiste la valeur moyenne de $E^{(-)}E^{(+)}$ dans (15.94).

Il est facile de montrer l'inégalité

$$|G^{(1)}(x_1; x_2)|^2 \leq G^{(1)}(x_1; x_1)G^{(1)}(x_2; x_2) \quad (15.96)$$

Considérons en effet la quantité

$$A = \lambda_1 E^{(+)}(x_1) + \lambda_2 E^{(+)}(x_2)$$

On déduit immédiatement (15.96) de l'inégalité $\langle A^\dagger A \rangle \geq 0$. L'inégalité (15.96) se généralise aisément à des fonctions de corrélation d'ordre plus élevé.

Pour donner l'interprétation physique de $G^{(1)}(x_1; x_2)$, examinons une expérience d'interférences du type fentes d'Young. Le champ sur l'écran au point d'espace-temps $x = (\vec{r}, t)$ est la superposition des champs issus des fentes (1) et (2) aux temps t_i

$$t_i = t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{c} = t - \frac{s_i}{c} \quad i = 1, 2$$

où \vec{r}_i est la position de la fente (i). Le champ $E^{(+)}(\vec{r}, t)$ est donc

$$E^{(+)}(\vec{r}, t) = K_1 E^{(+)}(\vec{r}_1, t_1) + K_2 E^{(+)}(\vec{r}_2, t_2) \quad (15.97)$$

où K_1 et K_2 sont des coefficients numériques, et l'intensité au point \vec{r} est

$$\mathcal{I}(\vec{r}, t) = |K_1|^2 \mathcal{I}(\vec{r}_1, t_1) + |K_2|^2 \mathcal{I}(\vec{r}_2, t_2) + 2\text{Re} \left[K_1 K_2^* G^{(1)}(x_1; x_2) \right] \quad (15.98)$$

Le dernier terme de (15.98) est manifestement un terme d'interférences, et il est contrôlé par la fonction de corrélation $G^{(1)}(x_1; x_2)$. Si l'on utilise pour E un développement en ondes planes, la contribution d'une onde plane à $G^{(1)}(x_1; x_2)$ est donnée par

$$G^{(1)}(x_1; x_2) = |\mathcal{E}_{\vec{k}}|^2 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} e^{-i\omega_k(t_1 - t_2)} \langle a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rangle \quad (15.99)$$

La première exponentielle est indépendante de \vec{r} et la seconde est à l'origine des interférences, si on la reporte dans (15.98). Dans le cas général, on voit d'après (15.98) que la visibilité des franges est contrôlée par la *cohérence d'ordre un* $g^{(1)}$

$$g^{(1)}(x_1; x_2) = \frac{G^{(1)}(x_1; x_2)}{[G^{(1)}(x_1; x_1)G^{(1)}(x_2; x_2)]^{1/2}} \quad (15.100)$$

qui vérifie d'après (15.96) l'inégalité $|g^{(1)}| \leq 1$. Une analyse plus complète de cette expérience d'interférences est proposée à l'exercice 15.6.6

Les expériences d'interférences qui mesurent les corrélations du premier ordre ne peuvent pas distinguer entre les différents états du champ, par exemple un état à un photon et un état cohérent. Ce sont uniquement les corrélations d'ordre supérieur ou égal à deux qui permettent de faire la différence. Nous nous contenterons de la corrélation d'ordre deux, définie suivant (15.93) par

$$G^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1) = \langle \mathbf{E}^{(-)}(x_1) \mathbf{E}^{(-)}(x_2) \mathbf{E}^{(+)}(x_2) \mathbf{E}^{(+)}(x_1) \rangle \quad (15.101)$$

où nous nous sommes limités au cas $x'_i = x_i$. Jusqu'à la fin de cette sous-section, nous allons ignorer les corrélations spatiales du champ et supprimer l'argument \vec{r} afin d'alléger les notations. De plus nous nous limitons à des situations stationnaires : par exemple l'intensité est indépendante du temps, $\mathcal{I}(t) = \mathcal{I}$. Écrivons donc la forme simplifiée de la corrélation d'ordre deux, avec $t_1 = t$, $t_2 = t - \tau$

$$G^{(2)}(t, t - \tau; t - \tau, t) = \langle \mathbf{E}^{(-)}(t) \mathbf{E}^{(-)}(t - \tau) \mathbf{E}^{(+)}(t - \tau) \mathbf{E}^{(+)}(t) \rangle \quad (15.102)$$

qui ne dépend en fait que de τ en raison de la stationnarité, et définissons la *cohérence d'ordre deux* $g^{(2)}(\tau)$ par

$$G^{(2)}(t, t - \tau; t - \tau, t) = \mathcal{I}^2 \left(1 + g^{(2)}(\tau) \right) \quad (15.103)$$

Dans le cas d'un *rayonnement classique*, $G^{(2)}(t, t - \tau; t - \tau, t)$ est une simple corrélation d'intensité

$$G^{(2)}(t, t - \tau; t - \tau, t) = \langle \mathcal{I}(t) \mathcal{I}(t - \tau) \rangle \quad (15.104)$$

et on voit que $g^{(2)}(\tau)$ n'est pas limité comme l'était $g^{(1)}$

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle \mathcal{I}^2 \rangle}{\langle \mathcal{I} \rangle^2} - 1$$

ce qui montre que $0 \leq g^{(2)}(0) \leq \infty$. *A contrario*, toute expérience mesurant une valeur $g^{(2)}(0) < 0$ mettrait en évidence le caractère quantique du rayonnement détecté. Un autre cas intéressant est celui du rayonnement gaussien : lorsqu'une distribution de probabilité est gaussienne, les moments d'ordre 4 s'expriment en fonction des moments d'ordre 2, et comme $\langle (\mathbf{E}^{(\pm)})^2 \rangle = 0$, on déduit

$$\begin{aligned} G^{(2)}(t, t - \tau; t - \tau, t) &= \langle \mathbf{E}^{(-)}(t) \mathbf{E}^{(+)}(t) \rangle \langle \mathbf{E}^{(-)}(t - \tau) \mathbf{E}^{(+)}(t - \tau) \rangle \\ &+ \langle \mathbf{E}^{(-)}(t) \mathbf{E}^{(+)}(t - \tau) \rangle \langle \mathbf{E}^{(-)}(t) \mathbf{E}^{(+)}(t - \tau) \rangle = \mathcal{I}^2 \left(1 + |g^{(1)}(\tau)|^2 \right) \end{aligned}$$

La cohérence d'ordre deux s'exprime en fonction de la cohérence d'ordre un. Un autre cas extrême est celui d'un état à photon, car alors $G^{(2)} = 0$, soit

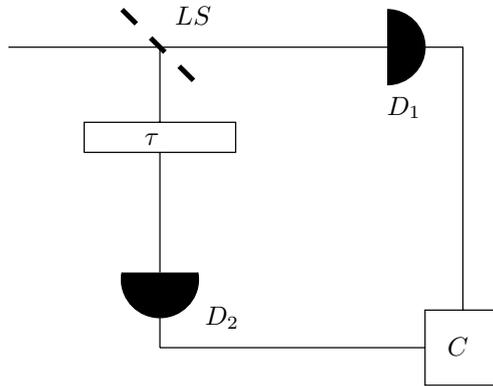


FIG. 15.3 – Mesure de la corrélation d'intensité. La lame séparatrice LS est équilibrée et les détecteurs D_1 et D_2 sont à égale distance de LS . Un retard τ variable est introduit entre LS et D_2 , et le produit des intensités est effectué en C .

$g^{(2)} = -1$, ce qui est hautement non classique ! Enfin, pour un état cohérent, on a manifestement $g^{(2)} = 0$, car $a^2|z\rangle = z^2|z\rangle$.

Le schéma d'une expérience permettant de mesurer une cohérence temporelle d'ordre deux est donné sur la figure 15.3. Cette expérience a été réalisée pour la première fois par Hanbury Brown et Twiss²³ (HBT), et a donné comme résultat $g^{(2)}(0) = 1$. En fait le rayonnement mesuré par HBT était un rayonnement thermique, et dans ce cas il est facile de voir que

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle}{\langle a^\dagger a \rangle^2} - 1 = \frac{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle}{\langle n \rangle^2} - 1 = 1$$

Lorsque $g^{(2)}(0) \geq 0$, on dit que l'on a affaire à un groupement de photons. Le dégroupement de photons²⁴, $g^{(2)}(0) \leq 0$ ne peut s'expliquer que par le caractère quantique du rayonnement. La quantité $g^{(2)}(0)$ reflète la distribution de probabilité du nombre de photons dans un mode : distribution de Bose-Einstein pour le rayonnement thermique ($g^{(2)}(0) = 1$), de Poisson pour un état cohérent ($g^{(2)}(0) = 0$), et plus étroite que Poisson pour un état non classique ($g^{(2)}(0) < 0$).

15.4.3 Expérience de Hanbury Brown et Twiss

L'expérience HBT destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles est schématisée sur la figure 15.4 : deux sources S_1 et S_2 vues depuis l'origine sous un angle 2θ émettent des photons détectés en A et B par deux détecteurs distants de d . On définit les distances $S_1A = S_2B = R_1$ et $S_1B = S_2A = R_2$.

23. Cette expérience était à l'origine destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles.

24. En anglais : *photon bunching* et *photon antibunching*.

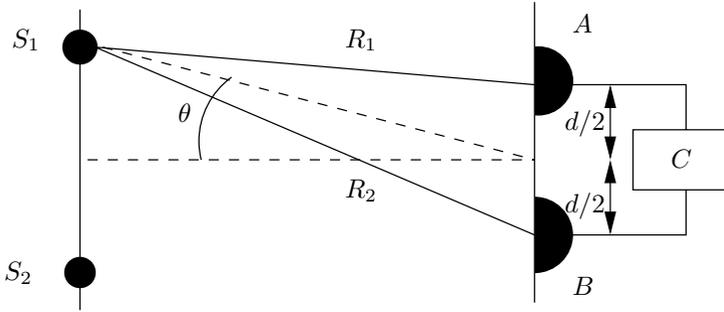


FIG. 15.4 – Schéma de l'expérience HBT destinée à mesurer le diamètre angulaire des étoiles.

La corrélation d'intensité $\langle I(A)I(B) \rangle$ est mesurée en faisant le produit des signaux mesurés en A et B . Commençons par un raisonnement classique : comme

$$R_2 - R_1 \simeq kd\theta \quad (15.105)$$

où θ est défini sur la figure 15.4 et k est le module du vecteur d'onde des photons, le champ électrique au point B , $E_B(1)$, dû à la source S_1 est relié à $E_A(1)$ par

$$E_B(1) = E_A(1) e^{ikd\theta} = E_A(1) e^{i\delta} \quad (15.106)$$

tandis que pour la source S_2

$$E_B(2) = E_A(2) e^{-ikd\theta} = E_A(2) e^{-i\delta} \quad (15.107)$$

L'intensité moyenne en A est

$$\langle I(A) \rangle = \langle |E_A(1) + E_A(2)|^2 \rangle = \langle I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \psi \rangle \quad (15.108)$$

où ψ est le déphasage entre $E_A(1)$ et $E_A(2)$. Ce déphasage est aléatoire et $\langle \cos \psi \rangle = 0$: en d'autres termes, il n'y a évidemment pas d'interférences du premier ordre si les sources S_1 et S_2 sont incohérentes. Il n'en est pas de même pour la corrélation d'intensité. Un calcul immédiat donne

$$\begin{aligned} \langle I(A)I(B) \rangle &= \langle (I_1 + I_2)^2 + 2(I_1 + I_2)\sqrt{I_1 I_2} [\cos \psi + \cos(\psi - 2\delta)] \\ &\quad + 4I_1 I_2 \cos \psi \cos(\psi - 2\delta) \rangle = (I_1 + I_2)^2 + 2I_1 I_2 \cos 2\delta \end{aligned}$$

soit, si $I_1 = I_2 = I/2$

$$\langle I(A)I(B) \rangle = I^2 \left[1 + \frac{1}{2} \cos 2\delta \right] \quad (15.109)$$

Prenons un modèle unidimensionnel où l'étoile est représentée par une source étalée entre $-\theta_0$ et $+\theta_0$ avec une intensité $1/2\theta_0$. On trouve en intégrant sur θ

$$\langle I(A)I(B) \rangle = I^2 \left[1 + \frac{\sin(2kd\theta_0)}{4kd\theta_0} \right] \quad (15.110)$$

Un pic de largeur $\Delta\theta_0 = 1/(2kd\theta_0)$ se superpose à un fond constant, et la largeur du pic, mesurée en faisant varier la distance d entre les détecteurs, donne le diamètre angulaire de l'étoile.

Dans une description quantique, cette expérience mesure la cohérence d'ordre deux

$$g^{(2)}(\vec{r}_A, t, \vec{r}_B, t; \vec{r}_B, t, \vec{r}_A, t)$$

Afin de déterminer cette fonction, utilisons le raisonnement simplifié suivant : soit a_i l'amplitude de probabilité pour que la source S_i émette un photon. Les amplitudes de probabilité pour les quatre configurations possibles sont

$$\begin{aligned} S_1 A S_1 B &: a_1^2 e^{ikR_1} e^{ikR_2} \\ S_2 A S_2 B &: a_2^2 e^{ikR_2} e^{ikR_1} \\ S_1 A S_2 B &: a_1 a_2 e^{ikR_1} e^{ikR_2} \\ S_1 B S_2 A &: a_2 a_1 e^{ikR_2} e^{ikR_1} \end{aligned}$$

Les chemins $\{S_1 A S_2 B\}$ et $\{S_1 B S_2 A\}$ sont indiscernables et les photons sont des bosons : on doit ajouter les *amplitudes*. La corrélation $\langle I(A)I(B) \rangle$ sera donc de la forme

$$\langle I(A)I(B) \rangle \propto |a_1^2|^2 + |a_2^2|^2 + |a_1 a_2|^2 (1 + \cos \delta) \quad (15.111)$$

Si nous revenons à $g^{(2)}$ et au formalisme opératoire

$$|a_i^2|^2 \rightarrow \langle a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i \rangle \quad |a_i a_j|^2 \rightarrow \langle a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j \rangle$$

et si nous supposons que les intensités des deux sources sont identiques, on obtient pour la corrélation d'intensité

$$\langle I(A)I(B) \rangle \propto \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle + \langle n \rangle^2 (1 + \cos 2\delta) \quad (15.112)$$

Lorsque S_1 et S_2 sont des sources thermiques, $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle = 2\langle n \rangle^2$ on retrouve $g^{(2)}(0) = 1$. Lorsque ce sont des lasers

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle = \langle n \rangle^2 \iff g^{(2)}(0) = 0$$

Lorsque Hanbury Brown et Twiss ont proposé leur méthode, l'objection suivante leur avait été faite : comme les émissions de photons par S_1 et S_2 sont séparées par un intervalle du genre espace et ne peuvent pas être reliées de façon causale, comment peut-on espérer voir une corrélation ? En fait, le champ électrique juste avant les photodétecteurs est la superposition d'ondes émises par tous les atomes de l'étoile. Ce que mesurent les détecteurs, ce sont les propriétés statistiques du champ quantifié résultant de l'addition de toutes ces contributions. Les fluctuations du champ électromagnétique ont comme conséquence que les détections à deux instants ou en deux points voisins sont corrélées.

Une autre question intéressante est la suivante : l'effet HBT est-il relié à la statistique bosonique des photons ? La réponse est à la fois oui et non : la statistique *ne suffit pas* à expliquer la grande variété de $g^{(2)}(0)$ observés, mais l'effet *n'est pas non plus indépendant* de la statistique. Avec deux fermions, nous aurions un signe $(-)$ dans la combinaison des amplitudes $\{S_1 A S_2 B\}$ et $\{S_1 B S_2 A\}$ et

$$\langle I(A)I(B) \rangle \propto \langle n \rangle^2 (1 - \cos 2\delta)$$

ce que l'on voit aisément en remplaçant les RCC des a_i et des a_i^\dagger par des RAC (14.48) des c_i et des c_i^\dagger . Cet effet a été observé expérimentalement par Kiesel *et al.* [2002] et Jelts *et al.* [2007]. L'effet HBT appliqué aux mésons π émis dans une collision d'ions lourds peut être utilisé pour mesurer la taille des « boules de feu » résultant de la collision (voir par exemple Baym [1998]).

15.5 Manipulation d'atomes par laser

15.5.1 Équations de Bloch optiques

On sait depuis longtemps que la lumière exerce des forces sur la matière, l'exemple le plus connu étant la pression de radiation. Cependant, lorsque la lumière provient de sources conventionnelles, ces forces sont très faibles, et c'est seulement depuis une vingtaine d'années que l'utilisation des lasers a permis d'exercer des forces importantes sur un atome, forces qui peuvent aller jusqu'à 10^5 fois la force de pesanteur ! Une application particulièrement intéressante est le *refroidissement laser*, dont nous donnerons un exemple élémentaire au § 15.5.3. Nous utiliserons le modèle de l'atome à deux niveaux : deux niveaux atomiques E_a et E_b ($E_b > E_a$) sont séparés de $E_b - E_a = \hbar\omega_0$. On supposera que E_a est le niveau fondamental de l'atome, ou bien un niveau métastable dont la durée de vie est suffisamment longue pour ne pas intervenir dans la discussion. Cet atome est placé dans une onde électromagnétique créée par un laser dont le vecteur d'onde \vec{k} est parallèle à Oz et dont la fréquence ω est proche de la fréquence de résonance : $\omega \simeq \omega_0$. Comme au § 5.3.2, on appelle *désaccord* la différence $\delta = \omega - \omega_0$. Le champ électrique à la position de l'atome est de la forme

$$\vec{E} = \vec{e}_s E_0 \cos \omega t \quad (15.113)$$

On ignore pour le moment les degrés de liberté de translation de l'atome, en le supposant infiniment lourd²⁵. Dans ces conditions, le hamiltonien H est

25. Plus précisément, on traite classiquement les degrés de liberté de translation, ce qui suppose que l'on doit avoir $\hbar\Gamma \gg E_R$, où Γ est la largeur de raie et E_R l'énergie de recul définie en (15.147). On suppose aussi le milieu suffisamment dilué, afin de pouvoir négliger les collisions entre atomes.

donné par (5.54)

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2}\omega_0 & -dE_0 \cos \omega t \\ -dE_0 \cos \omega t & \frac{\hbar}{2}\omega_0 \end{pmatrix} \quad (15.114)$$

Les lignes et les colonnes sont dans l'ordre (a, b) , le zéro d'énergie en l'absence de champ a été choisi à mi-chemin entre E_a et E_b et d est l'élément de matrice $(\vec{D} \cdot \vec{e}_s)_{ab}$ de la composante suivant \vec{e}_s de l'opérateur moment dipolaire électrique entre les deux niveaux. On introduit comme au § 5.3.2 la fréquence de Rabi ω_1

$$\omega_1 = -\frac{dE_0}{\hbar} \quad (15.115)$$

Le signe moins tient compte de la charge négative de l'électron, de sorte que $\omega_1 > 0$. Avec cette définition on peut récrire H en fonction des matrices de Pauli σ_1 et σ_3

$$\frac{1}{\hbar}H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & \frac{1}{2}\omega_0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\omega_0\sigma_3 + (\omega_1 \cos \omega t)\sigma_1 = \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \quad (15.116)$$

En général l'état quantique de l'atome sera décrit par un opérateur statistique ρ . En effet, l'atome est en interaction permanente avec le champ électromagnétique quantifié, et même si l'ensemble champ+atome était dans un état pur, l'état de l'atome ne serait pas un état pur : comme nous l'avons vu au § 6.2.2, l'état de l'atome est décrit en prenant la trace partielle sur les variables du champ, et le résultat est un opérateur statistique, l'opérateur statistique réduit de l'atome, représenté par une matrice 2×2 agissant dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux, et non un vecteur de cet espace. Suivant le § 6.2.3, nous écrivons la matrice statistique en fonction d'un vecteur réel \vec{b} , le vecteur de Bloch, tel que $\vec{b}^2 \leq 1$

$$\rho = \frac{1}{2} \left(I + \sum_{i=1}^3 \sigma_i b_i \right) = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \quad (15.117)$$

Suivant les notations usuelles, on appelle $(u, v, -w)$ les composantes du vecteur de Bloch : $u = b_1$, $v = b_2$ et $w = -b_3$. On peut aussi écrire ρ sous forme matricielle explicite

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) & \rho_{ab} \\ \rho_{ba} & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - w & u - iv \\ u + iv & 1 + w \end{pmatrix} \quad (15.118)$$

Dans l'écriture de ρ , nous avons tenu compte de la condition $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$. La quantité $w = \rho_{bb} - \rho_{aa}$ mesure la différence de population entre les niveaux E_b et E_a : si l'on dispose d'une collection de \mathcal{N} atomes, en moyenne $\mathcal{N}\rho_{aa}$ seront

dans l'état E_a et $\mathcal{N}\rho_{bb}$ dans l'état E_b . Les éléments de matrice non diagonaux $\rho_{ab} = \rho_{ba}^*$ sont les cohérences. La présence de cohérences non nulles, c'est-à-dire de phases, est bien sûr le signal d'effets quantiques.

L'équation d'évolution de ρ est donnée par (6.51)

$$\dot{\rho} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \quad (15.119)$$

Le commutateur dans (15.119) se calcule aisément en utilisant (3.52)

$$[\vec{\sigma} \cdot \vec{a}, \vec{\sigma} \cdot \vec{b}] = 2i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

On obtient

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \omega_0 v \\ \dot{v} &= -\omega_0 u + 2\omega_1 w \cos \omega t \\ \dot{w} &= -2\omega_1 v \cos \omega t \end{aligned} \quad (15.120)$$

Il sera commode, afin de compléter ces équations et de justifier une approximation ultérieure, de les récrire en fonction de la cohérence $r = \rho_{ab} = (u - iv)/2$

$$\dot{w} = -2i\omega_1(r - r^*) \cos \omega t \quad (15.121)$$

$$\dot{r} = i\omega_0 r - i\omega_1 w \cos \omega t \quad (15.122)$$

Ces équations d'évolution de la matrice statistique sont hamiltoniennes, c'est-à-dire régies par une loi du type (15.119) dépendant d'un hamiltonien ; on dit aussi que l'évolution est unitaire, car (15.119) est équivalent à

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(t=0)U^\dagger(t, 0)$$

où $U(t)$ est l'opérateur unitaire d'évolution (4.14). Cependant ces équations sont en fait incomplètes : l'interaction de l'atome avec son environnement conduit à des équations qui ne sont pas de la forme (15.119), et donc à une évolution non hamiltonienne. C'est l'ensemble atome+environnement qui obéit à une évolution unitaire, et si l'on s'intéresse seulement aux degrés de liberté de l'atome, l'évolution n'est plus hamiltonienne : l'atome est un système quantique ouvert. Ce type d'évolution a déjà été rencontré dans la section 6.4, et il sera traité en toute généralité au chapitre 17. Nous allons nous limiter au cas où l'environnement de l'atome est uniquement le champ électromagnétique, ce qui est une excellente approximation pour des atomes piégés par des lasers qui forment un milieu dilué, mais il pourrait y avoir d'autres sources d'évolutions non hamiltoniennes, comme des collisions avec d'autres atomes dans un milieu dense²⁶. Le calcul fondé sur (15.119) tient compte de l'interaction avec le champ laser, et donc de l'absorption et de l'émission induites,

26. Un exemple est le milieu actif pour un laser, qui est décrit par des équations de Bloch optiques analogues à (15.123)-(15.124) : voir par exemple Mandel et Wolf [1995], chapitre 18.

mais non de l'interaction avec le champ quantifié : il néglige l'émission spontanée. En raison de l'émission spontanée, l'atome dans le niveau E_b tend à revenir dans le niveau E_a en émettant un photon avec une probabilité Γ par unité de temps (*cf.* (15.67)). L'équation différentielle donnant $\dot{\rho}_{bb}$ doit donc inclure dans son second membre un terme $-\Gamma\rho_{bb}$, qui conduirait, en l'absence de champ laser, à une décroissance exponentielle de la population du niveau E_b en $\exp(-\Gamma t)$. On en déduit que le membre de droite de l'équation différentielle pour w contient un terme en $-\Gamma(w+1)$. Les cohérences doivent également décroître car, en l'absence de champ laser, l'atome revient dans son niveau fondamental E_a pour $t \gg \tau = 1/\Gamma$, et la matrice statistique a pour seul élément non nul $\rho_{aa} = 1$. Nous avons montré au § 6.4.2 que le taux de décroissance des cohérences est, dans le cadre de nos approximations, égal à $\Gamma/2$. Les équations (15.121) et (15.122) deviennent donc

$$\dot{w} = -2i\omega_1(r - r^*) \cos \omega t - \Gamma(w + 1) \quad (15.123)$$

$$\dot{r} = i\omega_0 r - i\omega_1 w \cos \omega t - \frac{\Gamma}{2} r \quad (15.124)$$

Nous allons transformer ces équations en utilisant comme au § 5.3.2 l'approximation séculaire. On remarque que si $\omega_1 \ll \omega_0$, l'équation (15.124) implique que $r \sim \exp(i\omega_0 t)$ alors que w est lentement variable. Écrivant $\cos \omega t$ sous forme d'exponentielles complexes et négligeant les termes rapidement variables en $\exp(\pm i(\omega + \omega_0)t)$, les équations (15.123)–(15.124) deviennent

$$\dot{w} = -i\omega_1(e^{-i\omega t} r - e^{i\omega t} r^*) - \Gamma(w + 1) \quad (15.125)$$

$$\dot{r} = i\omega_0 r - \frac{i}{2} \omega_1 w (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) - \frac{\Gamma}{2} r \quad (15.126)$$

Dans le second membre de (15.125), tous les termes sont lentement variables. Pour mettre en évidence l'évolution temporelle des termes du second membre de (15.126), on pose

$$e^{-i\omega t} r = r' \quad e^{-i\omega t} \dot{r} = i\omega r' + \dot{r}'$$

ce qui donne, en multipliant (15.126) par $\exp(-i\omega t)$

$$\dot{r}' = i(\omega_0 - \omega)r' - \frac{i}{2} \omega_1 w (1 + e^{-2i\omega t}) - \frac{\Gamma}{2} r'$$

L'approximation séculaire consiste à négliger dans cette équation le terme rapidement variable $\exp(-2i\omega t)$. On aboutit donc au système d'équations différentielles, les équations de Bloch optiques

$$\dot{w} = -i\omega_1(r' - r'^*) - \Gamma(w + 1) \quad (15.127)$$

$$\dot{r}' = i(\omega_0 - \omega)r' - \frac{i}{2} \omega_1 w - \frac{\Gamma}{2} r' \quad (15.128)$$

15.5.2 Forces dissipatives et forces réactives

Lorsque l'atome interagit avec le champ laser pendant un intervalle de temps $t \gg \tau$, on atteint un régime stationnaire (ou permanent) $\dot{w} = \dot{r} = 0$, où il est facile d'écrire la solution du système différentiel (15.127)-(15.128). En passant par l'étape intermédiaire

$$r'_{\text{st}} = \frac{i\omega_1 w/2}{i(\omega_0 - \omega) - \Gamma/2}$$

on trouve pour la valeur stationnaire w_{st} de w

$$w_{\text{st}} = -\frac{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (15.129)$$

On en déduit $\rho_{bb} = (1 + w_{\text{st}})/2 < 1/2$: il ne peut pas y avoir d'inversion de population, c'est-à-dire de situation où le niveau excité est plus peuplé que le niveau fondamental. Le résultat stationnaire pour r' est

$$r'_{\text{st}} = \frac{i\omega_1}{2} \frac{\Gamma/2 - i(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (15.130)$$

Il est commode d'introduire le *paramètre de saturation*, s , proportionnel à l'intensité \mathcal{I} du laser (rappelons que le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$)

$$s = \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \propto \mathcal{I}_{\text{laser}} \quad (15.131)$$

ce qui permet de récrire

$$\rho_{bb,\text{st}} = \frac{1}{2}(1 + w_{\text{st}}) = \frac{s}{2(1 + s)} \quad r'_{\text{st}} = \frac{i}{\omega_1} \left(\frac{s}{1 + s} \right) \left(\frac{\Gamma}{2} - i\delta \right) \quad (15.132)$$

Ces résultats permettent d'obtenir les forces exercées par la lumière laser sur un atome en régime permanent. Un argument simple permet de trouver l'équivalent de la pression de radiation sur l'atome : comme en régime permanent la probabilité de trouver un atome dans l'état excité E_b est $\rho_{bb,\text{st}}$, le nombre moyen de photons spontanés émis par unité de temps est

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \Gamma \rho_{bb,\text{st}} = \frac{\Gamma}{2} \frac{s}{1 + s} \quad (15.133)$$

Ces photons sont émis de façon isotrope et contribuent à un mouvement désordonné de l'atome, que nous étudierons dans la sous-section suivante. Mais l'atome une fois revenu dans son état fondamental absorbe un photon du champ laser, et ces photons ont tous leur impulsion $\hbar\vec{k}$ dans la même direction. Le nombre de photons absorbés est le même que le nombre de photons

émis spontanément, et l'atome est soumis à une force due à l'absorption de photons égale à la variation d'impulsion par unité de temps

$$\vec{F}_{\text{diss}} = \hbar \vec{k} \left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{s}{1+s} \right) = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2} \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (15.134)$$

Lorsque le paramètre de saturation $s \gg 1$, l'accélération \vec{a} approche sa valeur maximale

$$\vec{a}_{\text{max}} = \frac{\hbar \vec{k}}{M} \frac{\Gamma}{2} \quad (15.135)$$

où M est la masse de l'atome. Pour la raie D_2 du sodium, $\Gamma^{-1} = 1.6 \times 10^{-8}$ s et $a_{\text{max}} \sim 10^6 \text{ ms}^{-2}$, environ 10^5 fois l'accélération de la pesanteur.

Nous allons retrouver le résultat (15.134) pour la force dissipative en examinant la force exercée par le champ électromagnétique (15.113) sur le dipôle atomique. La forme de l'opérateur dipôle dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux est $D = d\sigma_1$, et, d'après (6.21), sa valeur moyenne est

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= d \text{Tr}(\rho\sigma_1) = d(\rho_{ab} + \rho_{ab}^*) \\ &= d(r + r^*) = d(r'e^{i\omega t} + r'^*e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{2ds}{\omega_1(1+s)} \left[-\frac{\Gamma}{2} \sin \omega t + \delta \cos \omega t \right] \end{aligned} \quad (15.136)$$

où nous avons utilisé l'expression (15.132) de r' en régime permanent. Cette valeur moyenne du dipôle exhibe un terme $\propto \cos \omega t$ en phase avec le champ (15.113) et un terme en quadrature de phase $\propto \sin \omega t$. Le travail dW/dt fourni par unité de temps par le champ (15.113) sur le dipôle, c'est-à-dire la puissance fournie à l'atome²⁷, est

$$\frac{dW}{dt} = E_0 \cos \omega t \frac{d\langle D \rangle}{dt}$$

Compte tenu de (15.136) qui donne immédiatement $d\langle D \rangle/dt$

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)} \left[\frac{\Gamma}{2} \cos^2 \omega t + \delta \sin \omega t \cos \omega t \right] \quad (15.137)$$

et en prenant la moyenne temporelle

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)} \frac{\Gamma}{4} = \frac{\hbar\omega s}{1+s} \frac{\Gamma}{2} \quad (15.138)$$

27. Il est utile de se souvenir de l'oscillateur harmonique forcé élémentaire à une dimension

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f \cos \omega t$$

La puissance fournie à l'oscillateur est $f(\cos \omega t)dx/dt$. La correspondance avec le présent problème est donnée par $f \rightarrow E_0$ et $x \rightarrow \langle D \rangle$.

Le nombre de photons absorbés par seconde est

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{s}{1+s} \right)$$

en accord avec (15.133). L'étude élémentaire de l'oscillateur harmonique forcé montre que c'est la composante de l'élongation en quadrature de phase avec la force externe qui est responsable de la dissipation par frottement, d'où l'expression « force dissipative » pour la pression de radiation. La partie en phase avec le champ est appelée « réactive ». Le modèle que nous avons étudié ne contient aucune dépendance spatiale, et dans ce cas la valeur moyenne du terme de $\langle D \rangle$ en phase avec le champ ne produit aucun travail. Pour obtenir un résultat non nul, il faut introduire une dépendance spatiale. On montre alors (exercice 15.6.7) que la composante réactive de la force dépend du gradient de la fréquence de Rabi

$$\vec{F}_{\text{react}} = -\frac{\hbar\delta}{2} \frac{\vec{\nabla}\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (15.139)$$

La force réactive est nulle dans une onde plane, où la fréquence de Rabi ω_1 est indépendante de \vec{r} . Elle ne transmet aucune énergie aux atomes. Si par exemple la variation spatiale de la fréquence de Rabi est due à l'utilisation de plusieurs ondes laser, la force réactive a pour effet de redistribuer l'énergie entre les différentes ondes. Contrairement à la force dissipative, la force réactive ne sature pas lorsque $s \rightarrow \infty$.

La force réactive dérive d'un potentiel

$$\vec{F}_{\text{react}} = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) \quad U(\vec{r}) = \frac{\hbar\delta}{2} \ln \left(1 + \frac{\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right)$$

Pour $\delta < 0$, une région où $\omega_1^2(\vec{r})$ est maximum apparaît comme un puits de potentiel attractif pour l'atome. Dans un champ laser inhomogène, l'atome est attiré vers les régions de forte intensité. Ceci est mis à profit dans de nombreuses applications pratiques où l'on manipule des objets microscopiques ; on fabrique ainsi des « pincettes optiques », qui permettent par exemple de manipuler des brins d'ADN.

15.5.3 Refroidissement Doppler

Une application importante de la force dissipative (15.134) est le *refroidissement Doppler* des atomes. Ceux-ci sont modélisés comme précédemment par un système à deux niveaux séparés de $\hbar\omega_0$. Les atomes sont localisés dans des faisceaux laser provenant de directions opposées avec une fréquence identique ω proche de la résonance ω_0 , mais telle que $\omega < \omega_0$, c'est-à-dire avec un désaccord $\delta = \omega - \omega_0 < 0$. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons au refroidissement suivant un axe que nous prendrons comme axe des

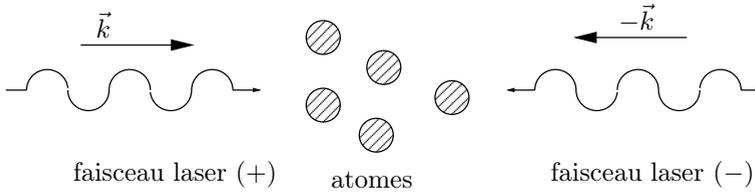


FIG. 15.5 – Principe du refroidissement Doppler.

z , et à deux faisceaux lasers dont les vecteurs d'onde sont $\vec{k} \parallel \hat{z}$ et $-\vec{k} \parallel -\hat{z}$ (figure 15.5). Pour un refroidissement suivant les trois dimensions d'espace, il faudrait prendre six faisceaux laser, deux suivant chaque axe, avec des vecteurs d'onde opposés. Nous allons nous placer dans le cas d'un paramètre de saturation $s \ll 1$, ce qui permettra de négliger le terme ω_1^2 dans le dénominateur de (15.134).

Un atome dans le champ des lasers subira des *cycles de fluorescence*. Un cycle de fluorescence comprend l'absorption d'un photon d'un des deux lasers par un atome dans son état fondamental, ce qui envoie cet atome dans son état excité, suivi de l'émission spontanée d'un photon qui remet l'atome dans son état fondamental (figure 15.6). Soit $n_+(v)$ le nombre de cycles de fluorescence par seconde que subit un atome de vitesse v (dirigée suivant l'axe des z puisque notre discussion est limitée à une dimension), avec absorption de photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, et $n_-(v)$ le nombre de cycles de fluorescence avec absorption d'un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$. Si un atome se dirige vers la gauche ($v < 0$), il verra par effet Doppler des photons de fréquence $\omega - kv$ s'ils proviennent du faisceau $+\vec{k}$, et de fréquence $\omega + kv$ s'ils proviennent du faisceau $-\vec{k}$. En raison du désaccord négatif ($\omega < \omega_0$), les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$ seront plus proches de la résonance et absorbés en plus grand nombre que les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$, qui sont eux, au contraire, plus éloignés de la résonance. Ceci donnera pour ces atomes une force dirigée vers la droite. Inversement, pour des atomes se dirigeant vers la droite ($v > 0$), la force sera dirigée vers la gauche. En résumé, les atomes se dirigeant vers la gauche absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, les

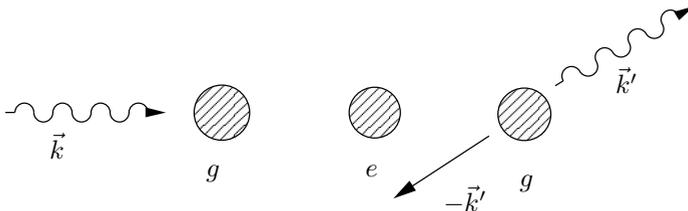


FIG. 15.6 – Cycle de fluorescence.

atomes se dirigeant vers la droite absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$: dans les deux cas les atomes seront ralentis et nous voyons apparaître une force de type visqueux ; c'est pourquoi on parle parfois de « mélasse optique ». La force moyenne sur un atome de vitesse v est

$$\langle \vec{F} \rangle = \hbar \vec{k} [n_+(v) - n_-(v)] \quad (15.140)$$

avec

$$n_{\pm}(v) = \frac{\Gamma}{4} \frac{\omega_1^2}{(\delta \mp kv)^2 + \Gamma^2/4} \quad (15.141)$$

Développons (15.141) en puissances de la vitesse à l'ordre v

$$n_{\pm}(v) \simeq \frac{\Gamma \omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \left[1 \pm \frac{2\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right] \quad (15.142)$$

Cette équation donne le nombre moyen $2n_0$ de cycles de fluorescence par seconde

$$n_0 = \frac{1}{2}(n_+(v) + n_-(v)) = \frac{\Gamma \omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} = \frac{\Gamma}{2} s \quad (15.143)$$

et la force, proportionnelle à

$$n_+(v) - n_-(v) = n_0 \frac{4\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4}$$

qui vaut

$$\langle \vec{F} \rangle = \hbar \vec{k} (n_+(v) - n_-(v)) = n_0 v \frac{4\hbar \delta k^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \hat{k} \quad (15.144)$$

Le coefficient de viscosité γ est défini par

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v \quad (15.145)$$

et sa valeur se déduit de (15.144)

$$\boxed{\gamma = -\frac{\langle F \rangle}{Mv} = -n_0 \frac{4\hbar k^2}{M} \frac{\delta}{\delta^2 + \Gamma^2/4}} \quad (15.146)$$

qui est un nombre positif car $\delta < 0$. Si l'on prend n_0 constant, le coefficient de viscosité est maximal pour $\delta = -\Gamma/2$

$$\gamma_{\max} = \frac{4\hbar k^2}{M\Gamma} n_0 = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma} E_R \quad (15.147)$$

L'énergie $E_R = Mv_R^2/2$ est appelée *énergie de recul* : c'est l'énergie cinétique de recul lorsque l'atome initialement au repos émet un photon d'impulsion

$\hbar k$, et c'est aussi l'énergie acquise par un atome initialement au repos qui absorbe un photon d'impulsion $\hbar k$. La vitesse v_R est la vitesse de recul. Donnons quelques valeurs numériques pour le rubidium. La longueur d'onde de la transition est $\lambda = 0.78 \mu\text{m}$, la largeur de raie $\Gamma = 3.7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, la masse de l'atome $M = 1.41 \times 10^{-25} \text{ kg}$. Ces valeurs correspondent à une énergie $\hbar\Gamma = 2.4 \times 10^{-8} \text{ eV}$, une vitesse de recul $v_R = \hbar k/m = 5.8 \times 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$ et une énergie de recul $E_R = 1.5 \times 10^{-11} \text{ eV}$, et donc à une *température de recul* $T_R = E_R/k_B = 1.7 \times 10^{-7} \text{ K}$.

Avec ces valeurs numériques typiques, on trouve

$$\gamma \simeq 5 \times 10^{-3} n_0 = 2.5 \times 10^{-3} \Gamma s$$

On peut choisir le paramètre de saturation $s \ll 1$ de telle sorte que

$$\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1} \ll \gamma^{-1}$$

Dans ces conditions, il existe trois échelles de temps bien distinctes dans le problème (figure 15.7). La relation $\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1}$ montre que les cycles de fluorescence ne se recouvrent pas et sont indépendants. Considérons un intervalle de temps δt , avec $\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$. Soit N_{\pm} le nombre de cycles de fluorescence $\pm k$ dans cet intervalle δt . La condition $\delta t \ll \gamma^{-1}$ implique que la vitesse v de l'atome n'a pas le temps de varier de façon appréciable sous l'action de la force de viscosité pendant l'intervalle δt et on pourra faire des moyennes sur cet intervalle, avec $\langle N_{\pm} \rangle = n_{\pm}(v)\delta t$. Soit $\mathbf{p}(N_+, N_-; \delta t)$ la probabilité d'observer N_+ cycles $+k$ et N_- cycles $-k$ pendant δt . L'indépendance des cycles de fluorescence permet d'écrire pour cette probabilité une loi de Poisson

$$\mathbf{p}(N_+, N_-; \delta t) = \frac{\langle N_+ \rangle^{N_+} \langle N_- \rangle^{N_-} \exp[-(\langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle)]}{N_+! N_-!}$$

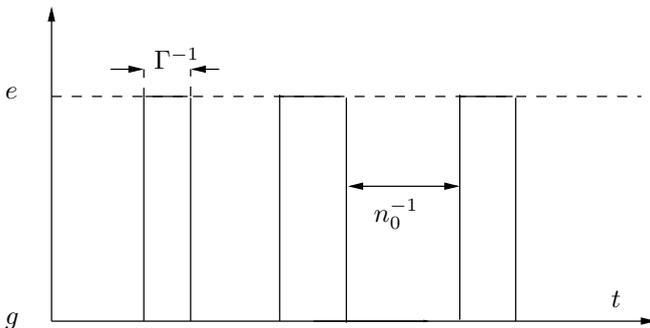


FIG. 15.7 – Séquence de cycles de fluorescence.

Désignons par $\hbar q_1, \dots, \hbar q_{(N_+ + N_-)}$ les $N_+ + N_-$ impulsions des photons émis spontanément par l'atome dans l'intervalle δt et $\hbar Y$ leur somme

$$\hbar Y = \hbar q_1 + \dots + \hbar q_{(N_+ + N_-)}$$

Les photons émis ne sont pas corrélés entre eux et $\langle Y \rangle = 0$. La variation moyenne d'impulsion pendant le temps δt est due uniquement aux photons absorbés

$$\langle p(\delta t) \rangle = (n_+(v) - n_-(v)) \hbar k \delta t \quad (15.148)$$

Évaluons maintenant la variance de $p(\delta t)$

$$\Delta p^2(\delta t) = \langle p^2(\delta t) - \langle p(\delta t) \rangle^2 \rangle$$

Comme les photons spontanés ne sont pas corrélés avec les photons absorbés, $\langle Yk \rangle = 0$ et on peut traiter séparément les deux contributions. La contribution à la variance des photons absorbés est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\text{abs}} = \hbar^2 k^2 \langle (N_+ - N_-)^2 - (\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle)^2 \rangle = 2\hbar^2 k^2 n_0 \delta t$$

où nous avons utilisé la propriété classique de la loi de Poisson : $\Delta N_{\pm}^2 = \langle N_{\pm} \rangle$ ainsi que l'indépendance des cycles + et - : $\langle N_+ N_- \rangle = \langle N_+ \rangle \langle N_- \rangle$, tandis que la contribution des photons émis est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\text{em}} = \hbar^2 \langle Y^2 \rangle = \hbar^2 \sum_{i=1}^{N_+ + N_-} q_i^2 = \hbar^2 k^2 \langle N \rangle = 2n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Comme nous avons réduit la cinématique à une dimension, nous avons admis que les photons émis ont une impulsion $\pm \hbar k$ avec une probabilité $1/2$ ²⁸. En additionnant les deux contributions²⁹

$$\Delta p^2(\delta t) = 4n_0 \hbar^2 k^2 \delta t \quad (15.149)$$

Ainsi que nous allons le montrer, ce résultat correspond à une marche au hasard dans un espace des impulsions à une dimension. Dans une marche au hasard sur une droite, un marcheur effectue un pas de longueur l à droite ou un pas de longueur l à gauche avec une probabilité $1/2$. Au bout de N pas, il a parcouru une distance moyenne nulle, $\langle x \rangle = 0$, mais la distance quadratique moyenne n'est pas nulle

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 = Nl^2$$

et si chaque pas prend un temps τ , au bout d'un temps $\delta t = N\tau$

$$\Delta x^2 = \frac{l^2}{\tau} \delta t = 2D \delta t \quad (15.150)$$

28. Dans le cas d'une cinématique à trois dimensions et de photons émis de façon isotrope, nous aurions $\langle \hbar^2 Y^2 \rangle = \hbar^2 k^2 / 3$.

29. Avec une cinématique à trois dimensions

$$\Delta p^2(\delta t) = \frac{8}{3} n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Cette équation définit le *coefficient de diffusion*³⁰ D . La proportionnalité de Δp^2 à δt dans (15.149) justifie l'expression « marche au hasard dans l'espace des impulsions », avec un coefficient de diffusion $D = 2n_0\hbar^2k^2$.

Dans cette marche au hasard, l'énergie cinétique E de l'atome augmente de $\Delta p^2(\delta t)/(2M)$. La diffusion tend donc à augmenter l'énergie cinétique. Par analogie avec la mécanique statistique, on définit une température fictive T par

$$E = \frac{1}{2}k_{\text{B}}T \quad (15.151)$$

où k_{B} est la constante de Boltzmann. Si E augmente, T augmente, et on peut dire que les atomes s'échauffent sous l'effet de l'émission spontanée, qui crée un mouvement désordonné analogue à une agitation thermique. Cependant la température est bien fictive, car il n'existe pas d'équilibre thermodynamique : la température (15.151) est parfaitement définie pour un atome isolé ! La viscosité a tendance à ralentir les atomes, et donc à les « refroidir ». Lorsque les deux effets s'équilibrent, on obtient une « température d'équilibre » qui est la température fictive des atomes en régime permanent. Cette température est en fait une façon imagée de mesurer leur vitesse moyenne. D'après (15.145), la viscosité donne la contribution suivant à la variation temporelle de l'énergie

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{\text{visc}} = \frac{1}{2} M \frac{d}{dt} v^2 = -M\gamma v^2 = -\frac{\gamma p^2}{M} \quad (15.152)$$

et en ajoutant l'effet de l'émission spontanée

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2n_0\hbar^2k^2}{M} - \frac{\gamma p^2}{M}$$

La condition de régime permanent $dE/dt = 0$ donne la valeur d'équilibre p_{eq}^2 de p^2 , et choisissant $\gamma = \gamma_{\text{max}}$ suivant (15.147)

$$p_{\text{eq}}^2 = \frac{2n_0\hbar^2k^2}{\gamma_{\text{max}}} = \frac{1}{2}\hbar\Gamma M$$

ce qui donne pour la température $T = T_D$

$$\boxed{k_{\text{B}}T_D = \frac{p_{\text{eq}}^2}{M} = \frac{1}{2}\hbar\Gamma} \quad (15.153)$$

Cette température, de l'ordre de $100\ \mu\text{K}$ pour le rubidium, est appelé *température Doppler*. La condition d'équilibre $dE/dt = 0$ peut aussi s'écrire en fonction du coefficient de diffusion en impulsion

$$D = \gamma p_{\text{eq}}^2 = M\gamma k_{\text{B}}T \quad (15.154)$$

30. Voir la note 1 du chapitre 13.

Cette équation qui relie les coefficients de diffusion D et de viscosité γ à la température est très générale³¹ et est connue sous le nom de *relation d'Einstein*. Dans le cas du mouvement brownien, les forces de viscosité et la diffusion ont une origine commune : les collisions de la particule brownienne avec les molécules du fluide, et il n'est pas surprenant que coefficients de diffusion et de viscosité ne soient pas indépendants. Diffusion et viscosité sont deux processus dissipatifs : dans notre cas le processus dissipatif est l'émission spontanée.

15.5.4 Piège magnéto-optique

Le refroidissement Doppler est le refroidissement maximum que l'on peut obtenir si on se limite au modèle de l'atome à deux niveaux. Pour aller plus loin, et en particulier pour mettre au point des mécanismes de refroidissement encore plus efficaces, permettant de descendre au microkelvin et même au-delà, il faut faire appel à la sous-structure, fine et hyperfine, des niveaux. Nous allons considérer un exemple élémentaire, en prenant un niveau fondamental (g) $j = 0$ et un niveau excité (e) $j = 1$ que nous allons scinder en trois sous-niveaux grâce à l'effet Zeeman. Ceci nous permettra de piéger les atomes non seulement en vitesse, comme dans le refroidissement Doppler, mais aussi dans l'espace. Comme on doit utiliser un champ magnétique pour obtenir l'effet Zeeman, on appelle un tel piège *piège magnéto-optique*. On utilise un champ magnétique inhomogène orienté suivant Oz et dépendant de z , $B(z) = -bz$, $b > 0$. D'après (15.26), les niveaux Zeeman de l'état excité (e) de nombre quantique magnétique m_e sont donnés par³²

$$W_{m_e} = -\mu B m_e = -g \frac{q_e \hbar B}{2m} m_e \quad \text{avec} \quad \mu = g \frac{q_e \hbar}{2m} < 0$$

Les niveaux Zeeman de l'état excité ont donc des énergies $-\mu bz$ ($m_e = -1$), 0 ($m_e = 0$) et $+\mu bz$ ($m_e = 1$), en prenant Oz comme axe de quantification du moment angulaire.

Reprenons la configuration des faisceaux lasers du refroidissement Doppler étudié précédemment, mais en supposant maintenant ces faisceaux polarisés circulairement à gauche : la conservation du moment angulaire suivant Oz (cf. (10.106)-(10.107)) implique que $m_e = -1$ si l'atome absorbe un photon de vecteur d'onde $+\vec{k}$ et $m_e = +1$ s'il absorbe un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$: figure 15.7. Supposons $\delta < 0$; pour $z > 0$, le signe de B implique que le niveau $m_e = +1$ est plus bas que le niveau $m_e = -1$, et ce niveau est donc plus proche de la résonance (figure 15.8). Ceci entraîne que l'atome va absorber de façon préférentielle les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$ et il sera repoussé vers la gauche. L'inverse se produit si l'atome se trouve dans la zone $z < 0$ où le niveau $m_e = -1$ est plus bas que le niveau $m_e = +1$: l'atome absorbe

31. Voir par exemple Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 6.

32. Afin d'éviter toute confusion avec la masse de l'électron, nous notons le nombre quantique magnétique m_e .

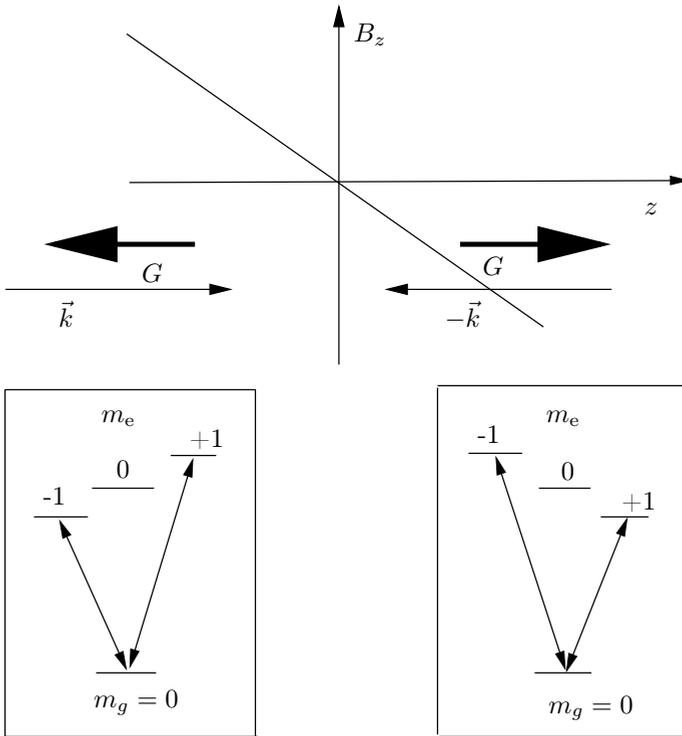


FIG. 15.8 – Niveaux Zeeman pour $z < 0$ et $z > 0$.

préférentiellement des photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, et il est repoussé vers la droite. L'action des deux faisceaux se traduit par l'existence de deux forces : une force de viscosité $-\gamma Mv$ et une force de rappel $-\kappa z$

$$F = -\gamma Mv - \kappa z \tag{15.155}$$

auxquelles s'ajoute une diffusion dans l'espace des impulsions. Non seulement les atomes sont ralentis, mais ils sont aussi confinés par la force de rappel dans la région $z \simeq 0$: c'est le principe du piège magnéto-optique. En pratique on souhaite confiner les atomes dans les trois directions d'espace, et il faut donc utiliser six faisceaux lasers polarisés (figure 15.9).

15.6 Exercices

15.6.1 Perturbation au second ordre et forces de van der Waals

Les forces de van der Waals entre deux atomes neutres sont dues à des interactions entre moments dipolaires induits. On se propose de les évaluer dans le cas de deux atomes

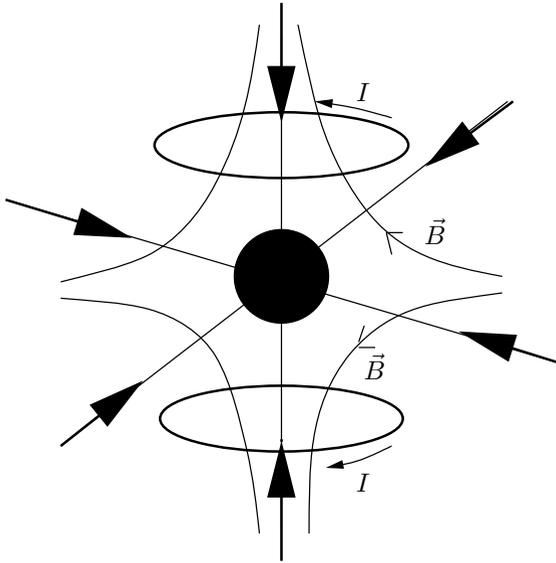


FIG. 15.9 – Configuration des lasers pour le piège magnéto-optique.

d'hydrogène se trouvant dans leur état fondamental $|\varphi_0\rangle$. Pour ce faire, nous aurons besoin de la théorie des perturbations au second ordre.

1. Perturbations au second ordre. On détermine d'abord $|\varphi_1\rangle$ en supposant $|\varphi_0\rangle$ non dégénéré; les notations sont celles du § 14.1.2. Montrer que

$$(E_0 - H_0)|\varphi_1\rangle = (W - E_1)|\varphi_0\rangle$$

En poussant les développements (15.3) et (15.4) au second ordre en λ , montrer que

$$E_2 = \langle \varphi_0 | W | \varphi_1 \rangle$$

On rappelle que $|\varphi_0\rangle \equiv |n\rangle$ et que

$$H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle \quad H_0|k\rangle = E_0^{(k)}|k\rangle$$

Montrer l'identité

$$I = |n\rangle\langle n| + (E_0 - H_0)^{-1} \left(\sum_{k \neq n} |k\rangle\langle k| \right) (E_0 - H_0)$$

et en déduire (15.7)

$$E_2 = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n | W | k \rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}}$$

2. Les protons des deux atomes d'hydrogène se trouvent à une distance $R \gg a_0$, a_0 étant le rayon de Bohr (1.41); \vec{R} est le vecteur joignant le proton 1 au proton 2 et l'axe Oz est

orienté suivant \vec{R} . On note \vec{r}_1 le vecteur joignant l'électron 1 au proton 1, \vec{r}_2 le vecteur joignant l'électron 2 au proton 2 et $\vec{d}_i = q_e \vec{r}_i$ le moment dipolaire électrique de l'atome i . Montrer qu'en physique classique l'énergie d'interaction des deux dipôles est

$$\begin{aligned} W &= \frac{e^2}{R^3} \left[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 - 3(\vec{r}_1 \cdot \hat{R})(\vec{r}_2 \cdot \hat{R}) \right] \\ &= \frac{e^2}{R^3} [x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2] \end{aligned}$$

3. Pour obtenir l'expression quantique de W , on utilise le principe de correspondance en remplaçant les nombres x_1, \dots, z_2 par des opérateurs X_1, \dots, Z_2

$$W = \frac{e^2}{R^3} [X_1 X_2 + Y_1 Y_2 - 2Z_1 Z_2]$$

Montrer que la valeur moyenne de W est nulle au premier ordre de la théorie des perturbations

$$E_1 = \langle \varphi_{01} \varphi_{02} | W | \varphi_{01} \varphi_{02} \rangle = 0$$

4. Au second ordre, si $|\varphi_\alpha\rangle$ désigne un état excité ou un état du continu d'énergie E_α

$$E_2 = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{|\langle \varphi_{\alpha_1} \varphi_{\alpha_2} | W | \varphi_{01} \varphi_{02} \rangle|^2}{-2R_\infty - E_{\alpha_1} - E_{\alpha_2}}$$

où R_∞ est la constante de Rydberg (1.42). Pour obtenir un ordre de grandeur de E_2 , on néglige E_{α_1} et E_{α_2} au dénominateur. En déduire

$$E_2 \sim -6 \frac{e^2}{R} \left(\frac{a_0}{R} \right)^5$$

L'énergie d'interaction varie comme R^{-5} et la force comme R^{-6} . Montrer que l'estimation précédente n'est plus valable si $R \gtrsim \hbar c / R_\infty$. Pour des distances $R \gg \hbar c / R_\infty$, on montre que la loi de forces est en R^{-7} .

15.6.2 Corrections d'ordre α^2 aux niveaux d'énergie

Suggestion. Dans ce problème comme dans le suivant, il est recommandé pour les applications numériques d'écrire les énergies sous la forme d'un facteur sans dimension multipliant $R_\infty = 13.61 \text{ eV}$.

En plus de la structure fine, il existe deux autres corrections $O(v/c)^2$ aux niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène (ou plus généralement des atomes à un seul électron).

1. *Correction cinématique.* La forme relativiste de l'énergie cinétique de l'électron est

$$K = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 + \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_e^3 c^2} + O\left(\frac{p^6}{m_e^5 c^4}\right)$$

Vérifier ce développement en puissances de p/mc valable si $p/(mc) \ll 1$. Le premier terme est l'énergie de masse, une simple constante additive, le second est la forme non relativiste de l'énergie cinétique prise en compte dans la résolution de l'équation de Schrödinger ; l'objectif est d'évaluer les corrections dues au troisième terme $O(p^4)$. Montrer que ce terme donne une correction $\Delta E_K \propto \alpha^2 (v/c)^2 = O(\alpha^4)$ aux niveaux d'énergie. Afin d'évaluer cette correction de façon précise, on utilise la théorie des perturbations. Montrer qu'au premier ordre de cette théorie

$$\Delta E_K = -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \int d^3 p p^4 |\tilde{\varphi}(\vec{p})|^2$$

où $\tilde{\varphi}(\vec{p})$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$

$$\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \varphi(\vec{r})$$

Calculer ΔE_K pour le niveau 1s de l'atome d'hydrogène. Les intégrales nécessaires se déduisent de

$$I(x) = \int_0^\infty \frac{dq}{q^2 + x} = \frac{\pi}{2} x^{-1/2}$$

par dérivation par rapport à x ($x > 0$).

2. Terme de Darwin. La seconde correction vient de ce qu'à l'approximation non relativiste de l'équation de Dirac, la localisation de l'électron ne peut se faire au mieux qu'à $\hbar/(m_e c)$ près, où $\hbar/(m_e c)$ est la longueur d'onde Compton de l'électron. Pour tenir compte de cette extension spatiale, on écrit l'énergie potentielle

$$E_{\text{pot}} = \int d^3u f(|\vec{u}|) V(\vec{r} + \vec{u})$$

où V est l'énergie potentielle habituelle et $f(u)$, à symétrie sphérique, possède une extension $\sim \hbar/(m_e c)$ et est normalisée par

$$\int d^3u f(u) = 1$$

En développant $V(\vec{r} + \vec{u})$ au voisinage de $u = 0$, montrer que

$$E_{\text{pot}} = V(\vec{r}) + O\left[\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^2\right] \nabla^2 V + O\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^4$$

L'équation de Dirac donne le coefficient exact

$$E_{\text{pot}} = V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V + O\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^4$$

Le deuxième terme de E_{pot} est appelé *terme de Darwin*. Montrer que ce terme n'affecte que les ondes s et vaut

$$\Delta E_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\varphi(\vec{r} = 0)|^2$$

Évaluer numériquement ΔE_D pour le niveau 1s de l'hydrogène.

15.6.3 Atomes muoniques

Le muon (μ) est un lepton en tout point identique à l'électron, à l'exception de sa masse $m_\mu \simeq 105.7 \text{ MeV}/c^2 \simeq 206.8 m_e$ (cf. 1.1.3). Un atome peut capturer un muon négatif μ^- qui se met sur orbite autour du noyau atomique, exactement comme un électron, et forme un « atome muonique ».

1. Calculer en fonction du numéro atomique Z de l'atome, du rapport m_μ/m_e et de $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ le rayon de Bohr a_μ^Z du muon pour un atome de numéro atomique Z en écrivant

$$a_\mu^Z = \frac{1}{Z\alpha(A)} a_0$$

On tiendra compte de la masse réduite dans le calcul de $\alpha(A)$. Comparer a_μ^Z au rayon R du noyau pour l'aluminium ($Z = 13$, $A = 27$) et le plomb ($Z = 82$, $A = 208$). On rappelle que R est donné par $R \simeq 1.2 \times A^{1/3} \text{ fm}$, A étant le nombre de nucléons.

2. Soit $\Delta E_e^{Z=1} = \Delta E_e = E_{2p} - E_{1s}$ la différence d'énergie entre les niveaux $2p$ et $1s$ de l'atome d'hydrogène. Calculer la quantité correspondante ΔE_μ^Z pour un atome de numéro atomique Z en fonction de ΔE_e et de m_μ/m_e . Comparer aux valeurs expérimentales

$$\text{Aluminium : } \Delta E_\mu^{13} = 0.3443 \text{ MeV} \qquad \text{Plomb : } \Delta E_\mu^{82} = 5.96 \text{ MeV}$$

Quel est le type de photon émis dans ces transitions ?

3. Montrer que l'effet d'écran des électrons des couches internes est négligeable. Au contraire une correction importante vient de l'extension finie du noyau atomique. Montrer que le potentiel vu par le muon n'est pas $-Ze^2/r$ mais

$$V(r) = \frac{Ze^2}{2R} \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - 3 \right] \quad r < R$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad r > R$$

On se propose de calculer le déplacement des niveaux par la méthode des perturbations au premier ordre, en partant de la solution pour le potentiel coulombien exact. Quelle perturbation $W(r)$ doit-on utiliser ? Montrer qualitativement que l'effet d'extension finie du noyau est négligeable sauf pour les états s , et que dans ce cas le déplacement vaut pour Z petit et une orbite de nombre quantique principal n , de rayon grand par rapport à R

$$\Delta E_n = \frac{2\pi Ze^2}{5} R^2 |\varphi_n(\vec{r}=0)|^2$$

où $\varphi_n(\vec{r})$ est la fonction d'onde non perturbée. Montrer que pour l'état $1s$

$$\Delta E = \frac{4}{5} R_\infty \left(\frac{Z^2 m'_\mu}{m_e} \right) \left(\frac{R}{a_\mu^Z} \right)^2$$

où m'_μ est la masse réduite. Évaluer numériquement ce déplacement pour l'aluminium³³. La correction va-t-elle dans le bon sens ? Est-il raisonnable d'appliquer la méthode dans le cas du plomb ?

4. Montrer que le rapport des énergies caractéristiques de la structure fine aux énergies caractéristiques des niveaux est le même pour l'électron et le muon. Montrer en revanche que ce rapport est plus grand d'un facteur m_μ/m_e pour la structure hyperfine.

15.6.4 Atomes de Rydberg

Les résultats de l'exercice 10.7.9 permettent d'écrire les fonctions d'onde radiales $u_{nl}(r)$ de l'atome d'hydrogène sous la forme

$$u_{nl}(r) = \sum_{q=0}^{n-l-1} c_q \left(\frac{r}{a_0} \right)^{q+l+1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$$

33. En dehors de la correction d'extension finie du noyau, la correction la plus importante vient de la polarisation du vide due à la création de paires virtuelles électron-positron. La correction pour l'état $1s$ de l'aluminium est de -2.25 KeV. Le signe de cette correction est négatif : en effet, à courte distance, α est plus grand que $1/137$ et le muon qui voit une charge plus grande est plus lié que si α était constant. Ce comportement de α a été mentionné dans la note 37 du chapitre 1 : α croît avec l'énergie, et d'après l'inégalité de Heisenberg, courte distance implique grande impulsion, et donc grande énergie.

Pour écrire l'expression du coefficient c_q , il est commode de définir $k = n - l$

$$c_q = \left(-\frac{2}{n}\right)^q \frac{(k-1)!(2l+1)!}{q!(q+2l+1)!(k-q-1)!}$$

où c_0 est fixé par la condition de normalisation de la fonction d'onde. On s'intéressera à des valeurs de $n \gg 1$, typiquement $n \sim 50$.

1. Montrer que si l prend sa valeur maximale $l = l_{\max} = n - 1$, la fonction d'onde radiale présente un pic étroit au voisinage du point $r = a_0 n^2$. Quelle est la largeur Δr de ce pic ? Suggestion : étudier la fonction

$$f_n(x) = x^n e^{-x/n}$$

et montrer que pour $x \simeq x_0 = n^2$

$$f_n(x) \simeq f_n(x_0) \exp\left[-\frac{1}{2n^3}(x-x_0)^2\right]$$

Montrer qualitativement que si $l < n - 1$, la dispersion Δr est plus grande que pour $l = n - 1$.

2. On s'intéresse maintenant à la partie angulaire. D'après (10.53)

$$Y_l^m(\theta, \phi) = e^{im\phi} f_l^m(\theta)$$

En utilisant $L_+ Y_l^l = 0$ et l'expression (10.48) de L_+ , montrer que

$$Y_l^l(\theta, \phi) \propto e^{il\phi} \sin^l \theta$$

En déduire que si $l \gg 1$, $|Y_l^l(\theta, \phi)|^2$ est non nul uniquement au voisinage du plan xOy (c'est-à-dire pour $\theta = \pi/2$), et calculer la dispersion $\Delta\theta$. Que se passe-t-il si $|m| \neq l$?

3. Déduire des deux premières questions que pour $n \gg 1$ les états $l = n - 1$ et $|m| = l$ sont localisés dans un tore horizontal de rayon $n^2 a_0$ dont la section est un cercle de rayon $a_0 n^{3/2}$. Comparer avec les orbites (1.40) obtenues à partir des prescriptions de Bohr.

15.6.5 Terme diamagnétique

Lorsque nous avons établi la forme du hamiltonien (15.23) de l'effet Zeeman, nous avons négligé un terme $\propto \vec{A}^2$, dit *terme diamagnétique*. Pour justifier cette approximation, examinons le cas d'un champ magnétique uniforme et constant \vec{B} , une expression possible pour \vec{A} étant (cf. (11.159))

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$$

1. Montrer que l'on peut écrire le hamiltonien quantique d'un électron de charge q dans ce champ magnétique sous la forme

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_e} (\vec{P} - q\vec{A})^2 \\ &= \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8m_e} \left[\vec{R}^2 \vec{B}^2 - (\vec{R} \cdot \vec{B})^2 \right] \\ &= H_0 + H_Z + H_D \end{aligned}$$

où $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ est le moment angulaire orbital. On justifiera soigneusement les commutations d'opérateurs.

2. Identifier H_Z à la partie du hamiltonien Zeeman (15.23) d'origine orbitale, et donner l'ordre de grandeur de ce terme pour un champ magnétique de 1 T lorsque l'électron est lié dans un atome. On peut écrire le terme diamagnétique H_D sous la forme

$$H_D = \frac{q^2 B^2}{8m_e} \vec{R}_\perp^2$$

où \vec{R}_\perp est la composante de \vec{R} perpendiculaire à \vec{B} . Quel ordre de grandeur peut-on choisir pour $\langle \vec{R}_\perp^2 \rangle$? En déduire que $|\langle H_D \rangle| \ll |\langle H_Z \rangle|$ pour un électron lié dans un atome, et que le terme diamagnétique peut être négligé dans le calcul de l'effet Zeeman. En revanche, ce terme ne peut pas être négligé dans le calcul des niveaux de Landau, car le rayon des orbites électroniques est alors macroscopique.

15.6.6 Cohérences et interférences

Nous allons analyser l'expérience des trous d'Young en supposant que les fentes sont suffisamment étroites pour que nous puissions négliger la largeur finie des pics de diffraction : chaque trou émet une onde sphérique. Soit a l'opérateur d'annihilation correspondant au mode incident. Les trous d'Young se comportent comme une lame séparatrice et on peut écrire (cf. § 11.4.2)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + a_2)$$

où a_i est l'opérateur d'annihilation correspondant au mode radial du champ émis par le trou i . Nous avons pour le champ au point \vec{r}

$$E^{(+)}(\vec{r}, t) = f(r) \left[a_1 e^{iks_1} + a_2 e^{iks_2} \right] e^{-i\omega t} \quad s_i = \frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{c}$$

Comme dans le cas de la lame semi-transparente, la cohérence du formalisme impose d'introduire un mode b

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 - a_2)$$

bien que ce mode reste constamment dans l'état du vide.

1. On suppose que le mode a contient un seul photon : l'état initial est donc $|1_a 0_b\rangle$. Montrer que

$$|1_a 0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle)$$

où $|10\rangle$ correspond à 1 photon (resp. 0 photon) dans le mode a_1 (resp. a_2) et $|01\rangle$ à 1 photon (resp. 0 photon) dans le mode a_2 (resp. a_1). Montrer que l'intensité est

$$I \propto \frac{1}{2} \langle 10 | a_1^\dagger a_1 | 10 \rangle + \frac{1}{2} \langle 01 | a_2^\dagger a_2 | 01 \rangle + \langle 10 | a_1^\dagger a_2 | 01 \rangle \cos \Phi$$

avec $\Phi = k(s_1 - s_2) + \text{cste.}$

2. Généraliser ce résultat à un état initial à n photons $|n_a 0_b\rangle$ et à un état cohérent $|z_a 0_b\rangle$.

3. Supposons que les modes a_1 et a_2 sont indépendants et sont engendrés par deux lasers différents. Peut-on observer des interférences ?

15.6.7 Forces réactives

1. On reprend le hamiltonien de Jaynes-Cummings du § 11.4.3 pour un atome à deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ plongé dans le champ électrique quantifié d'une cavité

$$E = \mathcal{E}(a + a^\dagger) \sin kz \quad \mathcal{E} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0\mathcal{V}}}$$

La fréquence Ω_1 définie par

$$\Omega_1(z) = 2 \frac{d\mathcal{E}}{\hbar} \sin kz$$

est une fonction de z . Si l'on se restreint au sous-espace $\mathcal{H}^{(n)}$ sous-tendu par les vecteurs $|\varphi_n^g\rangle$ et $|\varphi_n^e\rangle$ (11.143), les vecteurs propres sont donnés par (11.143)

$$\begin{aligned} |\chi_{1n}(z)\rangle &= -\sin\theta_n(z)|g \otimes (n+1)\rangle + \cos\theta_n(z)|e \otimes n\rangle \\ |\chi_{2n}(z)\rangle &= \cos\theta_n(z)|g \otimes (n+1)\rangle + \sin\theta_n(z)|e \otimes n\rangle \end{aligned}$$

Calculer la force sur un atome au repos en z lorsque cet atome est dans l'état $|\chi_{1n}\rangle$ ou dans l'état $|\chi_{2n}\rangle$.

2. On supposera par la suite que le champ dans la cavité est celui d'un laser dans un état cohérent, avec un nombre moyen de photons $\langle n \rangle \gg 1$, de telle sorte que $\Delta n \ll \langle n \rangle$. On peut alors écrire une expression classique de ce champ

$$E_L(t, z) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t \sin kz$$

En utilisant (11.106), montrer que

$$\hbar\Omega_1(z)\sqrt{\langle n \rangle} = \hbar\omega_1(z) \quad \omega_1(z) = \frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar} \sin kz$$

où $\omega_1(z)$ est la fréquence de Rabi usuelle (*cf.* par exemple (15.115)). Dans la discussion précédente, on n'a pas pris en compte l'émission spontanée, qui a pour effet de dépeupler le mode laser au profit du mode du vide. Les taux de transition entre les états à $n+1$ et à n photons sont donnés par

$$\Gamma_{ij}(z) = \Gamma |\langle \chi_{i,n}(z) | b + b^\dagger | \chi_{j,n+1}(z) \rangle|^2$$

avec $(i, j) = 1, 2$. Calculer $\Gamma_{ij}(z)$ en fonction des angles $\theta_{n+1}(z)$ et $\theta_n(z)$. On supposera dans toute la suite de l'exercice que le laser est intense, $n \gg 1$ et $\Omega_{1n} \simeq \Omega_{1\langle n \rangle}(z) = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}$.

3. On définit les populations $\mathbf{p}_i(z)$ de la manière suivante

$$\mathbf{p}_i(z) = \sum_n \langle \chi_{in}(z) | \rho | \chi_{in}(z) \rangle$$

où ρ est l'opérateur statistique de l'atome habillé par le champ. En déduire que si $\Omega_{1\langle n \rangle} \gg \Gamma$, les populations obéissent aux équations pilotes

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}}_1(z) &= -\Gamma_{21}(z)\mathbf{p}_1(z) + \Gamma_{12}(z)\mathbf{p}_2(z) \\ \dot{\mathbf{p}}_2(z) &= \Gamma_{21}(z)\mathbf{p}_1(z) - \Gamma_{12}(z)\mathbf{p}_2(z) \end{aligned}$$

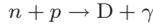
Quelles sont les valeurs stationnaires des populations \mathbf{p}_i^{st} en fonction de z ? Montrer qu'un atome au repos subit une force

$$F(z) = \frac{1}{4} \hbar \frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}} (\mathbf{p}_1^{\text{st}}(z) - \mathbf{p}_2^{\text{st}}(z))$$

Reporter dans ce résultat les valeurs de \mathbf{p}_1^{st} et \mathbf{p}_2^{st} et comparer à (15.139).

15.6.8 Capture radiative de neutrons par l'hydrogène

NB. Il est utile de relire les sections 13.2.3 et 13.2.4. Dans un réacteur nucléaire à eau bouillante ou à eau pressurisée, une fraction des neutrons est absorbée par l'hydrogène de l'eau suivant la réaction



n = neutron, p = proton, D = deutéron, γ = photon. Cette réaction, dite de capture radiative, a l'inconvénient de diminuer le nombre des neutrons disponibles pour la fission. Le deutéron est un état lié neutron-proton, de moment angulaire total $J = 1$ et dont l'énergie de liaison est $B = 2.23$ MeV. Le deutéron est un mélange d'états 3S_1 et 3D_1 , mais on tiendra compte pour simplifier uniquement de l'état 3S_1 . Le but du problème est de calculer la section efficace de capture radiative. Dans les applications numériques, il sera commode d'utiliser un système d'unités où $\hbar = c = 1$. Dans ce système, masse, impulsion et énergie ont les dimensions de l'inverse d'une longueur, et le facteur de conversion est

$$1 \text{ (fm)}^{-1} \simeq 200 \text{ MeV}$$

1. Les neutrons dans un réacteur sont de très basse énergie ($\ll 1$ MeV), et on peut alors représenter à une bonne approximation le potentiel n - p dans l'onde S par une fonction $\delta(\vec{r})$ [voir (13.44)]. La fonction d'onde de l'état lié est donnée par (13.45), avec $a \rightarrow a_t \simeq 5.40$ fm. Calculer la constante de normalisation C et κ^{-1} en fm. On notera que κ^{-1} fixe l'échelle de longueur du problème.

Les états de diffusion qui vont nous intéresser sont les états 1S_0 , où la longueur de diffusion est a_s , $a_s \simeq -23.7$ fm. Il est commode de fixer la normalisation en écrivant

$$\psi(r) = \frac{\sin[pr + \delta(p)]}{pr}$$

En déduire que pour $p \rightarrow 0$

$$\psi(r) \simeq -\frac{a}{r} \left(1 - \frac{r}{a}\right) \quad a = a_t \quad \text{ou} \quad a = a_s$$

2. Le neutron de la réaction de capture est très lent, et en raison de l'effet de barrière centrifuge, la réaction se fait dans une onde S , ce qui donne *a priori* deux possibilités

$$(n - p : {}^3S_1) \rightarrow D({}^3S_1) + \gamma \quad (n - p : {}^1S_0) \rightarrow D({}^3S_1) + \gamma$$

Les transitions dipolaires électriques sont négligeables car elles correspondraient à un état initial dans une onde P (pourquoi?). La réaction provient du couplage $\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ entre le moment magnétique du deutéron $\vec{\mu}$ et le champ magnétique quantifié \vec{B} , avec

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \frac{1}{2} \mu_N (\gamma_p \vec{\sigma}_p + \gamma_n \vec{\sigma}_n) \\ &= \frac{1}{4} \mu_N [(\gamma_p + \gamma_n)(\vec{\sigma}_p + \vec{\sigma}_n) + (\gamma_p - \gamma_n)(\vec{\sigma}_p - \vec{\sigma}_n)] \end{aligned} \quad (15.156)$$

où $\mu_N = q_p \hbar / (2M)$; $\gamma_p \simeq 5.59$ et $\gamma_n \simeq -3.83$ sont liés aux facteurs gyromagnétiques du proton et du neutron et $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli. Montrer que le couplage avec le champ électromagnétique quantifié responsable de la réaction est

$$W' = -\frac{i}{c} \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\varepsilon_0 V}} \vec{\mu} \cdot [\hat{k} \times \vec{e}_\lambda^*(\vec{k})] a_{\vec{k}\lambda}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

où le photon a un vecteur d'onde \vec{k} , une fréquence $\omega = ck$, $\hat{k} = \vec{k}/k$, \vec{e}_λ est un vecteur de polarisation unitaire que l'on pourra prendre réel et \mathcal{V} est le volume de normalisation. En négligeant le recul du deutéron et en remarquant que l'énergie des neutrons incidents $\varepsilon \ll B$, calculer k en fm^{-1} et en déduire que l'on peut faire l'approximation $\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \simeq 1$.

3. Justifier les différents facteurs dans l'expression ci-dessous de la section efficace, où Ω repère la direction d'émission \vec{k} du photon et \mathcal{F} est le flux de neutrons incidents

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar\mathcal{F}} |\langle f|W|i\rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_i - E_f)) \frac{\mathcal{V}\omega^2 d\omega}{(2\pi)^3 c^3}$$

avec

$$W = -\frac{i}{c} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \vec{\mu} \cdot \vec{e}'_\lambda(\vec{k}) \quad \vec{e}'_\lambda(\vec{k}) = \hat{k} \times \vec{e}_\lambda$$

$|i\rangle$ = état n - p initial, $|f\rangle$ = état du deutéron.

4. L'élément de matrice $\langle f|W|i\rangle$ se décompose en une partie de spin et une partie spatiale, car le vecteur d'état total $\Psi_{i,f}$ est le produit d'un vecteur d'état de spin $\chi_{i,f}$ par une fonction d'onde spatiale $\psi_{i,f}(\vec{r})$

$$\Psi_{i,f} = \psi_{i,f}(\vec{r}) \chi_{i,f}$$

(a) Si χ_t^m , $m = \pm 1, 0$ et χ_s désignent les états triplet et singulet de spin, la partie spin de $\langle f|W|i\rangle$ sera

$$W_{\text{spin}} = \frac{1}{4} \mu_N \langle \chi_f | (\gamma_p + \gamma_n) (\vec{\sigma}_p + \vec{\sigma}_n) \cdot \vec{e}'_\lambda + (\gamma_p - \gamma_n) (\vec{\sigma}_p - \vec{\sigma}_n) \cdot \vec{e}'_\lambda | \chi_i \rangle$$

où $\chi_f = \chi_t^m$ et $\chi_i = \chi_t^m$ ou χ_s . Montrer que

$$\langle \vec{\sigma}_p + \vec{\sigma}_n | \chi_s \rangle = 0 \quad \langle \chi_s | \vec{\sigma}_p | \chi_s \rangle = 0$$

(b) La partie spatiale fait intervenir l'intégrale

$$I_{fi} = \int d^3r \psi_f^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = \int d^3r \psi_D^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r})$$

Montrer sans calcul que $I_{fi} = 0$ si ψ_i et ψ_f sont des fonctions d'onde $L = 0$ de l'état triplet. Calculer explicitement I_{fi} si ψ_i est une fonction d'onde singulet en utilisant les approximations de la question 1.

5. Les résultats précédents peuvent être résumés comme suit

$$\begin{aligned} W_{\text{spin}} &= \frac{1}{4} \mu_N (\gamma_p - \gamma_n) \langle \chi_t^m | (\vec{\sigma}_p - \vec{\sigma}_n) \cdot \vec{e}'_\lambda | \chi_s \rangle \\ &\implies \frac{1}{2} \mu_N (\gamma_p - \gamma_n) \langle \chi_t^m | \vec{\sigma}_p \cdot \vec{e}'_\lambda | \chi_s \rangle = \frac{1}{2} \mu_N (\gamma_p - \gamma_n) W'_{\text{spin}} \end{aligned}$$

Il faut élever au carré, sommer sur les polarisations du photon final (\sum_λ), sur les spins finaux du deutéron (\sum_m) et prendre la moyenne sur les spins initiaux (facteur $1/4$). Montrer que

$$\begin{aligned} \langle |W'_{\text{spin}}|^2 \rangle &= \frac{1}{4} \sum_m \sum_\lambda |\langle \chi_t^m | \vec{\sigma}_p \cdot \vec{e}'_\lambda | \chi_s \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) \langle \chi_s | \sigma_{pi} \sigma_{pj} | \chi_s \rangle \end{aligned}$$

Suggestion : montrer que $\sum_m |\chi_i^m\rangle\langle\chi_i^m|$ peut être remplacé par l'opérateur identité dans l'espace des spins. En déduire $\langle|W'_{\text{spin}}|^2\rangle = 1/2$.

6. En rassemblant tous les facteurs, montrer que

$$\frac{1}{4} \sum_{\text{spins}} \sum_{\lambda} |\langle f|W|i\rangle|^2 = \frac{\hbar}{16\varepsilon_0\mathcal{V}} \frac{\omega}{c^2} \mu_N^2 (\gamma_p - \gamma_n)^2 I_{fi}^2$$

Compte tenu de la normalisation des fonctions d'onde spatiales, on peut montrer que le facteur de flux $\mathcal{F} = \sqrt{2\varepsilon/M}$. En déduire la section efficace totale de la réaction de capture ($\alpha = q_p^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$)

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha\pi\hbar^2}{2c^4} \frac{B^{3/2}}{\sqrt{2\varepsilon}} \frac{1}{M^3} (\gamma_p - \gamma_n)^2 (1 - \kappa a_s)^2$$

Comparer avec le résultat expérimental pour des neutrons thermiques à 300 K

$$\sigma_{\text{tot}} = 0.329 \pm 0.006 \times 10^{-28} \text{ m}^2 = 32.9 \pm 0.6 \text{ fm}^2$$

15.7 Bibliographie

La théorie des perturbations et la méthode variationnelle sont exposées dans tous les traités classiques. On pourra se reporter pour plus de détails sur la structure des niveaux d'énergie à Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], structure fine : chapitre XII, effet Zeeman : complément D_{VII} et structure hyperfine : chapitre XII. La décohérence par émission de photons est traitée par Cohen-Tannoudji [1989]. Pour le comptage de photons, on pourra se reporter à Ballentine [1998], chapitre 19, à Scully et Zubairy [1997], chapitre 4, à Gerry et Knight [2005], chapitre 5, ou à Mandel et Wolf, chapitres 9 et 14. Cohen-Tannoudji [1992] contient un exposé très complet de la manipulation d'atomes par laser ; voir également Suter [1997].

Chapitre 16

Atomes complexes et molécules

CE CHAPITRE EST CONSACRÉ aux atomes à plusieurs électrons et aux molécules. C'est un sujet qui peut devenir très complexe et où des règles empiriques doivent venir compléter la théorie. Aussi nous limiterons-nous à des situations relativement simples : atomes légers et molécules diatomiques. La section 16.1 traite des atomes à deux électrons, la section 16.2 développe le modèle en couches de l'atome et la section 16.3 examine les molécules diatomiques.

16.1 L'atome à deux électrons

16.1.1 L'état fondamental de l'atome d'hélium

L'atome d'hélium est un atome à deux électrons de charge $2q_e$, que nous écrivons sous la forme Zq_e , $Z = 2$, de sorte que notre exposé s'applique par exemple aussi à l'ion Li^+ avec $Z = 3$. En supposant le noyau infiniment lourd (une approximation meilleure que 0.1 %), dans une représentation où l'opérateur de position est diagonal, le hamiltonien H s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (16.1)$$

Le noyau est supposé fixé en O et les vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sont les positions des électrons 1 et 2. Ce hamiltonien se décompose suivant $H = H_0 + W$, où H_0 est le hamiltonien qui prend en compte l'interaction des électrons avec le noyau

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} \quad (16.2)$$

et W est un terme dont l'origine physique est la répulsion électrostatique entre les deux électrons que l'on peut essayer de traiter comme une perturbation

$$W = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (16.3)$$

Cherchons le niveau de plus basse énergie en négligeant W . Ce niveau est manifestement un niveau $1s^2$, où les deux électrons sont dans un état $1s$; l'exposant compte le nombre d'électrons dans un état donné. Cependant, les électrons sont des fermions, et ces deux électrons ne peuvent pas être dans un même état. Heureusement le spin sauve la mise, car les deux électrons peuvent être mis dans un état singulet de spin χ_s (10.126), qui est antisymétrique dans l'échange des deux électrons. Notre fonction d'onde espace+spin correctement antisymétrisée devient alors

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi = \varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2)\chi_s = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right) e^{-Zr_1/a_0} e^{-Zr_2/a_0}\chi_s \quad (16.4)$$

L'énergie de l'état fondamental de l'hélium correspondant à cette fonction d'onde est $E_0^{(0)} = -8R_\infty \simeq -108.8$ eV, à comparer avec le résultat expérimental $E^{\text{exp}} = -79.0$ eV. On observe que $E_0^{(0)}$ est inférieur à la valeur expérimentale d'environ 30 %. Cependant, nous avons négligé l'interaction répulsive $W > 0$ de H , et nous nous attendons à ce que ce terme fasse remonter notre résultat théorique. Faisant preuve d'optimisme, nous appliquons aveuglément la théorie des perturbations, bien qu'il n'y ait aucune bonne raison pour que W puisse être considéré comme « petit » comparativement aux autres termes d'énergie potentielle dans H_0 . Utilisant (15.6) nous calculons la correction du premier ordre à E_0 :

$$\Delta E = \langle \Psi | W | \Psi \rangle = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \int \frac{e^{-2Zr_1/a_0} e^{-2Zr_2/a_0}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (16.5)$$

Pour calculer cette intégrale à six dimensions, nous nous servons de la représentation suivante¹ de $1/r$:

$$\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

et nous trouvons

$$\Delta E = \frac{Z^6 e^2}{2\pi^4 a_0^6} \int \frac{dk}{k^2} \left[\int e^{-2Zr/a_0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3 r \right]^2 \quad (16.6)$$

L'intégrale entre crochets a déjà été rencontrée en (15.55)

$$\int e^{-2Zr/a_0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3 r = \frac{16\pi Z/a_0}{[k^2 + (2Z/a_0)^2]^2} \quad (16.7)$$

et reportant ce résultat dans (16.6) donne

$$\Delta E = \frac{4Ze^2}{\pi a_0} \int_0^\infty \frac{dx}{(1+x^2)^4} = \frac{4Ze^2}{\pi a_0} \times \frac{5\pi}{32} = \frac{5}{4} Z R_\infty \quad (16.8)$$

1. En effet, l'équation de Poisson $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\vec{r})$ montre que $1/r$ a pour transformée de Fourier $4\pi/k^2$. On peut aussi calculer la transformée de Fourier de $(k^2 + \alpha^2)^{-1}$ et prendre la limite $\alpha \rightarrow 0$.

où la dernière expression est spécifique à l'atome d'hélium. Comme on s'y attendait, ΔE est positif et

$$E_0^{(0)} + \Delta E \simeq -74.8 \text{ eV} \quad (16.9)$$

ce qui est beaucoup plus proche du résultat expérimental que ce que nous pouvions raisonnablement espérer.

La méthode variationnelle va nous donner un résultat encore plus précis. Comme fonction d'onde d'essai à un électron nous prenons

$$\varphi(\vec{r}) = \left(\frac{z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-zr/a_0} \quad (16.10)$$

où z est notre paramètre variationnel. Afin de calculer la valeur moyenne nous partons de

$$\int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \left(-\frac{1}{2m_e} \nabla^2 - \frac{ze^2}{r} \right) \varphi(\vec{r}) = -z^2 R_\infty \quad (16.11)$$

parce que (16.10) donne l'état fondamental solution de l'équation de Schrödinger pour un atome à un électron dans un potentiel de Coulomb $-ze^2/r$. Comme l'énergie potentielle est le double de l'énergie totale, nous avons aussi

$$\int d^3r \left(-\frac{ze^2}{r} \right) |\varphi(\vec{r})|^2 = -2ze^2 R_\infty \quad (16.12)$$

Les équations (16.11) et (16.12) nous permettent de calculer la valeur moyenne de H_0 :

$$\langle H_0 \rangle = -2(2zZ - z^2) R_\infty$$

La valeur moyenne de W vient juste d'être déterminée dans l'approche perturbative

$$\langle W \rangle = \frac{5}{4} z R_\infty .$$

Rassemblant toutes les contributions nous obtenons

$$E_0(z) = 2 \left(z^2 - 2Zz + \frac{5}{8} z \right) R_\infty \quad (16.13)$$

La valeur optimale de z se calcule à partir de $dE(z)/dz = 0$, ce qui conduit à $z = Z - 5/16$ et

$$E_0^{\text{var}} = -2 \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 R_\infty \quad (16.14)$$

Dans le cas de l'hélium, nous trouvons $E_0^{\text{var}} \simeq -77.5 \text{ eV}$, ce qui est plus proche du résultat expérimental que l'estimation perturbative. Nous vérifions aussi que $E_0^{\text{var}} > E_0^{\text{exp}}$, en conformité avec la méthode variationnelle. Pour un même volume de calculs, nous observons que la méthode variationnelle avec un bon choix de la fonction d'onde d'essai donne des résultats nettement plus précis que la théorie des perturbations.

16.1.2 États excités de l'atome d'hélium

Ainsi que nous venons de le voir, l'état fondamental de l'atome d'hélium possède un moment angulaire orbital nul et un spin total nul. Nous utiliserons par la suite la notation standard $^{2S+1}L_J$, où S est le spin total, L le moment angulaire orbital total, et J le moment angulaire total ; l'état fondamental de l'atome d'hélium est donc un état 1S_0 . Les niveaux d'énergie situés immédiatement au-dessus du fondamental sont les niveaux $1s^12s^1$: un électron dans l'état $1s$ et un autre dans l'état $2s$, et $1s^12p^1$: un électron dans l'état $1s$ et un autre dans l'état $2p$. Ces niveaux sont dégénérés si H_0 (16.2) est utilisé comme hamiltonien. Cependant, une meilleure stratégie consiste à prendre en compte, au moins de façon approchée, l'effet de la répulsion électrostatique W (16.3) en utilisant non pas le potentiel de Coulomb $-Ze^2/r$, mais un potentiel *effectif* à un électron $V_{\text{eff}}(r)$ qui peut être déterminé à partir d'arguments de type Hartree-Fock (*cf.* § 14.3.4). Par conséquent, au lieu de H_0 , nous utiliserons un hamiltonien H'_0 :

$$H'_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 + V_{\text{eff}}(r_1) + V_{\text{eff}}(r_2) \quad (16.15)$$

et au lieu de W une perturbation W' :

$$W' = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \left(-\frac{Ze^2}{r_1} - V_{\text{eff}}(r_1) \right) + \left(-\frac{Ze^2}{r_2} - V_{\text{eff}}(r_2) \right) \quad (16.16)$$

Avec H'_0 comme hamiltonien, les niveaux $2s$ et $2p$ ne sont plus dégénérés (voir la figure 10.7 ou la figure 16.2), et le niveau $2p$ se trouve au-dessus du niveau $2s$. Une remarque importante est que W' est invariant par rotation, et il commute donc avec le moment angulaire orbital *total* \vec{L} : $[\vec{L}, W'] = 0$, bien que, par exemple, $[\vec{L}_1, W'] \neq 0$. W' n'a pas d'éléments de matrice non nuls entre les niveaux $1s^12s^1$ et $1s^12p^1$ qui ont des moments angulaires orbitaux différents, $L = 0$ et $L = 1$ respectivement. Ainsi, et bien que ces niveaux ne soient pas très loin de la dégénérescence, nous pouvons utiliser la théorie des perturbations non dégénérée.

Commençons par le niveau $1s^12s^1$, qui est le premier niveau excité. Nous pouvons construire des fonctions d'onde symétriques et antisymétriques

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) \pm \varphi_{1s}(\vec{r}_2)\varphi_{2s}(\vec{r}_1)) \quad (16.17)$$

Les contributions au calcul perturbatif des termes à un électron de W' (16.16) sont indépendantes du caractère de symétrie de Ψ , mais la contribution de W dépend de ce caractère

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\pm} | W | \Psi_{\pm} \rangle &= e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\varphi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_{2s}(\vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &\pm e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \varphi_{1s}(\vec{r}_2)\varphi_{2s}(\vec{r}_1) = K \pm J \end{aligned} \quad (16.18)$$

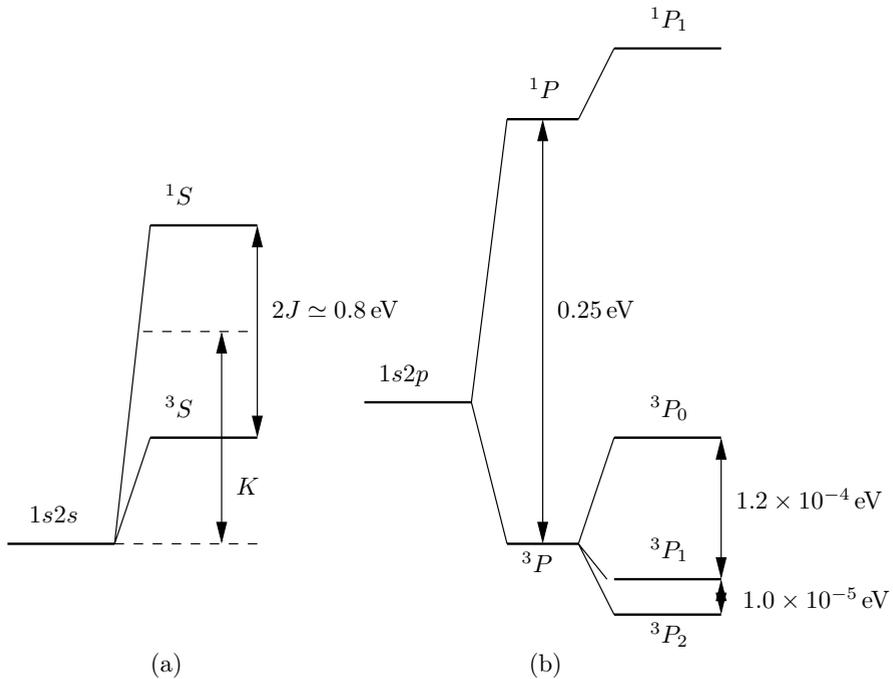


FIG. 16.1 – Les deux premiers niveaux excités de l'atome d'hélium. (a) Niveau $1s^1 2s^1$. (b) Niveau $1s^1 2p^1$. D'après Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément B_{XIV}.

L'intégrale K est manifestement positive, et on peut montrer que J , appelée *intégrale d'échange* (cf. § 14.3.4), est aussi positive, de sorte que l'énergie de la fonction d'onde antisymétrique est plus basse que celle de l'état symétrique. Ceci se comprend aisément : comme la fonction d'onde antisymétrique s'annule à $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, dans le calcul de la valeur moyenne de $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1}$, l'intégrand est maximal (et en fait infini) à $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, et la valeur moyenne est plus basse dans le cas antisymétrique que dans le cas symétrique. Ces considérations sont entièrement indépendantes du caractère fermionique des électrons, et seraient valables si les électrons de l'atome d'hélium étaient différents, un électron rouge et un électron vert. Ce que le principe de Pauli implique, c'est que la *symétrie de la fonction d'onde d'espace est liée à celle de la fonction d'onde de spin*, et par conséquent le niveau le plus bas est un niveau $3S_1$, et le niveau le plus élevé un niveau $1S_0$ (figure 16.1 (a)). Si un des électrons était rouge et l'autre vert, le spin total ne serait pas lié à la symétrie de la fonction d'onde d'espace.

Dans l'état $1s^1 2p^1$, le moment angulaire orbital total est $L = 1$ et les états possibles sont $1P_1$ dans l'état singulet de spin, et $3P_0$, $3P_1$, et $3P_2$ dans l'état triplet de spin. L'intégrale d'échange est à nouveau positive de sorte que les

états triplets sont situés au-dessous de l'état singulet. Le schéma des niveaux est donné dans la figure 16.1 (b).

16.2 Modèle en couches de l'atome

16.2.1 Potentiel effectif

Cette section est consacrée à la structure des atomes complexes. C'est un sujet qui combine une approche théorique (résolution de l'équation de Schrödinger) et une approche semi-empirique, car il n'est pas possible de résoudre de façon exacte l'équation de Schrödinger lorsque le nombre d'électrons $Z \gg 1$. Considérons donc un atome à Z électrons à l'approximation du noyau infiniment lourd, une approximation meilleure que 0.1 %. Le hamiltonien est facile à écrire

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \right) - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (16.19)$$

Le noyau est supposé fixe à l'origine des coordonnées et \vec{r}_i est la position de l'électron i . Le premier terme représente l'énergie cinétique, le second l'énergie potentielle d'interaction des électrons avec le noyau et le troisième la répulsion électrostatique entre les électrons. Comme dans le cas de l'atome d'hélium, on pourrait tenter de traiter ce terme en théorie des perturbations, mais une évaluation d'ordre de grandeur montre que cette approche est vouée à l'échec. En effet, en supposant $|\vec{r}_i| \sim |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \sim r$, r étant une distance moyenne entre les électrons et le noyau, on constate que le rapport de l'énergie moyenne du troisième terme de (16.19) au second est $\sim Z(Z-1)/2Z \simeq 1/2$ si $Z \gg 1$. Comme dans le cas de l'hélium, nous allons admettre qu'en première approximation chaque électron se déplace dans un potentiel moyen à symétrie sphérique $V_{\text{eff}}(r_i)$ créé par le noyau et les $(Z-1)$ autres électrons, ce potentiel étant déterminé par des considérations auto-cohérentes de type Hartree-Fock (§ 14.3.4). On réécrit le hamiltonien (16.19) comme

$$H = H_0 + W = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \right) + \sum_{i=1}^Z V_{\text{eff}}(r_i) + \left[-\sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^Z V_{\text{eff}}(r_i) \right] \quad (16.20)$$

l'idée étant que la deuxième ligne de (16.20) (le terme W) peut être traitée en perturbation. Sans faire de calculs, on peut estimer le comportement de $V_{\text{eff}}(r)$ pour $r \rightarrow 0$ et $r \rightarrow \infty$. En effet, pour $r \rightarrow 0$, en raison du théorème

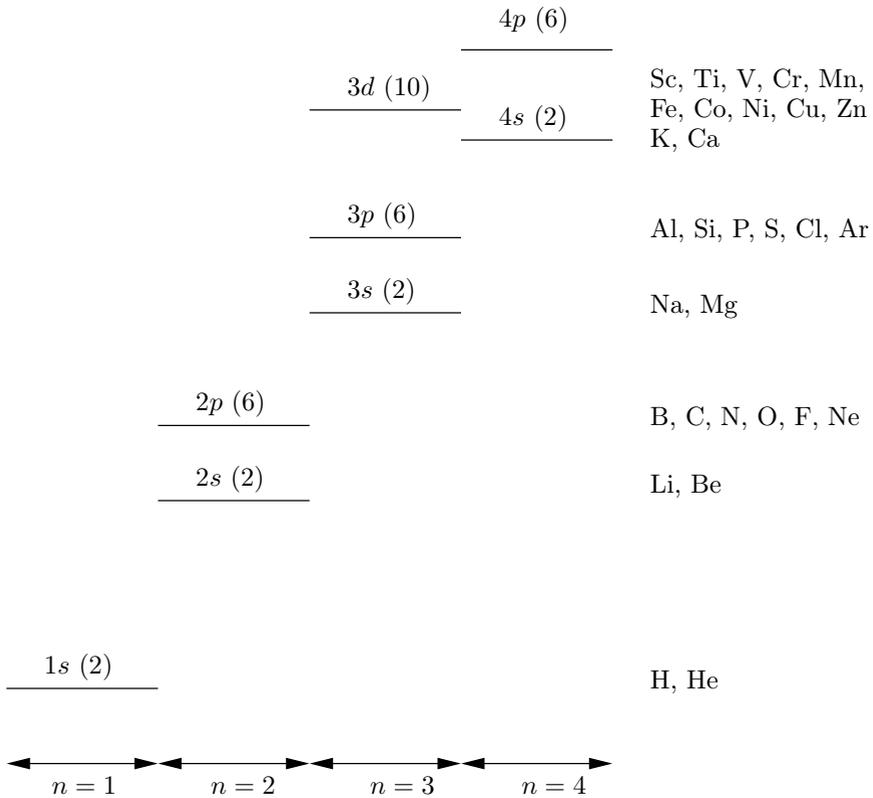


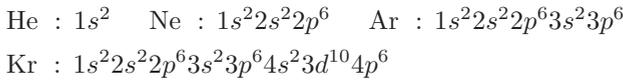
FIG. 16.2 – Les huit premiers niveaux du modèle en couches de l’atome. Les nombres entre parenthèses donnent le nombre maximum d’électrons dans le niveau.

de Gauss, la seule charge à prendre en compte est celle du noyau, tandis que pour $r \rightarrow \infty$, un électron ne voit plus qu’une charge $[Z - (Z - 1)]|q_e| = |q_e|$

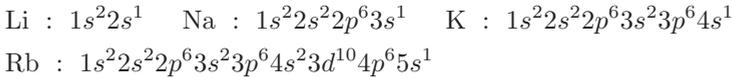
$$r \rightarrow 0 : V_{\text{eff}}(r) \simeq -\frac{Ze^2}{r} \quad r \rightarrow \infty : V_{\text{eff}}(r) \simeq -\frac{e^2}{r} \quad (16.21)$$

Nous allons négliger la seconde ligne de (16.20), en supposant que le potentiel V_{eff} tient compte suffisamment bien des interactions entre électrons : nous adoptons donc un modèle de Z électrons *indépendants* dans le potentiel V_{eff} . La connaissance approchée de $V_{\text{eff}}(r)$ permet de déterminer les niveaux d’énergie, dont les 8 premiers sont donnés dans la figure 16.2. En fait, en raison du caractère approché de $V_{\text{eff}}(r)$, la situation devient plus confuse au-delà de ces niveaux, et la théorie doit être complétée par des considérations empiriques. Chaque niveau de moment angulaire orbital l peut accueillir $2(2l+1)$ électrons. Comme dans le cas de l’hélium, on porte en exposant le nombre d’électrons dans le niveau : par exemple $3d^5$ représente une configuration comprenant

5 électrons dans un état de nombre quantique principal $n = 3$ et de moment angulaire orbital $l = 2$. La notation générale est donc nl^x , où x est le nombre d'électrons dans le niveau (n, l) . Lorsqu'un niveau d'énergie contient le nombre maximum $2(2l + 1)$ d'électrons, par exemple $3d^{10}$, on dit que l'on a affaire à une *couche complète*. Lorsqu'un atome est formé uniquement de couches complètes et que la différence d'énergie avec la couche immédiatement supérieure est importante, il devient difficile pour un électron de passer dans un niveau supérieur, et l'atome est peu actif chimiquement et difficile à ioniser : ce sera un *gaz rare*. Pour les atomes qui ne sont pas trop complexes, ceci se produit quand le nombre quantique principal augmente d'une unité. Les gaz rares sont l'hélium, le néon, l'argon, le krypton, et le xénon, et les configurations électroniques des premiers gaz rares sont



Les alcalins (lithium, sodium, potassium, rubidium) sont formés de couches complètes et d'un électron s supplémentaire, et leurs configurations électroniques sont



Les propriétés chimiques des alcalins sont contrôlées par cet électron externe, les électrons des couches internes ne jouant essentiellement aucun rôle. Les alcalins ont un faible potentiel d'ionisation et sont très actifs chimiquement, car ils perdent facilement leur électron externe. Les halogènes (fluor, chlore, brome, iode) sont également chimiquement très actifs car ils capturent facilement un électron pour compléter leur couche externe np^5 , à laquelle il manque juste un électron.

16.2.2 Couplage spin-orbite

En raison du principe de Pauli, le vecteur d'état des électrons dans une configuration électronique doit être complètement antisymétrique, et pour une couche complète cela implique $\vec{J} = \vec{L} = \vec{S} = 0$, où \vec{J} , \vec{L} et \vec{S} sont respectivement le moment angulaire total de la couche, son moment angulaire orbital total et son spin total². Les moments angulaires des atomes sont donc portés par les électrons de la couche externe, ou *électrons de valence*. Toutes les propriétés de l'atome : réactivité chimique, potentiel d'ionisation, etc. vont

2. En effet, si l'état d'un électron est caractérisé par les nombres quantiques magnétiques orbital m_l et de spin m_s , le couple (m_l, m_s) doit être différent pour chaque électron, ce qui implique que $m_L = \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_{li} = 0$ et $m_S = \sum_{i=1}^{2(2l+1)} m_{si} = 0$. Comme l'axe de quantification du moment angulaire est arbitraire, ce résultat vaut pour toute direction de quantification, et ceci implique que $L = S = 0$.

dépendre pour l'essentiel de ces électrons externes. Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, c'est la raison pour laquelle un alcalin est, en première approximation, un atome à un électron dans le potentiel créé par le noyau et les $(Z - 1)$ électrons des couches internes.

La structure fine due au couplage spin-orbite (15.20) va également jouer un rôle dans la description de l'atome. Soit un atome à N électrons externes, \vec{L} leur moment angulaire orbital total

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \cdots + \vec{L}_N$$

\vec{S} leur spin total

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \cdots + \vec{S}_N$$

et $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ leur moment angulaire total. L'invariance par rotation implique la conservation de \vec{J} , et un état de N électrons sera donc étiqueté $|JM\rangle$. En l'absence de couplage spin-orbite, le hamiltonien (16.20) ne dépend pas des variables de spin et les degrés de liberté orbitaux et de spin sont découplés : \vec{L} et \vec{S} sont séparément conservés. Lorsque l'on introduit le couplage spin-orbite, deux cas simples peuvent se présenter : soit l'effet du couplage spin-orbite est faible par rapport à celui de la « perturbation » W (deuxième ligne de (16.20)), $H_{\text{so}} \ll W$, et dans ce cas \vec{L} et \vec{S} sont approximativement conservés, soit $H_{\text{so}} \gg W$ et dans ce cas ce sont les moments angulaires individuels \vec{j} des électrons qui sont approximativement conservés. Le premier cas se présente pour les atomes qui ne sont pas trop lourds, et il est appelé *couplage de Russell-Saunders*, et le second cas est appelé couplage³ $j - j$, les cas intermédiaires étant évidemment possibles. Nous nous limitons dans la suite de la discussion aux atomes légers, et donc au couplage de Russell-Saunders. La *règle de Hund* (empirique) stipule que l'énergie la plus basse correspond (1) à la plus grande valeur de S et (2) à la plus grande valeur de L compatible avec celle de S et avec le principe de Pauli : si les états sont étiquetés $^{2S+1}L_J$ comme au § 16.1.2, l'état fondamental correspondra à $S = S_{\text{max}}$ et à $L = L_{\text{max}}$. Cette règle de Hund peut se comprendre comme résultant de la minimisation de l'énergie d'échange, mais il est difficile de lui donner une formulation quantitative.

Donnons comme exemple le cas du carbone, atome à 6 électrons, dont la configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^2$. Les couches complètes sont $1s^2$ et $2s^2$, et la configuration à étudier est donc $2p^2$. En l'absence du principe de Pauli, il y aurait $4 \times (2l + 1) = 36$ états possibles. Le principe de Pauli réduit ce nombre à $C_6^2 = 15$ états possibles. Les deux spins peuvent se combiner pour former les états de spin total $S = 0$ et $S = 1$, et les états de moment angulaire $l = 1$ peuvent se combiner pour former des états de moment angulaire orbital total $L = 0 (S)$, $L = 1 (P)$ et $L = 2 (D)$. Les états S et D sont symétriques d'espace, et l'état P est antisymétrique. Les combinaisons autorisées par le principe de Pauli sont, pour $S = 0$: 1S_0 et 1D_2 , et pour $S = 1$: 3P_0 , 3P_1 et

3. Ce couplage est dominant dans le modèle en couches du noyau atomique : exercice 16.4.4.

3P_2 . On retrouve bien $1 + 5 + 1 + 3 + 5 = 15$ états possibles, et d'après les deux premières règles de Hund, l'état fondamental est un état 3P . La troisième règle de Hund énonce que l'état fondamental pour une couche comprenant moins de $(2l + 1)$ électrons correspond à la valeur minimale de J , et à la valeur maximale quand le nombre d'électrons est supérieur à $(2l + 1)$. Cette troisième règle de Hund peut se déduire de la minimisation de l'énergie due au couplage spin-orbite. L'état fondamental du carbone est donc 3P_0 .

L'atome d'oxygène (8 électrons) correspond à une configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^4$: il manque deux électrons pour former une couche complète. L'absence d'un électron se comporte comme une particule de spin $1/2$ (un trou en physique du solide), et les valeurs possibles de S , L et J sont les mêmes que pour le carbone. Cependant, la troisième règle de Hund entraîne que l'état fondamental est cette fois 3P_2 .

16.3 Molécules diatomiques

16.3.1 Fonctions d'onde électroniques

La théorie des molécules est fondée sur *l'approximation de Born-Oppenheimer*, qui repose sur l'observation suivante : par conservation de l'impulsion pour une molécule isolée, les impulsions électroniques sont du même ordre de grandeur que les impulsions des noyaux atomiques, $p_{\text{el}} \sim p_{\text{noy}}$, et par conséquent le rapport des vitesses est l'inverse de celui des masses

$$v_{\text{el}} \sim \left(\frac{m_{\text{noy}}}{m_{\text{el}}} \right) v_{\text{noy}} \gg v_{\text{noy}}$$

Le mouvement des électrons est beaucoup plus rapide que celui des noyaux, et en première approximation nous pouvons supposer que les électrons se déplacent dans un potentiel créé par des noyaux que l'on peut considérer comme fixes. Selon la terminologie introduite dans la section 12.6, *les électrons suivent adiabatiquement le mouvement des noyaux*. Les corrections à cette approximation seront examinées dans la sous-section suivante. Le potentiel créé par les noyaux est fonction de leur disposition dans l'espace, et comme nous allons nous limiter aux molécules diatomiques, la configuration des noyaux sera entièrement déterminée par la distance r entre les deux noyaux : le potentiel créé par les noyaux dépend uniquement du paramètre r . On peut alors résoudre (en théorie!) l'équation de Schrödinger pour les électrons dans ce potentiel, et obtenir les niveaux d'énergie électroniques $U_0, U_1, \dots, U_n, \dots$ comme fonctions de r . Le phénomène de répulsion (ou de non-croisement) des niveaux (§ 5.3.3 et exercice 16.4.2) implique que les diverses courbes $U_0(r), U_1(r), \dots, U_n(r), \dots$ ne se croisent pas si les symétries des fonctions d'onde

électroniques des deux niveaux sont identiques⁴, et on peut tracer qualitativement les courbes représentatives (figure 16.3). $U_n(r)$ est l'énergie de la molécule dans son niveau électronique n lorsque les deux noyaux sont à distance r et que l'on néglige leur énergie cinétique. La courbe $U_0(r)$ présente un minimum à $r = r_0$, et cette valeur de r correspond à l'état fondamental de la molécule : $|U_0(r_0)|$ est l'énergie de dissociation de la molécule en atomes. Si la molécule passe de $U_0(r)$ à $U_1(r)$, elle passe dans un niveau électronique excité, la différence d'énergie étant de l'ordre de quelques eV. En plus des niveaux électroniques, une molécule diatomique (comme toute molécule) possède des niveaux de rotation et des niveaux de vibration. En effet, les noyaux peuvent vibrer autour de la position d'équilibre $r = r_0$ sur la droite joignant les deux noyaux, ou *droite des noyaux*, et ils peuvent aussi tourner autour d'un axe perpendiculaire à la droite des noyaux avec un moment d'inertie $I = Mr_0^2$, où M est la masse réduite. Comme la différence entre deux niveaux électroniques (~ 1 eV) est grande par rapport aux niveaux de vibration ($\sim 10^{-1}$ eV) et de rotation ($\sim 10^{-3}$ eV), on peut négliger en première approximation le couplage entre niveaux de rotation-vibration et niveaux électroniques.

Examinons maintenant les symétries de la molécule. Contrairement au cas des atomes, nous n'avons plus pour les électrons une symétrie sphérique, mais uniquement une symétrie axiale, celle des rotations autour de la droite des noyaux prise comme axe Oz . Si nous négligeons la structure fine, \vec{L} et \vec{S} sont découplés, et \vec{S} , qui est indépendant du mouvement orbital, est conservé. Le seul effet du spin est de conduire à une dégénérescence $2S + 1$ de chaque niveau. En revanche, en ce qui concerne le moment angulaire orbital, seul L_z est conservé : nous appellerons Λ la valeur propre de L_z

$$\Lambda = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$$

La réflexion par rapport à un plan passant par la droite des noyaux est aussi une symétrie de la molécule, qui permet de relier $-\Lambda$ et Λ : en effet, dans cette symétrie, $\vec{L} \rightarrow -\vec{L}$, $\Lambda \rightarrow -\Lambda$, et les états $-\Lambda$ et Λ sont dégénérés⁵, sauf évidemment si $\Lambda = 0$. La première caractéristique de la molécule est la valeur de $|\Lambda|$, et on notera Σ un état $\Lambda = 0$, Π un état $|\Lambda| = 1$, Δ un état $|\Lambda| = 2$, etc.⁶. Nous aurons donc le tableau

$$\begin{array}{cccccc} |\Lambda| & 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ \text{État} & \Sigma & \Pi & \Delta & \Phi & \dots \end{array}$$

4. En anticipant sur les définitions qui vont suivre, des termes de $|\Lambda|$ différents ou des termes Σ^+ et Σ^- ont des symétries différentes. Dans ce cas les éléments de matrice non diagonaux du hamiltonien dans l'exercice 16.4.2 sont nuls.

5. Toutefois l'interaction avec le noyau lève la dégénérescence, mais l'effet est en $(m_{\text{el}}/m_{\text{noy}})^{2|\Lambda|}$.

6. En suivant la notation de spectroscopie atomique, on remplace donc les lettres latines minuscules s, p, d, f, \dots par les lettres grecques majuscules correspondantes : $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$

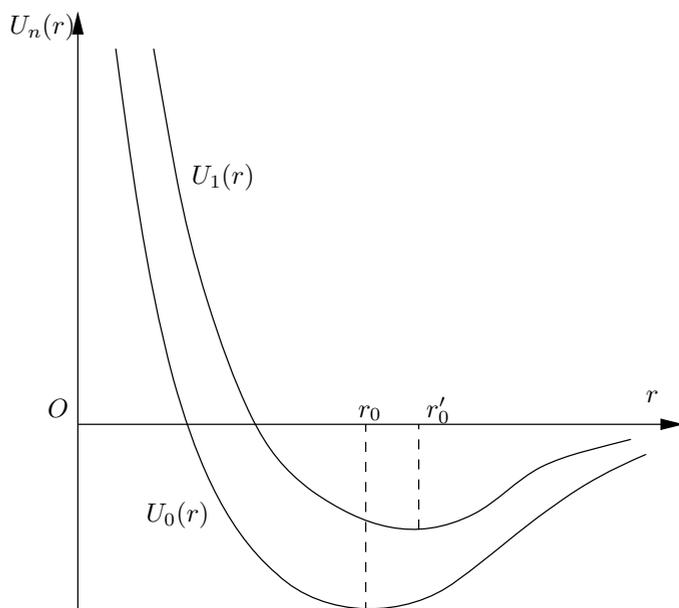


FIG. 16.3 – Les deux premières courbes d'énergie électronique $U_0(r)$ et $U_1(r)$ d'une molécule diatomique. En raison de la répulsion électrostatique des noyaux et du principe de Pauli, le potentiel est répulsif à courte distance, approximativement en $1/r^{12}$. À longue distance, il est contrôlé par les forces de van der Waals et se comporte en $1/r^6$.

Lorsque $\Lambda = 0$, la fonction d'onde électronique est soit paire (+), soit impaire (–) par réflexion, et les deux états possibles seront notés

$${}^{2S+1}\Sigma^+ \quad \text{et} \quad {}^{2S+1}\Sigma^-$$

Lorsque les deux noyaux sont identiques, c'est-à-dire qu'ils ont la même charge électrique, mais ne sont pas nécessairement les mêmes isotopes, le milieu O de la droite des noyaux est un centre de symétrie du potentiel vu par les électrons, et le hamiltonien des électrons est invariant dans une inversion des coordonnées $\vec{r}_i \rightarrow -\vec{r}_i$. Cette inversion des coordonnées commute avec le moment angulaire orbital, et on peut donc caractériser un état électronique par Λ et sa parité dans l'inversion des coordonnées. Dans cette opération, la fonction d'onde peut être paire (g) ou impaire (u). Les états Σ possibles seront donc

$${}^{2S+1}\Sigma_g^+ \quad {}^{2S+1}\Sigma_u^+ \quad {}^{2S+1}\Sigma_g^- \quad {}^{2S+1}\Sigma_u^-$$

En pratique, la situation se simplifie : on constate empiriquement que l'immense majorité des molécules possède un état fondamental $S = 0$ et une

symétrie spatiale maximale⁷. Les deux états fondamentaux usuels sont donc

$$\text{Noyaux différents} : {}^1\Sigma^+ \quad \text{Noyaux identiques} : {}^1\Sigma_g^+$$

16.3.2 Niveaux de rotation-vibration

Nous avons supposé pour le moment les noyaux immobiles. Nous allons maintenant prendre en compte le mouvement des noyaux, à configuration électronique fixée, en général $U_0(r)$. Soit \vec{K} le moment angulaire *total* de la molécule : comme la symétrie d'ensemble est une symétrie de rotation, \vec{K} est conservé. Si \vec{J} est le moment angulaire des noyaux, et que nous choisissons le cas usuel $\vec{S} = 0$ afin de simplifier la discussion, nous aurons $\vec{K} = \vec{J} + \vec{L}$. Le moment d'inertie de la molécule pour un axe de rotation perpendiculaire à la droite des noyaux est $I = Mr^2$, où M est la masse réduite, et ce moment d'inertie est très grand par rapport au moment d'inertie I' pour des rotations autour de la droite des noyaux. L'énergie de rotation $\vec{J}^2/2I'$ pour de telles rotations serait très importante et les niveaux correspondants sont inobservables en pratique. Il reste donc les rotations autour d'un axe perpendiculaire à la droite des noyaux, dont l'énergie de rotation est

$$E_{\text{rot}} = \frac{\vec{J}^2}{2Mr^2} = \frac{(\vec{K} - \vec{L})^2}{2Mr^2} \quad (16.22)$$

Il faut maintenant prendre dans (16.22) la moyenne sur le mouvement électronique rapide

$$\langle (\vec{K} - \vec{L})^2 \rangle = K(K+1) + \langle \vec{L}^2 - 2\vec{K} \cdot \vec{L} \rangle$$

Comme L_z possède une valeur fixée $L_z = \Lambda$, les valeurs moyennes de L_x et de L_y sont nulles : $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. La valeur moyenne de \vec{L} est donc dirigée suivant Oz , ce que l'on peut écrire

$$\langle \vec{L} \rangle = \Lambda \hat{z}$$

Le moment angulaire \vec{J} des noyaux est perpendiculaire à la droite des noyaux, soit

$$\langle \vec{J} \cdot \hat{z} \rangle = \langle (\vec{K} - \vec{L}) \cdot \hat{z} \rangle = 0 \implies \langle \hat{z} \cdot \vec{K} \rangle = \langle \hat{z} \cdot \vec{L} \rangle = \Lambda$$

La projection de $\langle \vec{K} \rangle$ sur l'axe de la molécule est donc aussi égale à Λ , ce qui implique $K \geq |\Lambda|$ et finalement

$$\langle (\vec{K} - \vec{L})^2 \rangle = K(K+1) + \langle \vec{L}^2 \rangle - 2\Lambda^2$$

7. Deux exceptions importantes sont la molécule O_2 , dont l'état fondamental est ${}^3\Sigma_g^-$ (ce qui est à l'origine du paramagnétisme de l'oxygène) et NO, dont le fondamental est un état ${}^2\Pi$.

d'où l'expression de l'énergie de rotation

$$E_{\text{rot}} = \frac{K(K+1)}{2Mr^2} + \text{cste} \quad (16.23)$$

Dans cette équation, la constante ne dépend que du mouvement électronique, et ne contient pas K . Dans le cas particulier $\Lambda = 0$ (état Σ), on a $\langle \vec{K}^2 \rangle = \langle \vec{J}^2 \rangle$; en première approximation $r = r_0$ et on trouve alors la forme habituelle de l'énergie de rotation du rotateur sphérique rigide (§ 10.3.1)

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)}{2Mr_0^2} \quad (16.24)$$

Passons maintenant au mouvement de vibration le long de la droite des noyaux. L'énergie potentielle $U_0(r)$ peut être approchée au voisinage de $r = r_0$ par un potentiel harmonique

$$U_0(r) \simeq U_0(r_0) + \frac{1}{2}U_0''(r_0)(r - r_0)^2 = U_0(r_0) + \frac{1}{2}M\omega_{\text{vib}}^2 \quad (16.25)$$

la fréquence de vibration ω_{vib} étant donnée par

$$\omega_{\text{vib}} = \sqrt{\frac{U_0''(r_0)}{M}} \quad (16.26)$$

Les niveaux de vibration sont donnés par (11.14)

$$E_{\text{vib}}^n = \hbar\omega_{\text{vib}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (16.27)$$

Les niveaux de rotation-vibration d'une molécule diatomique dans son état électronique fondamental sont finalement de la forme

$$E(n, J) = U_0(r_0) + \hbar\omega_{\text{vib}} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{J(J+1)}{2Mr_0^2} \quad (16.28)$$

Cette formule ne donne qu'une première approximation : lorsque la molécule vibre, la distance entre les noyaux n'est plus r_0 mais r , ce qui entraîne un couplage entre rotation et vibration (voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément A_V).

16.4 Exercices

16.4.1 États np^3 permis

Trouver les configurations permises pour 3 électrons dans un état np ($l = 1$), ou état np^3 . Suggestions (1) Quelles sont les valeurs possibles de S , L et J et quelles sont les combinaisons $^{2S+1}L_J$ autorisées par le principe de Pauli? (2) Déterminer le nombre de couples possibles (m_L, m_S) et retrouver le résultat de cette manière. Utiliser les règles de Hund pour montrer que le niveau fondamental est $^4S_{3/2}$.

16.4.2 Théorème de non-croisement des niveaux

Supposons que deux courbes d'énergie électronique d'une molécule diatomique $U_1(r)$ et $U_2(r)$ soient très proches pour des valeurs de r voisins de \bar{r} . En se limitant à ces deux niveaux on écrit le hamiltonien

$$H(r) \simeq H(\bar{r}) + \delta r \frac{\partial H}{\partial r} = H_0 + W \quad \delta r = r - \bar{r}$$

Soit $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ les fonctions propres de H_0 avec les valeurs propres $U_1(\bar{r}) = U_1$ et $U_2(\bar{r}) = U_2$, et $W_{ij} = \langle \varphi_i | W | \varphi_j \rangle$, $i, j = 1, 2$. Montrer que la condition de croisement des niveaux est

$$U_1 - U_2 = W_{22} - W_{11} \quad W_{12} = 0$$

Pourquoi ne peut-on satisfaire simultanément ces deux conditions si les symétries des deux fonctions d'onde sont les mêmes ?

16.4.3 Structure hyperfine du deutérium

Un noyau atomique comprend Z protons et N neutrons, appelés collectivement nucléons. Le proton et le neutron possèdent un moment magnétique $\vec{\mu}$ proportionnel à leur spin \vec{S}

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$$

où γ est le facteur gyromagnétique

$$\gamma_p = 5.59 \frac{q_p}{2m_p} \quad \gamma_n = -3.83 \frac{q_p}{2m_p} \quad (16.29)$$

m_p est la masse du proton et $q_p = -q_e$ sa charge. Le magnéton de Bohr nucléaire μ_N est défini par

$$\mu_N = \frac{q_p \hbar}{2m_p}$$

1. Justifier la définition suivante de l'opérateur moment magnétique $\vec{\mu}$ d'un noyau

$$\vec{\mu} = \sum_{i=1}^Z (\gamma_l \vec{L}_i + \gamma_p \vec{S}_i) + \sum_{j=1}^N \gamma_n \vec{S}_j \quad (16.30)$$

où $\gamma_l = q_p/2m_p$. \vec{L}_i et \vec{S}_i représentent le moment angulaire orbital et le spin du proton i , et \vec{S}_j le spin du neutron j .

2. Soit J le moment angulaire total du noyau (auss appelé *spin du noyau*), et $|JM\rangle$ son état de moment angulaire : M est le nombre quantique magnétique. On appelle par convention moment magnétique du noyau μ la valeur de μ_z dans l'état $|J, M = J\rangle$

$$\mu = \langle J, M = J | \left[\sum_{i=1}^Z (\gamma_l \vec{L}_{iz} + \gamma_p \vec{S}_{iz}) + \sum_{j=1}^N \gamma_n \vec{S}_{jz} \right] | J, M = J \rangle \quad (16.31)$$

Utiliser le théorème de Wigner-Eckart sous la forme (10.150) pour montrer

$$\langle jm | V_z | jm' \rangle = \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle \delta_{mm'} \quad (16.32)$$

où \vec{V} est un opérateur vectoriel.

3. Le deutéron est formé d'un proton et d'un neutron qui se trouvent dans un état 3S_1 . Le deutéron est en fait un mélange de 3S_1 et de 3D_1 , mais nous ignorerons la (petite) composante 3D_1 . En déduire la valeur du moment magnétique du deutéron : $\mu_D = 0.88\mu_N$, ce qui est en bon accord avec la valeur expérimentale $\mu_D^{\text{exp}} = 0.86\mu_N$. Montrer que l'on peut écrire l'opérateur moment magnétique dipolaire du deutéron en fonction de son spin \vec{S}_D

$$\vec{\mu}_D = 0.86 \left(\frac{qP}{2m_p} \right) \vec{S}_D = \gamma_D \vec{S}_D$$

4. L'électron de l'atome de deutérium dans son état fondamental interagit avec le moment magnétique du deutéron suivant une interaction effective (15.30)

$$W = -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_D \gamma_e (\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e) \delta(\vec{r})$$

où μ_0 est la perméabilité du vide, γ_e le facteur gyromagnétique de l'électron et \vec{S}_e son spin. Montrer que la moyenne spatiale de cette interaction transforme celle-ci en couplage effectif des deux spins

$$\langle W \rangle = \frac{A_D}{\hbar^2} (\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e)$$

Calculer le rapport A_D/A , où A est la constante (15.32) obtenue pour l'hydrogène, et donner la valeur de A_D en eV.

5. Soit $\vec{F} = \vec{S}_D + \vec{S}_e$ le moment angulaire total de l'atome dans son état fondamental. Quelles sont les deux valeurs possibles de F ? Déterminer l'énergie des deux niveaux hyperfins en fonction de A_D et leur dégénérescence.

6. L'atome de deutérium est plongé dans un champ magnétique \vec{B} parallèle à Oz , $B_z = B > 0$. Écrire la perturbation W due à l'interaction de l'atome avec le champ magnétique, en remarquant que $M_D \gg m_e$. Montrer que les éléments de matrice de W dans la base $|F, m_F\rangle$ sont de la forme

$$W_{m_F m'_F} = -\frac{q_e B}{m_e} \frac{\hbar m_F}{2F(F+1)} \left[F(F+1) - \frac{5}{4} \right] \delta_{m_F m'_F}$$

Tracer qualitativement les niveaux d'énergie en fonction de B . Quelle condition doit-on avoir sur B pour que les niveaux d'énergie soient donnés correctement par la formule précédente ?

16.4.4 Modèle en couches du noyau atomique

Dans le modèle en couches du noyau atomique, on suppose que chaque nucléon se déplace dans un potentiel moyen créé par les autres nucléons. Ce potentiel est empiriquement assez proche du potentiel d'un oscillateur harmonique à trois dimensions de fréquence ω , et l'ordre des niveaux est donné sur la figure 16.4, en prenant l'état fondamental comme zéro d'énergie. On remarquera la différence de notations entre la physique nucléaire et la physique atomique, celles de la physique nucléaire étant d'ailleurs plus logiques.

1. Porter sur la partie gauche de la figure 16.4 la dégénérescence de chacun des niveaux, sans oublier la dégénérescence de spin, ainsi que le nombre total de nucléons d'un type donné, proton ou neutron, que l'on peut mettre avec une énergie $0, \leq \hbar\omega, \leq 2\hbar\omega, \leq 3\hbar\omega$. Lorsque les protons ou les neutrons forment une couche complète, les noyaux possèdent des propriétés de stabilité remarquables, tout comme les gaz rares dans le cas des atomes. On dit alors que le noyau comprend un « nombre magique » de protons ou de neutrons. Lorsque les nombres de neutrons et de protons sont tous deux magiques, on dit que le « noyau est doublement magique ». Montrer que les premiers nombres magiques sont 2, 8, 20 et 40.

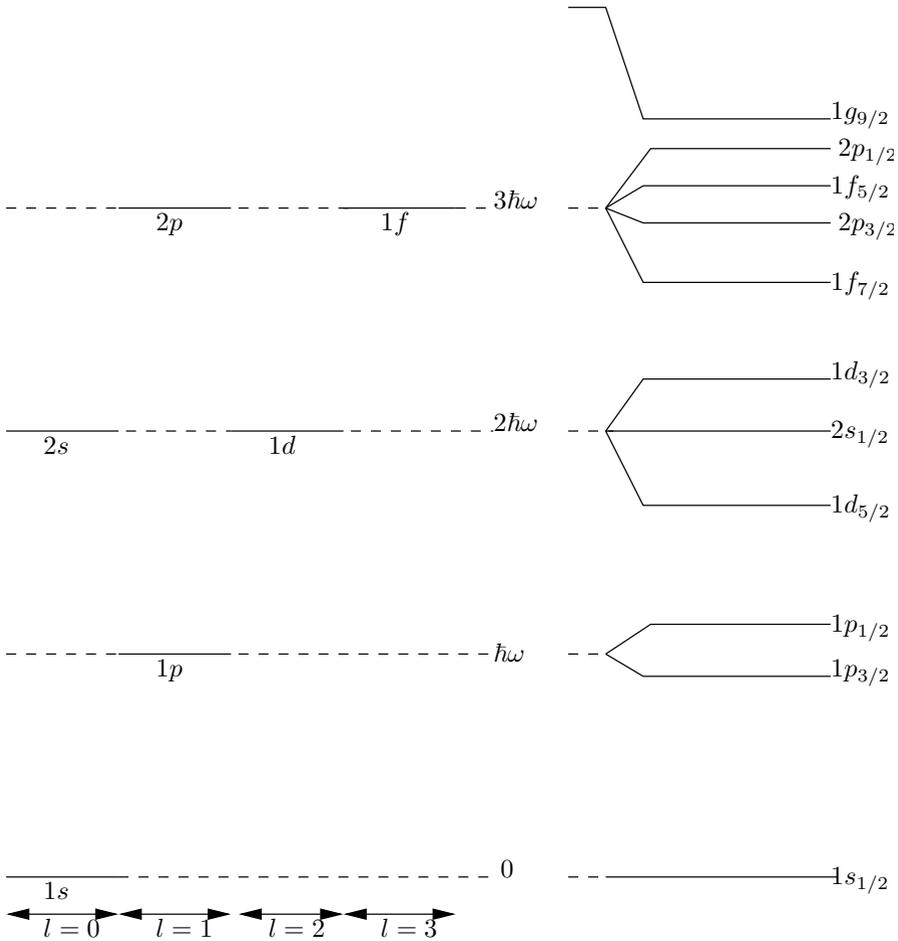


FIG. 16.4 – Les premiers niveaux du modèle en couches du noyau. L’effet du couplage spin-orbite est donné sur la partie de droite de la figure.

2. En fait l’ordre des niveaux de la figure 16.4 est perturbé par un important couplage spin-orbite $V_{so}(\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i)$ pour le nucléon i . Ce potentiel est tel que le niveau $j = l + 1/2$ est plus bas que le niveau $j = l - 1/2$, ce qui donne le schéma de droite sur la figure 16.4. Porter sur cette figure la dégénérescence de chaque niveau, et montrer que les nombres magiques sont en fait : 2, 8, 20, 28 et 50.

3. Comme dans le cas des atomes, le moment angulaire total d’une couche complète est nul. En déduire le spin (= moment angulaire total) du tritium ${}^3\text{H}$ ($Z = 1, N = 2$) et de l’hélium ${}^3\text{He}$ ($Z = 2, N = 1$) ainsi que leurs moments magnétiques, et comparer aux valeurs expérimentales

$${}^3\text{H} : \mu = 2.98 \mu_N \qquad {}^3\text{He} : \mu = -2.13 \mu_N$$

La définition du moment magnétique est donnée dans l'exercice précédent, équations (16.30) et (16.31).

4. On s'intéresse maintenant aux noyaux dits pair-impair : Z pair et N impair, ou l'inverse. On observe la règle *empirique* suivante : deux nucléons identiques se couplent pour donner un moment angulaire nul. En utilisant cette règle et la figure 16.4, déterminer le spin des noyaux suivants

$$\begin{array}{lll} {}^7\text{Li} (Z = 3, N = 4) & {}^9\text{Be} (Z = 4, N = 5) & {}^{13}\text{C} (Z = 6, N = 7) \\ {}^{17}\text{O} (Z = 8, N = 9) & {}^{41}\text{K} (Z = 19, N = 22) & {}^{43}\text{Ca} (Z = 20, N = 23) \end{array}$$

5. Pour calculer le moment magnétique d'un noyau pair-impair, on admet que ce moment magnétique est dû uniquement au nucléon non apparié, et l'opérateur $\vec{\mu}$ (16.30) devient

$$\vec{\mu} = \gamma_l \vec{L} + \gamma_s \vec{S}$$

où γ_l et γ_s sont le moment angulaire orbital et de spin du nucléon non apparié, les valeurs de γ_l et γ_s ayant été données en (16.29). Montrer que

$$\begin{aligned} \mu &= \gamma_l \left(j - \frac{1}{2} \right) \hbar + \frac{1}{2} \gamma_s \hbar & j &= l + \frac{1}{2} \\ \mu &= \frac{j \hbar}{j + 1} \left[\gamma_l \left(j + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \gamma_s \right] & j &= l - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

En déduire les moments magnétiques des noyaux de la question 4 et comparer aux valeurs expérimentales données en unités de μ_N

$${}^7\text{Li} : 3.26 ; {}^9\text{Be} : -1.18 ; {}^{13}\text{C} : 0.70 ; {}^{17}\text{O} : -1.89 ; {}^{41}\text{K} : 0.21 ; {}^{43}\text{Ca} : -1.31$$

16.5 Bibliographie

L'atome d'hélium et les atomes complexes sont décrits par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], compléments A_{XIV} et B_{XIV}. Pour un traitement détaillé des atomes et des molécules diatomiques, on pourra consulter Landau et Lifschitz [1966], chapitres X et XI, ou Bransden et Joachain, chapitres 6, 7, 9 et 10.

Chapitre 17

Systèmes quantiques ouverts

LA PLUPART DES MANUELS DE MÉCANIQUE quantique traitent exclusivement, ou presque exclusivement, de l'évolution de systèmes fermés. Nous avons déjà examiné l'évolution de systèmes ouverts dans la section 6.4 et la section 15.5, et nous allons en donner une vue plus générale dans ce chapitre. L'évolution d'un système fermé est régie par l'équation de Schrödinger sous forme différentielle (4.11) ou sous forme intégrale (4.14). Cependant, un système fermé est une idéalisation, et en pratique tous les systèmes quantiques (sauf peut-être l'Univers entier) sont en contact avec un environnement. L'espace de Hilbert est alors un produit tensoriel $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, où \mathcal{H}_A est l'espace de Hilbert du système \mathcal{A} auquel nous nous intéressons et \mathcal{H}_E celui de l'environnement \mathcal{E} . Au chapitre 6 nous avons appris que l'opérateur statistique ρ_A de \mathcal{A} s'obtient en prenant la trace partielle de ρ_{AE} (6.28) sur les degrés de liberté de l'environnement, et l'évolution temporelle de ρ_A n'est pas unitaire : elle n'est pas régie par (6.51) avec un hamiltonien hermitien. L'entropie de von Neumann $\text{Tr}[\rho_A \ln \rho_A]$, qui est constante pour une évolution unitaire, dépend du temps quand le système est ouvert. Elle augmente en général parce que l'information s'échappe dans l'environnement, et il s'ensuit un comportement irréversible parce que nous ne sommes pas capables de contrôler les degrés de liberté de l'environnement. Nous en avons vu un exemple dans la section 15.5.1, où \mathcal{A} était un atome à deux niveaux et \mathcal{E} le champ électromagnétique quantifié.

Revenons au système à deux niveaux. Il sera commode d'emprunter tout au long de ce chapitre les notations de l'informatique quantique (§ 6.5.2). Nous allons choisir comme vecteurs de base ceux d'un hamiltonien libre H_0

$$H_0 = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z \quad (17.1)$$

et nous appelons $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ces vecteurs

$$H_0|0\rangle = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 |0\rangle \quad H_0|1\rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 |1\rangle \quad (17.2)$$

$\hbar\omega_0$ est donc la différence d'énergie entre l'état fondamental $|0\rangle$ et l'état excité $|1\rangle$. Les éléments de matrice ρ_{00} et $\rho_{11} = 1 - \rho_{00}$ de l'opérateur statistique décrivent les populations des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, tandis que ρ_{01} et ρ_{10}^* ($\rho_{01} = \rho_{10}^*$) décrivent les cohérences. À l'équilibre thermique et à la température T , les populations ρ_{00}^{eq} et ρ_{11}^{eq} sont déterminées par la loi de Boltzmann

$$\frac{\rho_{11}^{\text{eq}}}{\rho_{00}^{\text{eq}}} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) \quad (17.3)$$

Afin de fixer les idées, nous reprenons le cas de la RMN (section 5.2). Si les spins des protons étaient isolés, leur évolution temporelle serait régie par (6.51), avec un hamiltonien dépendant du champ magnétique constant \vec{B}_0 et du champ de radiofréquences $\vec{B}_1(t)$. Comme dans la section 15.5.1, il est commode d'utiliser le vecteur de Bloch $\vec{b} = (u, v, -w)$ (15.118); $w = (\rho_{11} - \rho_{00})$ décrit la différence de populations et (u, v) les cohérences, $\rho_{01} = r = (u - iv)/2$. Si les spins étaient isolés, l'équation d'évolution (6.51) de ρ avec le hamiltonien (5.26) serait, en termes de populations et de cohérences

$$\begin{aligned} \dot{w} &= i\omega_1 (r^* e^{i\omega t} - r e^{-i\omega t}) \\ \dot{r} &= i\omega_0 r + \frac{i\omega_1}{2} w e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (17.4)$$

où ω_1 est la fréquence de Rabi. Les légères différences avec (15.121)–(15.122) disparaissent à l'approximation séculaire. Afin de prendre en compte l'environnement de façon phénoménologique, nous suivons la section 15.5.1 en ajoutant deux termes de relaxation

$$\begin{aligned} \dot{w} &= i\omega_1 (r^* e^{i\omega t} - r e^{-i\omega t}) - \Gamma_1 (w - w_{\text{eq}}) \\ \dot{r} &= i\omega_0 r + \frac{i\omega_1}{2} w e^{i\omega t} - \Gamma_2 r \end{aligned} \quad (17.5)$$

Ces équations sont les *équations de Bloch* de la RMN. La forme du terme de relaxation n'est pas la plus générale possible, mais les approximations conduisant à (17.5) sont généralement justifiées : voir les commentaires suivant (17.68). Afin de donner une interprétation physique aux termes de relaxation, supposons que le champ de radiofréquences a été coupé à $t = 0$, de sorte que $\omega_1 = 0$ pour $t > 0$. La solution de (17.5) est alors

$$\begin{aligned} w(t) - w_{\text{eq}} &= (w(t=0) - w_{\text{eq}}) e^{-\Gamma_1 t} \\ r(t) &= r(t=0) e^{i\omega_0 t} e^{-\Gamma_2 t} \end{aligned} \quad (17.6)$$

Les populations reviennent à l'équilibre avec un temps de relaxation $T_1 = 1/\Gamma_1$, le temps de relaxation longitudinale, et les cohérences avec un temps de relaxation $T_2 = 1/\Gamma_2$, le temps de relaxation transverse, introduits dans la section 5.2. La différence principale par rapport à (15.127)–(15.128) est que

nous avons maintenant deux temps de relaxation indépendants,¹ tandis que dans ces équations nous avons $\Gamma_2 = \Gamma_1/2 = \Gamma/2$. Dans le cas de la RMN, T_1 est de l'ordre de la seconde, et $T_2 \lesssim T_1$ (avec $T_2 \ll T_1$ dans la plupart des cas, par exemple $T_2 \sim 1$ ms et $T_1 \sim 1$ s, voir Levitt [2001]).

Le plan du chapitre est le suivant : dans la section 17.1, nous établissons la forme de Kraus de l'opérateur statistique réduit au temps t en fonction de son expression à $t = 0$. Dans la section 17.2 nous étudions le cas particulier important où l'on peut écrire une équation différentielle du premier ordre pour l'évolution de l'opérateur statistique réduit, ou équation pilote du type de Lindblad. Finalement, dans la section 17.3, nous étudierons deux modèles où l'environnement est constitué d'un bain thermique d'oscillateurs harmoniques indépendants : le premier système couplé à cet environnement sera un système à deux niveaux typique des systèmes rencontrés en optique quantique, et le second une particule brownienne. Ce dernier cas sera particulièrement intéressant dans la mesure où il nous permettra de comprendre le phénomène de décohérence pour la superposition de deux paquets d'onde dans le cas de particules lourdes.

17.1 Superopérateurs

17.1.1 Représentation de Kraus

Dans cette section nous allons essayer de répondre à la question suivante : si un état de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$ subit une évolution unitaire U_{AE} entre $t = 0$ et t , quelle est l'expression au temps t de l'opérateur statistique de \mathcal{A} ? La réponse est donnée par la représentation de Kraus que nous allons maintenant établir. Nous supposons que le système et l'environnement ont été découplés jusqu'à $t = 0$, et à cet instant l'opérateur statistique global est un produit tensoriel $\rho_{AE} = \rho_A \otimes \rho_E$. Il sera commode de supposer en outre que ρ_E est de la forme $|0_E\rangle\langle 0_E|$: cette supposition n'enlève rien à la généralité, en raison de la linéarité des résultats. Nous avons donc à $t = 0$

$$\rho_{AE}(t = 0) = \rho_A \otimes \rho_E = \rho_A \otimes |0_E\rangle\langle 0_E| \quad (17.7)$$

Le système bipartite \mathcal{AE} évolue pendant l'intervalle de temps t suivant

$$\rho_{AE}(t = 0) \equiv \rho_{AE} \rightarrow \rho_{AE}(t) \equiv \rho'_{AE} = U_{AE} \rho_{AE} U_{AE}^\dagger \quad (17.8)$$

où U_{AE} est obtenu en résolvant (6.51) dans $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$. Pour trouver l'opérateur statistique $\rho_A(t) = \rho'_A$ du système \mathcal{A} , on effectue une trace partielle²

$$\rho'^A_{mn} = \sum_{\mu, k, l} U_{m\mu; k0}^{AE} \rho_{kl}^A (U^{AE})^\dagger_{l0; n\mu} \quad (17.9)$$

1. On rencontre aussi des équations de Bloch avec deux temps de relaxation indépendants dans la physique des lasers ; voir par exemple Mandel and Wolf [1995], chapitre 18.

2. Pour la clarté des notations, nous écrivons AE en exposant dans les éléments de matrice.

où nous avons fait explicitement usage de la forme particulière (17.7) de l'opérateur statistique initial ρ_{AE} . Les éléments de matrice de U_{AE} sont

$$U_{m\mu; n\nu}^{AE} = \langle m_A \otimes \mu_E | U_{AE} | n_A \otimes \nu_E \rangle.$$

L'équation (17.9) peut être écrite en fonction de l'opérateur M_μ qui agit dans \mathcal{H}_A défini par

$$M_\mu = \langle \mu_E | U_{AE} | 0_E \rangle \quad (17.10)$$

Écrivant $\rho'_A = \mathcal{K}(\rho_A)$, (17.9) devient (figure 17.1)

$$\mathcal{K}(\rho_A) = \sum_{\mu} M_{\mu} \rho_A M_{\mu}^{\dagger} \quad (17.11)$$

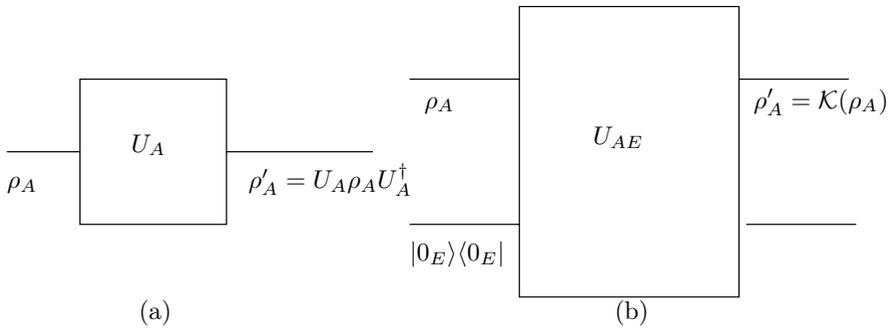


FIG. 17.1 – Représentation graphique (a) d'une évolution unitaire (b) de l'évolution (17.11).

L'unitarité de U_{AE} implique que l'ensemble des opérateurs M_μ vérifie la relation de fermeture (il faut noter l'ordre des opérateurs : $\sum_{\mu} M_{\mu} M_{\mu}^{\dagger}$ n'a pas d'expression simple dans le cas général)

$$\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} = \sum_{\mu} \langle 0_E | U_{AE}^{\dagger} | \mu_E \rangle \langle \mu_E | U_{AE} | 0_E \rangle = I_A \quad (17.12)$$

L'équation (17.11) est la *représentation de Kraus* de ρ'_A . Cette représentation de Kraus, jointe à la relation de fermeture (17.12), définit une application linéaire $\rho_A \rightarrow \rho'_A = \mathcal{K}(\rho_A)$. \mathcal{K} est appelé *superopérateur*, car il agit dans l'espace vectoriel des opérateurs : les opérateurs F_i sur \mathcal{H}_A forment un espace vectoriel et un produit scalaire (\bullet, \bullet) peut être défini sur cet espace par $(F_i, F_j) = \text{Tr} [F_i^{\dagger} F_j]$. Si \mathcal{H}_A est de dimension infinie, il faut se restreindre aux opérateurs de Hilbert-Schmidt F tels que $\text{Tr} [F^{\dagger} F]$ existe.

L'opérateur ρ'_A doit obéir aux trois conditions suivantes pour être un opérateur statistique respectable :

- (i) ρ'_A doit être hermitien, ce qui est manifestement le cas ;

(ii) on doit avoir $\text{Tr } \rho'_A = 1$, ce qui résulte de (17.12) ;

(iii) ρ'_A doit être positif, et de fait avec $|\psi_A^\mu\rangle = M_\mu^\dagger |\varphi_A\rangle$

$$\langle \varphi_A | \rho'_A | \varphi_A \rangle = \sum_{\mu} \langle \langle \varphi_A | M_{\mu} \rangle \rho_A (M_{\mu}^{\dagger} | \varphi_A) \rangle = \sum_{\mu} \langle \psi_A^{\mu} | \rho_A | \psi_A^{\mu} \rangle \geq 0$$

Inversement, toute représentation du type (17.11) peut toujours se déduire d'une représentation unitaire dans un certain espace de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, ce que nous allons montrer. Choisissons comme espace \mathcal{H}_E un espace de Hilbert dont la dimension est au moins égale au nombre de termes dans (17.11), soit $\{|\mu_E\rangle\}$ une base orthonormale dans \mathcal{H}_E et $|0_E\rangle$ un vecteur de cette base. Définissons l'action de U_{AE} sur le vecteur $|\varphi_A \otimes 0_E\rangle$, où $|\varphi_A\rangle$ est un vecteur arbitraire \mathcal{H}_A , de la façon suivante

$$U_{AE} |\varphi_A \otimes 0_E\rangle = \sum_{\mu} (M_{\mu} \otimes I_E) |\varphi_A \otimes \mu_E\rangle \tag{17.13}$$

L'équation (17.13) décrit un *saut quantique* : dans l'intervalle de temps $[0, t]$, le système \mathcal{AE} « saute » de l'état $|\varphi_A \otimes 0_E\rangle$ à une superposition d'états $M_{\mu} |\varphi_A \otimes \mu_E\rangle$. L'interprétation physique de cette équation est importante : supposons que nous effectuons une mesure de l'environnement et que le résultat soit $|\mu\rangle$. Alors, après la mesure, le système \mathcal{A} se trouve dans l'état $M_{\mu} |\varphi_A\rangle$: le saut quantique décrit l'évolution de \mathcal{A} sous l'effet d'une mesure de l'environnement (voir § 6.4.2 pour un exemple). L'opérateur U_{AE} conserve le produit scalaire

$$\left(\sum_{\mu} \langle \psi_A \otimes \mu_E | [M_{\mu}^{\dagger} \otimes I_B] \right) \left(\sum_{\nu} [M_{\nu} \otimes I_E] |\varphi_A \otimes \nu_E\rangle \right) = \langle \psi_A | \left(\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} \right) | \varphi_A \rangle = \langle \psi_A | \varphi_A \rangle$$

et par conséquent U_{AE} , qui est défini *a priori* seulement sur des vecteurs particuliers de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$, peut être prolongé comme opérateur unitaire sur $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$. Prenant la trace partielle, on trouve

$$\text{Tr}_{\mathcal{E}} \left(U_{AE} |\varphi_A \otimes 0_E\rangle \langle \varphi_A \otimes 0_E | U_{AE}^{\dagger} \right) = \sum_{\mu} M_{\mu} |\varphi_A\rangle \langle \varphi_A | M_{\mu}^{\dagger}$$

de sorte que tout opérateur statistique ρ_A , qui peut être écrit comme $\sum_i p_i |\varphi_A^i\rangle \langle \varphi_A^i|$, se transforme suivant (17.11). Nous verrons ultérieurement que toute loi d'évolution « raisonnable » pour ρ_A est de la forme (17.11). Le fait que l'on puisse toujours trouver une représentation unitaire (17.13) est à première vue quelque peu surprenant, car en principe les systèmes \mathcal{A} et \mathcal{E} sont intriqués à $t = 0$, de sorte que supposer un état initial de la forme (17.7)

semble une hypothèse très forte. Mais il semble que, *si le seul objectif est de décrire l'évolution de ρ_A* , il est toujours possible de trouver un environnement fictif tel qu'il n'y ait pas d'intrication entre le système et son environnement à $t = 0$.

Pour conclure cette sous-section, énonçons quelques résultats généraux sur la représentation de Kraus. Comme certaines preuves sont assez techniques, nous les omettrons en renvoyant le lecteur à la bibliographie³. Une question intéressante est la suivante : quelles sont les conditions « raisonnables » nécessaires pour prouver la représentation (17.11) ? *A priori*, il semblerait que l'on doive imposer les conditions suivantes.

(i) \mathcal{K} doit être une opération linéaire⁴ :

$$\mathcal{K}(\lambda\rho_A + \mu\rho_B) = \lambda\mathcal{K}(\rho_A) + \mu\mathcal{K}(\rho_B)$$

(ii) $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit être hermitien :

$$\mathcal{K}(\rho_A) = [\mathcal{K}(\rho_A)]^\dagger$$

(iii) \mathcal{K} doit conserver la trace : $\text{Tr}[\mathcal{K}(\rho_A)] = 1$

(iv) $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit être un opérateur positif : $\mathcal{K}(\rho_A) \geq 0$

Mais la condition (iv) est en fait trop faible. Supposons que \mathcal{A} soit couplé à un environnement \mathcal{E} et qu'il existe un autre système \mathcal{C} auquel \mathcal{A} a été couplé dans un passé lointain. Si \mathcal{A} évolue et \mathcal{C} ne le fait pas, alors $\mathcal{K}(\rho_A) \otimes I_C$ doit être un opérateur positif. Il en résulte que $\mathcal{K}(\rho_A)$ doit obéir à une condition (iv') plus forte que (iv).

(iv') $\mathcal{K}(\rho_A)$ est *complètement positif* : $\mathcal{K}(\rho_A) \otimes I_C \geq 0$, pour tout système \mathcal{C} .

Un exemple d'opérateur qui obéit aux conditions (i) à (iii), mais non à (iv'), est la transposition (exercice 17.4.1)

$$\mathcal{K}(\rho_A) = \rho_A^T$$

Nous pouvons maintenant énoncer sans démonstration le *théorème de représentation de Kraus* : toute opération $\rho \rightarrow \mathcal{K}(\rho)$ dans un espace de dimension d_A qui obéit aux conditions (i) à (iii) et (iv') peut s'écrire sous la forme

$$\boxed{\mathcal{K}(\rho) = \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu \rho M_\mu^\dagger, \quad \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu^\dagger M_\mu = I} \quad (17.14)$$

3. Voir par exemple Haroche et Raimond [2006], chapitre 4, ou Breuer et Petrucione [2002], chapitre 3.

4. Voir cependant Preskill [1999], section 3.2, pour une discussion de la linéarité ; les arguments selon lesquels une évolution non linéaire doit être exclue ne sont pas entièrement incontournables.

où on peut toujours choisir $(K - 1) \leq d_A^2$, d_A étant la dimension de \mathcal{H}_A ; K est le nombre de Kraus. Il existe toujours une expression pour $\mathcal{K}(\rho)$ comprenant un nombre de termes $\leq d_A^2$, indépendamment de la dimension de l'espace de Hilbert \mathcal{H}_E de l'environnement, même si cette dimension est infinie.

La représentation de Kraus n'est pas unique, mais deux représentations sont nécessairement reliées par une transformation unitaire : si

$$\mathcal{K}(\rho) = \sum_{\mu=0}^{K-1} M_\mu \rho M_\mu^\dagger = \sum_{\mu=0}^{L-1} N_\mu \rho N_\mu^\dagger$$

alors N_ν est relié à M_μ par une transformation unitaire

$$N_\nu = \sum_{\mu} U_{\nu\mu} M_\mu$$

Comme certains éléments de matrice de $U_{\nu\mu}$ peuvent s'annuler, le nombre de termes non nuls n'est pas nécessairement identique dans les deux décompositions : il n'est pas obligatoire que $K = L$.

17.1.2 Modèle pour l'amortissement de phase

Il est instructif d'appliquer la notion de superopérateur à un exemple déjà introduit au § 6.4.1, celui de *l'amortissement de phase*. Un autre exemple traité au § 6.4.2, celui de l'émission spontanée, est examiné à l'exercice 17.4.2 dans le cadre de la représentation de Kraus. L'espace \mathcal{H}_E est choisi de dimension 3, et l'évolution unitaire (saut quantique) est supposée de la forme

$$\begin{aligned} U_{AE}|0_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-p} |0_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{p} |0_A \otimes 1_E\rangle \\ U_{AE}|1_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-p} |1_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{p} |1_A \otimes 2_E\rangle \end{aligned} \tag{17.15}$$

Autrement dit, l'environnement reste dans $|0_E\rangle$ avec la probabilité $1 - p$, et il passe dans un autre état qui dépend de celui de \mathcal{A} avec la probabilité p . La représentation de Kraus suit immédiatement de (17.13) :

$$M_0 = \sqrt{1-p} I, \quad M_1 = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{17.16}$$

et la matrice statistique transformée est

$$\mathcal{K}(\rho) = (1-p)\rho + p \begin{pmatrix} \rho_{00} & 0 \\ 0 & \rho_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-p)\rho_{01} \\ (1-p)\rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} \tag{17.17}$$

On note que cette transformation affecte uniquement les cohérences (les éléments de matrice non diagonaux de ρ), d'où la terminologie d'amortissement de phase. De plus, si nous appliquons \mathcal{K} deux fois, il vient

$$\mathcal{K}^2(\rho) = \mathcal{K}[\mathcal{K}(\rho)] = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-p)^2 \rho_{01} \\ (1-p)^2 \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

Supposons maintenant que le saut quantique se passe dans un intervalle de temps court Δt , avec une probabilité proportionnelle à⁵ Δt : $\mathbf{p} = \Gamma \Delta t \ll 1$. Écrivons $t = n\Delta t$, $n \gg 1$, et effectuons n itérations de \mathcal{K} :

$$\mathcal{K}^n(\rho) = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-\mathbf{p})^n \rho_{01} \\ (1-\mathbf{p})^n \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} e^{-\Gamma t} \\ \rho_{10} e^{-\Gamma t} & \rho_{11} \end{pmatrix} \quad (17.18)$$

Le temps de relaxation des cohérences (le temps de relaxation transverse T_2 de la RMN) est $T_2 = 1/\Gamma$. Si le système à deux niveaux est préparé au temps $t = 0$ dans un état pur qui est une superposition *cohérente* de $|0\rangle$ et $|1\rangle$

$$|\varphi\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle, \quad \rho_{00} = 1 - \rho_{11} = |\lambda|^2, \quad \rho_{01} = \rho_{10}^* = \lambda\mu^*$$

alors, après un temps $t \gg 1/\Gamma$, l'état quantique est transformé en une superposition *incohérente* de $|0\rangle$ et $|1\rangle$:

$$t \gg 1/\Gamma : \rho(t) \rightarrow |\lambda|^2|0\rangle\langle 0| + |\mu|^2|1\rangle\langle 1|$$

Comme application, donnons une discussion heuristique de la décohérence d'une superposition d'états quantiques distincts d'un système macroscopique. Identifions $|0_A\rangle$ et $|1_A\rangle$ aux états propres de position $|x\rangle$ et $|-x\rangle$ (ou, de façon plus réaliste, à des superpositions de paquets d'ondes ne se recouvrant pas centrés en x et $-x$), d'une « particule de poussière »,⁶ qui diffuse élastiquement des photons de son environnement initialement dans l'état $|0_E\rangle$. La diffusion des particules de poussière localisées en $|x\rangle$ ($|-x\rangle$) envoie les photons dans l'état $|1_E\rangle$ ($|2_E\rangle$), tandis que la particule de poussière reste dans son état initial. Si la distance $2|x|$ entre les centres des paquets d'ondes est suffisamment grande par rapport à longueur d'onde des photons diffusés, les états $|1_E\rangle$ et $|2_E\rangle$ seront approximativement orthogonaux, $\langle 1_E|2_E\rangle \simeq 0$, parce que la diffusion des photons est localisée dans l'espace. Nous sommes donc dans la situation décrite par (17.15). Si la particule de poussière est initialement dans une superposition cohérente de deux paquets d'ondes

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + |-x\rangle)$$

la cohérence entre les paquets d'ondes sera détruite au bout d'un temps $\sim 1/\Gamma$. Le taux de décohérence Γ est proportionnel à la section efficace σ , et une estimation grossière pour σ est $\sigma \propto R^2 \propto M^{2/3}$, où R est le rayon de la particule de poussière et M sa masse. Le temps de décohérence τ_{dec} est proportionnel à $M^{-2/3}$

$$\tau_{\text{dec}} \simeq \frac{1}{\Gamma} \propto \frac{1}{M^{2/3}}$$

5. Ceci est une hypothèse forte : en général, nous nous attendons à ce que les *amplitudes* soient proportionnelles à Δt si les transitions ont lieu vers un état isolé, voir (5.65). Il faut une transition vers un continuum d'états comme dans la règle d'or de Fermi (9.152), pour que les *probabilités* soient proportionnelles à Δt .

6. Une particule de poussière est grande à l'échelle microscopique et petite à l'échelle macroscopique.

Le temps de décohérence est beaucoup plus court que le temps de relaxation τ caractéristique du mouvement de la particule, par exemple le temps de relaxation τ de sa vitesse, le temps mis par la particule pour modifier son mouvement sous l'action de la diffusion de photons : $\tau_{\text{dec}} \ll \tau$. En effet, le temps de décohérence τ_{dec} est contrôlé par la diffusion d'un seul photon, et τ par la diffusion d'un grand nombre de photons : il faut beaucoup de photons pour modifier la vitesse de façon appréciable, mais un seul photon suffit à détruire la cohérence de phase. Si nous envisageons une expérience d'interférences du type fentes d'Young, lorsque le temps de transit entre les fentes et l'écran de détection est plus grand que τ_{dec} , aucune interférence ne sera possible, parce que la cohérence des deux paquets d'ondes quittant les fentes est détruite avant l'arrivée sur l'écran : une information sur le chemin suivi est codée dans l'environnement.

Ainsi que nous l'avons vu dans la section 6.4, une superposition d'états quantiques macroscopiquement distincts est appelée chat de Schrödinger. Nous venons de voir que ce chat de Schrödinger est détruit en un temps $\sim \tau_{\text{dec}}$, et la situation finale est celle d'un mélange incohérent. Le mécanisme responsable de la décohérence sélectionne une base privilégiée : la diffusion de photons sélectionne une base d'états de position, parce que les photons diffusés par des états de position différents sont expédiés dans des états orthogonaux, en conformité avec le mécanisme général de la décohérence examiné au § 6.4.1. En fait, il n'est pas nécessaire que les états finaux des photons soient orthogonaux. Si l'on suppose par exemple que les états $|1_E\rangle$ et $|2_E\rangle$ obéissent à $\langle 1_E | 2_E \rangle = 1 - \varepsilon$, alors la probabilité p est remplacée par $p \rightarrow \varepsilon p$ et le temps de décohérence par $\tau_{\text{dec}} \rightarrow \tau_{\text{dec}}/\varepsilon$.

17.2 Équations pilotes : la forme de Lindblad

17.2.1 L'approximation markovienne

Le système d'équations de Bloch (17.5) que nous avons écrit à partir d'arguments heuristiques est typique de ce que l'on appelle une *équation pilote*, ou *équation maîtresse* : l'évolution temporelle de l'opérateur statistique est donnée par une équation différentielle, ou, en d'autres termes, *l'évolution est locale dans le temps*. Par exemple, les équations de Bloch optiques (15.127)–(15.128) sont équivalentes à (6.87) si l'on ignore la partie unitaire $(-i/\hbar)[H, \rho]$ de l'évolution, étant donné que (6.87) peut s'écrire sous la forme d'une équation différentielle

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\Gamma}{2} \begin{pmatrix} -2\rho_{11}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & 2\rho_{11}(t) \end{pmatrix} \quad (17.19)$$

On vérifie sans peine que (17.19) peut se mettre sous la forme

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\Gamma}{2} [2\sigma_+ \rho \sigma_- - \{\sigma_- \sigma_+, \rho\}] \quad (17.20)$$

où⁷ $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ (cf. 5.24) et $\{A, B\}$ désigne l'anti-commutateur (14.47) de deux opérateurs A et B :

$$\{A, B\} = AB + BA \quad (17.21)$$

En fait, on peut ajouter à (17.21) une évolution unitaire comme dans (17.2) :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{\Gamma}{2} [2\sigma_+ \rho \sigma_- - \{\sigma_- \sigma_+, \rho\}] \quad (17.22)$$

Si le hamiltonien H est indépendant du temps, $H = H_0$, par exemple comme dans (17.1), il sera commode d'introduire le point de vue de l'interaction

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \\ \tilde{\sigma}_{\pm}(t) &= e^{iH_0 t/\hbar} \sigma_{\pm} e^{-iH_0 t/\hbar} = e^{\mp i\omega_0 t} \sigma_{\pm} \end{aligned} \quad (17.23)$$

L'équation (17.22) est un exemple d'équation pilote sous la forme de Lindblad, dont nous donnons maintenant une déduction générale

Cet exemple, comme celui donné au § 17.1.2 montre que l'on peut passer de la forme de Kraus à l'équation pilote sous la forme de Lindblad (17.22). Cependant, ces déductions dépendent de l'hypothèse cruciale (et forte!) que la probabilité p est proportionnelle à Δt . Dans le cas général, il est loin d'être évident qu'il soit possible d'obtenir une équation différentielle pour l'évolution non unitaire de $\rho(t)$, parce que nous nous attendons à des *effets de mémoire*. De l'information s'échappe depuis le système vers l'environnement, mais inversement de l'information passe aussi de l'environnement vers le système. Schématiquement, une équation avec effets de mémoire prend la forme d'une équation intégré-différentielle qui est *non locale dans le temps* :

$$\frac{d\rho}{dt} = - \int_{-\infty}^t \gamma(t-t') \rho(t') dt' \quad (17.24)$$

où $\gamma(t-t')$ est la fonction de mémoire, ou noyau de mémoire.⁸ Si le temps caractéristique de relaxation τ_* de $\gamma(t-t')$ est beaucoup plus petit que le temps typique τ d'évolution de ρ , $\tau_* \ll \tau$, nous pouvons écrire (17.24) sous la forme approchée

$$\frac{d\rho}{dt} \simeq -\rho(t) \int_{-\infty}^t \gamma(t') dt' = -\Gamma \rho(t) \quad (17.25)$$

et nous obtenons une équation pilote. L'approximation de mémoire courte dans (17.25) est aussi appelée *approximation markovienne* : en effet, $d\rho/dt$

7. Attention au fait que Nielsen et Chuang [2000] utilisent la convention opposée pour σ_{\pm} . Nous avons choisi une convention compatible avec la définition (10.4) des opérateurs moment angulaire J_{\pm} , et qui de plus est compatible avec celle de la théorie des champs, car σ_+ (σ_-) est un opérateur de fréquence positive (négative) suivant la définition du § 15.4.1, comme a (a^\dagger) ; voir (11.68).

8. En général, (17.24) prend une forme matricielle, et des termes additionnels sont présents ; voir les références dans la bibliographie.

dépend seulement de ρ au temps t , et pas de sa valeur à des temps antérieurs $t' < t$, et (17.25) est locale dans le temps. L'approximation markovienne sera valable s'il existe deux échelles de temps bien distinctes : τ , le temps typique d'évolution de ρ , et τ_* , le temps typique de relaxation de la fonction de mémoire, avec $\tau_* \ll \tau$. L'hypothèse de deux échelles de temps bien distinctes est habituelle dans de nombreux problèmes de mécanique statistique hors équilibre.

Examinons les conditions où nous pouvons espérer déduire une équation pilote à partir de la représentation de Kraus. La première étape consiste à utiliser une « granulation »⁹ de ρ , sur un intervalle de temps typique Δt tel que

$$\tau_* \ll \Delta t \ll \tau \tag{17.26}$$

$$\rho(t) \rightarrow \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho(t') dt' \tag{17.27}$$

Cette granulation sert à lisser les fluctuations de ρ sur des temps $\sim \tau_*$, fluctuations qui sont incompatibles avec le caractère markovien. Nous écrivons alors la représentation de Kraus pour l'évolution entre t et $t + \Delta t$ sous la forme

$$\frac{d\rho_A}{dt} \simeq \frac{\Delta\rho_A}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} [\rho_A(t + \Delta t) - \rho_A(t)] = \frac{1}{\Delta t} [\mathcal{K}_{t,t+\Delta t}[\rho_A(t)] - \rho_A(t)].$$

Deux conditions doivent être satisfaites pour que la déduction de l'équation pilote soit possible.

- (i) L'opérateur statistique du système bipartite \mathcal{AE} doit se factoriser approximativement au temps t sous la forme $\rho_{AE}(t) \simeq \rho_A(t) \otimes \rho_E(t)$, où $\rho_A(t) = \text{Tr}_{\mathcal{E}}[\rho_{AE}(t)]$ et $\rho_E(t) = \text{Tr}_{\mathcal{A}}[\rho_{AE}(t)]$. Cette condition est nécessaire pour que l'on puisse écrire une représentation de Kraus au temps $t + \Delta t$.
- (ii) Le superopérateur $\mathcal{K}_{t,t+\Delta t}$ doit dépendre uniquement de Δt , et pas de t .

Nous donnerons des précisions supplémentaires sur ces deux conditions dans la section suivante, dans le cadre d'un modèle spécifique pour \mathcal{E} et de son interaction avec \mathcal{A} . Un énoncé général est que (i) et (ii) sont valables pourvu que $|\mathcal{W}|_{\tau_*}/\hbar \ll 1$, où $|\mathcal{W}|$ est un élément de matrice typique de l'interaction \mathcal{AE} .

17.2.2 L'équation de Lindblad

Supposons que les conditions précédentes (i) et (i) soient vérifiées. Nous pouvons alors écrire d'après (17.14)

$$\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] = \sum_{\mu} M_{\mu}(\Delta t)\rho_A(t)M_{\mu}^{\dagger}(\Delta t) \tag{17.28}$$

9. Traduction de « *coarse graining* ».

et $[\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] - \rho_A(t)]$ est du premier ordre en Δt :

$$\mathcal{K}_{\Delta t}[\rho_A(t)] = \rho_A(t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Il s'ensuit que l'un des M_μ , que nous appellerons par convention M_0 , doit avoir un développement de la forme

$$M_0(t) = I_A + \left(-\frac{i}{\hbar}H - K\right) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \quad (17.29)$$

où H et K sont des opérateurs hermitiens. Dans ces conditions, le premier terme de (17.28) s'écrit

$$M_0(\Delta t)\rho_A(t)M_0^\dagger(\Delta t) = \rho_A(t) - \frac{i\Delta t}{\hbar}[H, \rho_A] - \Delta t\{K, \rho_A\} + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \quad (17.30)$$

Les autres termes de (17.28) doivent être d'ordre $\sqrt{\Delta t}$

$$M_\mu(\Delta t) = L_\mu\sqrt{\Delta t} \quad (17.31)$$

et la relation de fermeture (17.14) conduit à

$$I_A = M_0^\dagger M_0 + \sum_{\mu>0} M_\mu^\dagger M_\mu = I_A - 2K\Delta t + \left(\sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger L_\mu\right) \Delta t$$

qui implique

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mu>0} L_\mu^\dagger L_\mu . \quad (17.32)$$

En combinant (17.30) et (17.32) et en supprimant désormais l'indice A de ρ , nous aboutissons à l'équation de Lindblad pour l'opérateur statistique ρ de \mathcal{A} :

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} = \mathcal{L}\rho = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \frac{1}{2}\{K, \rho\} + \sum_{\mu>0} L_\mu \rho L_\mu^\dagger} \quad (17.33)$$

Les opérateurs L_μ sont les *opérateurs de sauts quantiques*. Ainsi que nous l'avons déjà observé, ils décrivent la façon dont l'état de \mathcal{A} est modifié par une mesure de l'environnement. L'équation (17.33) est la forme la plus générale d'une équation pilote préservant la positivité de ρ si \mathcal{L} est un (super)opérateur borné, et donc en particulier pour un système et un environnement décrits par un espace de Hilbert de dimension finie. Cependant, la condition est suffisante mais pas nécessaire, et il existe des équations de Lindblad parfaitement correctes comme (17.36), même lorsque \mathcal{L} n'est pas borné. Le superopérateur \mathcal{L} est appelé le *liouvillien*. La solution de (17.33) s'écrit formellement

$$\rho(t) = e^{\mathcal{L}t} \rho(t=0) = V(t)\rho(t=0)$$

et comme $V(t)$ vérifie la propriété $V(t_1 + t_2) = V(t_2)V(t_1)$, on dit que $V(t)$ définit un *semi-groupe dynamique*.¹⁰

Il est instructif de redémontrer les équations de Bloch (17.20) à partir de la forme de Lindblad (17.33). Utilisant les expressions de l'exercice 17.4.2 de M_0 et M_1 pour le modèle d'émission spontanée, nous pouvons écrire M_0 et M_1 sous la forme

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\Gamma}{2} \Delta t \end{pmatrix}, \quad M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\Gamma \Delta t} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ou, en termes de matrice de Pauli,

$$M_0 = I - \frac{\Gamma \Delta t}{2} \sigma_- \sigma_+, \quad M_1 = \sqrt{\Gamma \Delta t} \sigma_+$$

Les opérateurs K et L_1 sont donc

$$K = \frac{\Gamma}{2} \sigma_- \sigma_+, \quad L_1 = \sqrt{\Gamma} \sigma_+ \quad (17.34)$$

et nous retrouvons (17.20) à partir de (17.33).

17.2.3 Exemple : l'oscillateur harmonique amorti

Considérons un oscillateur harmonique, par exemple un mode d'une cavité couplé au champ électromagnétique quantifié *via* les imperfections des miroirs, en supposant pour simplifier que l'ensemble est à température nulle; le cas d'une température différente de zéro sera examiné au § 17.3.3. Si l'oscillateur est initialement dans un état excité, il peut seulement perdre de l'énergie en dégringolant les niveaux par émission spontanée de photons; il ne peut pas absorber de photons, car il n'y a pas de photons disponibles à température nulle. Il existe donc un seul opérateur de saut quantique L_1 , qui doit être proportionnel à l'opérateur d'annihilation a (il est utile de se souvenir de l'analogie entre l'opérateur d'annihilation a (11.6) et σ_+ ; voir la note 7) :

$$L_1 = \sqrt{\Gamma} a \quad (17.35)$$

On peut alors écrire par inspection l'équation de Lindblad, par comparaison avec (17.22) :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho] + \frac{1}{2} \Gamma [2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}] \quad (17.36)$$

où $H_0 = \omega_0 a^\dagger a$ est le hamiltonien libre. Dans cette démonstration, nous avons raté la renormalisation radiative des niveaux d'énergie due à l'interaction entre l'oscillateur et le champ quantifié, qui est appelé *déplacement Lamb* et qui sera

10. Semi-groupe parce que l'inverse de $V(t)$ n'existe pas.

calculée au § 17.3.3. De plus, une démonstration complète de (17.36) montre que celle-ci est valable sous la condition $\Gamma \ll \omega_0$. Cette condition nous permet d'ignorer le couplage entre éléments de matrice de l'opérateur statistique qui évoluent avec des fréquences différentes, par exemple le couplage entre populations et cohérences (exercice 17.4.8). Nous nous débarrassons du commutateur en passant dans le point de vue de l'interaction (comparer avec (5.57))

$$\begin{aligned}\tilde{a}(t) &= e^{iH_0 t/\hbar} a e^{-iH_0 t/\hbar} = a e^{-i\omega_0 t} \\ \tilde{a}^\dagger(t) &= e^{iH_0 t/\hbar} a^\dagger e^{-iH_0 t/\hbar} = a^\dagger e^{i\omega_0 t}\end{aligned}\quad (17.37)$$

d'où

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \Gamma \left[\tilde{a} \tilde{\rho} \tilde{a}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{a}^\dagger \tilde{a}, \tilde{\rho} \} \right] = \Gamma \left[a \tilde{\rho} a^\dagger - \frac{1}{2} \{ a^\dagger a, \tilde{\rho} \} \right] \quad (17.38)$$

Nous avons utilisé (17.37) pour obtenir la seconde expression. En l'absence d'amortissement ($\Gamma = 0$), la valeur moyenne de l'opérateur

$$\bar{a} = e^{-iH_0 t/\hbar} a e^{iH_0 t/\hbar}$$

est indépendante du temps. Si $\Gamma \neq 0$, nous déduisons de (17.38) l'équation d'évolution pour sa valeur moyenne

$$\frac{d}{dt} \langle \bar{a} \rangle = \frac{d}{dt} \text{Tr} (\bar{a} \rho) = \frac{d}{dt} \text{Tr} (a e^{iH_0 t} \rho e^{-iH_0 t}) = \frac{d}{dt} \text{Tr} (a \tilde{\rho}) = \text{Tr} \left(a \frac{d\tilde{\rho}}{dt} \right)$$

et donc

$$\begin{aligned}\text{Tr} \left(a \frac{d\tilde{\rho}}{dt} \right) &= \frac{\Gamma}{2} \text{Tr} [2a^2 \tilde{\rho} a^\dagger - a a^\dagger a \tilde{\rho} - a \tilde{\rho} a^\dagger a] \\ &= \frac{\Gamma}{2} \text{Tr} [[a^\dagger, a] a \rho] = -\frac{\Gamma}{2} \langle \bar{a} \rangle\end{aligned}$$

Nous en déduisons la loi de décroissance

$$\langle \bar{a}(t) \rangle = e^{-\Gamma t/2} \langle \bar{a}(t=0) \rangle \quad (17.39)$$

Un argument analogue montre que le nombre moyen d'occupation $n(t) = \langle a^\dagger a \rangle$ décroît avec un temps de relaxation $1/\Gamma$ (exercice 17.4.6)

$$n(t) = e^{-\Gamma t} n(t=0) \quad (17.40)$$

Si l'état initial de l'oscillateur est un état cohérent (§ 11.2.1) $|z\rangle$ à $t = 0$ l'évolution temporelle conduit à

$$|z\rangle \rightarrow |z e^{-i\omega_0 t} e^{-\Gamma t/2}\rangle$$

et l'état cohérent ne s'intrique pas avec son environnement, bien qu'il décroisse lentement ($\Gamma \ll \omega_0$) vers l'état du vide. En revanche, si l'on part d'une superposition linéaire d'états cohérents $|z_1\rangle$ et $|z_2\rangle$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|z_1\rangle + |z_2\rangle)$$

comme on le montre dans l'exercice 17.4.6, les termes non diagonaux de la matrice statistique décroissent comme

$$\exp \left[-\frac{1}{2} \Gamma |z_1 - z_2|^2 t \right]$$

Le taux de décohérence Γ_{dec} est beaucoup plus grand que le taux d'amortissement Γ si $|z_1 - z_2|^2 \gg 1$:

$$\Gamma_{\text{dec}} = \frac{1}{2} \Gamma |z_1 - z_2|^2. \quad (17.41)$$

Il est proportionnel au carré de la « distance » $|z_1 - z_2|$ entre les deux états cohérents. Les états cohérents sont des états pointeurs.

17.3 Couplage à un bain thermique d'oscillateurs

17.3.1 Équations d'évolution exactes

Dans cette section, nous nous proposons de donner une image plus quantitative du phénomène de décohérence en étudiant un modèle explicite semi-réaliste. Le modèle décrit l'interaction d'un système \mathcal{A} avec un ensemble \mathcal{R} d'oscillateurs harmoniques indépendants de fréquences ω_λ à l'équilibre thermique, ou réservoir, qui joue le rôle de l'environnement de \mathcal{A} . Dans le § 17.3.3, \mathcal{A} sera un système à deux niveaux, et dans le § 17.3.4, une particule brownienne. Le hamiltonien complet H_{AR} se décompose en H_A , le hamiltonien du système, H_R , le hamiltonien du réservoir, et W , l'interaction système-réservoir

$$H_{AR} = H_A + H_R + W = H_T + W, \quad H_T = H_A + H_R \quad (17.42)$$

avec

$$H_R = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \quad (17.43)$$

Les fréquences ω_λ sont supposées former un continuum dans un grand intervalle de fréquences $\omega_* \sim 1/\tau_*$. En effet, un nombre fini de fréquences conduirait à des récurrences de Poincaré et il ne pourrait pas y avoir d'irréversibilité : il faut donc prendre la limite d'un nombre infini de fréquences. Lorsque $W = 0$, l'opérateur statistique du réservoir est donné par la distribution canonique

$$\rho_R(t=0) = \frac{e^{-H_R/k_B T}}{\text{Tr}(e^{-H_R/k_B T})} \quad (17.44)$$

On déduit de cette expression les résultats standard pour les moyennes d'équilibre, notées $\langle \bullet \rangle$

$$\langle a_{\lambda} \rangle = \langle a_{\lambda}^{\dagger} \rangle = 0, \quad \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu} \rangle = n_{\lambda} \delta_{\lambda \mu}, \quad \langle a_{\lambda} a_{\mu}^{\dagger} \rangle = (n_{\lambda} + 1) \delta_{\lambda \mu} \quad (17.45)$$

où le nombre d'occupation n_λ est celui de la distribution de Bose-Einstein

$$n_\lambda = \frac{1}{e^{\hbar\omega_\lambda/k_B T} - 1} \quad (17.46)$$

L'interaction système-réservoir s'écrit plus précisément

$$W = AR, \quad R = R^\dagger = \sum_\lambda (g_\lambda a_\lambda + g_\lambda^* a_\lambda^\dagger) \quad (17.47)$$

où $A = A^\dagger$ est un opérateur agissant dans \mathcal{H}_A . L'évolution de l'opérateur statistique est donnée dans le point de vue de Schrödinger par

$$\frac{d\rho_{AR}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_{AR}, \rho_{AR}] \quad (17.48)$$

Pour résoudre cette équation, il est utile de passer dans le point de vue de l'interaction¹¹

$$\frac{d\tilde{\rho}_{AR}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [W(t), \tilde{\rho}_{AR}(t)] = -\frac{i}{\hbar} [A(t)R(t), \tilde{\rho}_{AR}(t)] \quad (17.49)$$

où les opérateurs $A(t)$ et $R(t)$ sont définis par

$$\begin{aligned} A(t) &= e^{iH_T t/\hbar} A e^{-iH_T t/\hbar} = e^{iH_A t/\hbar} A e^{-iH_A t/\hbar}, \\ R(t) &= e^{iH_T t/\hbar} R e^{-iH_T t/\hbar} = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar} \\ &= \sum_\lambda \left(g_\lambda a_\lambda e^{-i\omega_\lambda t} + g_\lambda a_\lambda^\dagger e^{i\omega_\lambda t} \right) \end{aligned} \quad (17.50)$$

car H_R (H_A) n'agit pas sur les degrés de liberté de \mathcal{A} (\mathcal{R}). Une fonction qui jouera un rôle crucial dans ce qui suit est la *fonction d'autocorrélation d'équilibre* $g(t')$ de $R(t)$

$$g(t') = \langle R(t)R(t-t') \rangle = \langle R(t')R(0) \rangle \quad (17.51)$$

En raison de l'invariance par translation de temps à l'équilibre, $\langle R(t_1)R(t_2) \rangle$ ne peut dépendre que de la différence $(t_1 - t_2)$, et de plus $g(t) = g^*(-t)$ parce que $R(t)$ est hermitien. La forme explicite de $g(t')$ se calcule à partir de (17.45) et (17.50)

$$g(t') = \sum_\lambda |g_\lambda|^2 \left[n_\lambda e^{i\omega_\lambda t'} + (n_\lambda + 1)e^{-i\omega_\lambda t'} \right] \quad (17.52)$$

La fonction $g(t')$ est la somme d'un grand nombre d'exponentielles oscillant à des fréquences différentes, et ces exponentielles interfèrent destructivement

11. Afin d'alléger les notations, nous écrivons $W(t)$ au lieu de $\tilde{W}(t)$, etc., car la dépendance par rapport à t évite toute ambiguïté.

pour $|t| \gtrsim \tau_*$. On s'attend donc à une décroissance exponentielle, contrôlée par un temps d'autocorrélation $\sim \tau_*$

$$|g(t')| \sim e^{-|t'|/\tau_*} \quad (17.53)$$

Revenons à (17.49), qu'il est commode de mettre sous forme intégrale

$$\tilde{\rho}_{AR}(t) = \rho_{AR}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')]$$

L'itération de cette équation donne

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{AR}(t) = & \rho_{AR}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [W(t'), \rho_{AR}(0)] \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [W(t'), [W(t''), \tilde{\rho}_{AR}(t'')]] \end{aligned}$$

On différencie ensuite cette équation par rapport à t

$$\frac{d\tilde{\rho}_{AR}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [W(t), \rho_{AR}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [W(t), [W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')]] \quad (17.54)$$

Supposons que l'interaction W soit branchée à $t = 0$; $\rho_{AR}(t = 0)$ possède alors une forme factorisée

$$\rho_{AR}(t = 0) = \rho(t = 0) \otimes \rho_R(t = 0) \quad (17.55)$$

Prenons dans (17.54) la trace sur les degrés de liberté du réservoir (exercice 17.4.5)

$$\text{Tr}_{\mathcal{R}} [W(t), \rho_{AR}(0)] = [A(t), \rho_A(0)] \text{Tr}_{\mathcal{R}} (R(t)\rho_R) = 0$$

où nous avons utilisé (17.45). Ceci donne une équation *exacte*, étant donné la condition initiale (17.55), pour l'opérateur statistique $\tilde{\rho}_A(t) \equiv \tilde{\rho}(t)$ du système \mathcal{A}

$$\boxed{\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_{\mathcal{R}} ([W(t), [W(t'), \tilde{\rho}_{AR}(t')]])} \quad (17.56)$$

17.3.2 Déduction de l'équation pilote

Le temps caractéristique d'évolution est *a priori* $\sim \hbar/|\mathcal{W}|$, où \mathcal{W} est un élément de matrice typique de W . On ne peut pas se satisfaire de la théorie des perturbations, qui n'est valable que pour des temps $|\mathcal{W}|t/\hbar \ll 1$, alors que nous cherchons une théorie valable pour des temps longs. Deux points sont à souligner.

1. Nous pouvons espérer une factorisation approchée au temps t , et pas seulement à $t = 0$

$$\tilde{\rho}_{AR}(t) = \tilde{\rho}_A(t) \otimes \tilde{\rho}_R(t) + \delta\tilde{\rho}_{AR}(t)$$

$$\tilde{\rho}_A(t) = \text{Tr}_{\mathcal{R}}[\tilde{\rho}_{AR}(t)] \quad \tilde{\rho}_R(t) = \text{Tr}_{\mathcal{A}}[\tilde{\rho}_{AR}(t)]$$

En effet, comme $\mathcal{R} \gg \mathcal{A}$ (le réservoir est beaucoup plus grand que le système), nous nous attendons à ce que

$$|\delta\tilde{\rho}_{AR}(t)|/|\tilde{\rho}_{AR}(t)| \ll 1$$

Ceci revient à ignorer la réaction du système sur le réservoir et conduit à des équations irréversibles pour le système.

2. Sur un temps $t \sim \tau_*$, les relations de phase entre \mathcal{A} et \mathcal{R} évoluent de $\sim |\mathcal{W}|_{\tau^*}/\hbar$. Comme il y a perte de mémoire pour $t \gtrsim \tau_*$, une phase typique Φ effectue une marche au hasard, et pendant un temps $t \gg \tau_*$, elle effectue un nombre de pas $\sim t/\tau_*$; son écart quadratique moyen vaut

$$\Delta\Phi^2(t \gg \tau_*) \simeq \left(\frac{|\mathcal{W}|_{\tau^*}}{\hbar} \right)^2 \times \frac{t}{\tau_*} = \frac{t}{\tau}$$

Lorsque $|\mathcal{W}|_{\tau^*}/\hbar \ll 1$, on se trouve en présence de deux échelles de temps très différentes, une échelle de temps microscopique τ_* et une échelle de temps macroscopique τ

$$\tau = \left(\frac{\hbar}{|\mathcal{W}|_{\tau^*}} \right)^2 \tau_* \quad (17.57)$$

avec $\tau \gg \tau_*$. On peut alors procéder à la « granulation » (17.27) de $\tilde{\rho}$ sur un intervalle de temps Δt choisi tel que $\tau_* \ll \Delta t \ll \tau$. La condition fondamentale de validité est l'inégalité

$$\boxed{\frac{|\mathcal{W}|_{\tau^*}}{\hbar} \ll 1} \quad (17.58)$$

et si elle est vérifiée, on peut montrer rigoureusement¹² que

- 1.

$$|\delta\tilde{\rho}_{AR}(t)| = O\left(\frac{|\mathcal{W}|_{\tau^*}}{\hbar}\right)^2 = O\left(\frac{\tau_*}{\tau}\right) \quad (17.59)$$

- 2.

$$\tilde{\rho}_R(t) = \rho_R(t=0) + O\left(\frac{|\mathcal{W}|_{\tau^*}}{\hbar}\right)^2 = \rho_R(0) + O\left(\frac{\tau_*}{\tau}\right) \quad (17.60)$$

12. Cohen-Tannoudji *et al.* [1988], chapitre IV.

ce qui justifie la discussion qualitative donnée précédemment. En résumé, l'existence de deux échelles de temps très différentes, τ et τ_* , avec $\tau \gg \tau_*$

$$\tau_* \ll \frac{\hbar}{|\mathcal{W}|} \ll \tau = \frac{\hbar^2}{|\mathcal{W}|^2 \tau_*} \quad (17.61)$$

est la condition cruciale de validité de l'équation pilote pour la granulation de $\tilde{\rho}$: rappelons que la dérivée par rapport au temps ne doit pas se comprendre comme $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \Delta \tilde{\rho} / \Delta t$, car la granulation lisse les variations de $\tilde{\rho}$ sur des temps $\sim \tau_*$. On voit que le temps caractéristique naturel $\hbar/|\mathcal{W}|$ est très petit par rapport à τ : ce phénomène est appelé *rétrécissement par le mouvement* (*motion narrowing*), et il vient de ce que \mathcal{A} est couplé à un grand nombre de modes indépendants. Compte tenu de (17.59) et (17.60), l'équation approchée pour $\tilde{\rho}$ est

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left([W(t), [W(t'), \tilde{\rho}_A(t') \otimes \rho_R(0)]] \right)$$

En effectuant la trace sur les variables du réservoir, nous obtenons une équation du mouvement pour $\tilde{\rho}$ qui dépend seulement de A et g (exercice 17.4.6) :

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' g(t') \left[A(t-t') \tilde{\rho}(t-t') A(t) - A(t) A(t-t') \tilde{\rho}(t-t') \right] + \text{h.c.}$$

où h.c.= terme conjugué hermitien, et nous avons effectué le changement de variable $t' \rightarrow t - t'$. Cette équation est encore une équation intégral-différentielle qui contient des effets de mémoire et pas une équation pilote. Pour obtenir une équation pilote, nous observons d'après (17.53) que les temps t' qui contribuent de façon significative à l'intégrale sont bornés par τ_* , $t' \lesssim \tau_*$. La différence $[\tilde{\rho}(t-t') - \tilde{\rho}(t)]$ est donc bornée par

$$|\tilde{\rho}(t-t') - \tilde{\rho}(t)| \lesssim \mathcal{O} \left(\frac{|\mathcal{W}| \tau_*}{\hbar} \right)$$

et nous pouvons remplacer $\tilde{\rho}(t-t')$ par $\tilde{\rho}(t)$ de manière cohérente avec les approximations précédentes : l'erreur commise est d'un ordre plus élevé dans le petit paramètre τ_*/τ . Prenant $t \gg \tau_*$, nous pouvons envoyer la borne supérieure de l'intégrale à l'infini et écrire

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' g(t') \left[A(t-t') \tilde{\rho}(t) A(t) - A(t) A(t-t') \tilde{\rho}(t) \right] + \text{h.c.}$$

Ceci met un point final à notre justification de l'approximation markovienne car l'équation pour $\tilde{\rho}$ est maintenant locale en t et ne dépend plus des conditions initiales. Il est commode (mais non indispensable) de revenir au point de vue de Schrödinger, où l'équation pilote pour ρ s'écrit finalement

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_A, \rho] + \frac{1}{\hbar^2} (E\rho A + A\rho E^\dagger - AE\rho - \rho E^\dagger A)} \quad (17.62)$$

l'opérateur E étant donné par

$$E = \int_0^\infty g(t')A(-t')dt' \quad (17.63)$$

17.3.3 Relaxation d'un système à deux niveaux

Appliquons les résultats précédents au cas où le système \mathcal{A} est un système à deux niveaux couplé à un bain thermique d'oscillateurs harmoniques indépendants : photons, phonons... Le hamiltonien libre H_A du système à deux niveaux est maintenant H_0 (17.2)

$$H_A \equiv H_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z \quad (17.64)$$

et notre objectif est de comprendre ses propriétés de relaxation. L'interaction système-réservoir W doit être capable d'induire des transitions entre les deux niveaux, et un choix possible est

$$W = \sigma_x R = \sigma_x \sum_\lambda \left(g_\lambda a_\lambda + g_\lambda^* a_\lambda^\dagger \right) \quad (17.65)$$

et par conséquent $A = \sigma_x = (\sigma_+ + \sigma_-)$. L'opérateur E (17.63) agissant sur le système à deux niveaux est

$$E = \int_0^\infty g(t')A(-t')dt' = G_+(\omega_0)\sigma_+ + G_-(\omega_0)\sigma_- \quad (17.66)$$

avec

$$G_\pm(\omega_0) = G_\mp(-\omega_0) = \int_0^\infty g(t')e^{\pm i\omega_0 t'} dt' \quad (17.67)$$

où nous avons utilisé (17.23). Reportant (17.66) dans (17.62) et utilisant $\sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & \frac{i}{2} \omega_0 [\sigma_z, \rho] \\ & + (G_+ + G_+^*)\sigma_+\rho\sigma_- - G_+\sigma_-\sigma_+\rho - G_+^*\rho\sigma_-\sigma_+ \\ & + (G_- + G_-^*)\sigma_-\rho\sigma_+ - G_-\sigma_+\sigma_-\rho - G_-^*\rho\sigma_+\sigma_- \\ & + (G_+ + G_-^*)\sigma_+\rho\sigma_+ + (G_- + G_+^*)\sigma_-\rho\sigma_- \end{aligned} \quad (17.68)$$

Utilisant l'invariance de la trace par permutation cyclique, nous pouvons vérifier que l'équation a été écrite de telle sorte que chacune des trois premières lignes est de trace nulle. La quatrième ligne ne contribue pas à l'évolution des populations (exercice 17.4.7), seulement à celle des cohérences. Mais même cette contribution aux cohérences peut être négligée à l'approximation séculaire, en utilisant le même argument que dans le § 5.3.2 : si nous revenons à

$d\tilde{\rho}/dt$ et au point de vue de l'interaction, $\tilde{\sigma}_{\pm}(t) \sim \exp(\mp i\omega_0 t)$, et le dernier terme de (17.67) varie comme $\exp(\mp 2i\omega_0 t)$. Il oscille donc très rapidement contrairement aux autres termes et on peut supposer qu'il est nul en moyenne. Ceci est un résultat général : si les termes de relaxation sont écrits sous la forme

$$\frac{d\tilde{\rho}_{ij}}{dt} = \sum_{k,l=0}^1 \gamma_{ijkl} \tilde{\rho}_{kl}$$

on peut montrer que les coefficients γ_{ijkl} peuvent être négligés si¹³ $|\omega_{ij} - \omega_{kl}| \gg \Gamma$, $\hbar\omega_{ij} = E_i - E_j$. Cette approximation séculaire nous permet de justifier la forme des équations de Bloch (17.6) ; voir aussi l'exercice 17.4.8.

Calculons explicitement $G_{\pm}(\omega_0)$

$$\begin{aligned} G_+(\omega_0) &= \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \left((n_{\lambda} + 1) \frac{i}{\omega_0 - \omega_{\lambda} + i\eta} + n_{\lambda} \frac{i}{\omega_0 + \omega_{\lambda} + i\eta} \right) \\ G_-(\omega_0) &= \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \left(n_{\lambda} \frac{-i}{\omega_0 - \omega_{\lambda} - i\eta} + (n_{\lambda} + 1) \frac{-i}{\omega_0 + \omega_{\lambda} - i\eta} \right) \end{aligned} \quad (17.69)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$. Utilisant la formule classique

$$\frac{i}{x \pm i\eta} = i \frac{\mathbb{P}}{x} \pm \pi \delta(x) \quad (17.70)$$

où \mathbb{P} désigne une valeur principale de Cauchy, nous trouvons pour $G_+(\omega_0)$

$$\begin{aligned} G_+(\omega_0) &= \frac{1}{2} \Gamma_+ - i\Delta_+, \\ \Gamma_+ &= 2\pi \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 (n_{\lambda} + 1) \delta(\omega_0 - \omega_{\lambda}), \\ \Delta_+ &= - \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \left((n_{\lambda} + 1) \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_{\lambda}} + n_{\lambda} \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_{\lambda}} \right) \end{aligned} \quad (17.71)$$

tandis que $G_-(\omega_0)$ est donné par

$$\begin{aligned} G_-(\omega_0) &= \frac{1}{2} \Gamma_- - i\Delta_-, \\ \Gamma_- &= 2\pi \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 n_{\lambda} \delta(\omega_0 - \omega_{\lambda}), \\ \Delta_- &= - \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \left(n_{\lambda} \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_{\lambda}} + (n_{\lambda} + 1) \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_{\lambda}} \right) \end{aligned} \quad (17.72)$$

En substituant les deux équations précédentes dans (17.68), en omettant la dernière ligne et en utilisant

$$\sigma_+ \sigma_- = \frac{1}{2} (1 + \sigma_z), \quad \sigma_- \sigma_+ = \frac{1}{2} (1 - \sigma_z),$$

13. Voir Cohen-Tannoudji *et al.* [1988], Chap. IV, pour une discussion détaillée.

nous obtenons une équation pilote sous la forme de Lindblad

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & \frac{i}{2} (\omega_0 + \Delta) [\sigma_z, \rho] \\ & + \frac{1}{2} \Gamma_+ (2\sigma_+ \rho \sigma_- - \{\sigma_- \sigma_+, \rho\}) \\ & + \frac{1}{2} \Gamma_- (2\sigma_- \rho \sigma_+ - \{\sigma_+ \sigma_-, \rho\}) \end{aligned} \quad (17.73)$$

Soulignons que la forme de Lindblad ne peut être obtenue que si l'on effectue l'approximation séculaire, qui est valable à condition que la fréquence caractéristique ω_0 du système libre soit très grande par rapport au taux de relaxation Γ : $\omega_0 \gg \Gamma$. Cette condition est bien vérifiée en optique quantique où $\omega_0 \sim 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$ et $\Gamma \sim 10^9 \text{ rad.s}^{-1}$. En d'autres termes, la dynamique cohérente du système doit être rapide par rapport à celle de sa relaxation, et le système effectue un grand nombre de cycles pendant le temps de relaxation. Dans ces conditions, et si le spectre de H_A est non dégénéré, on peut montrer que les populations obéissent à un système fermé d'équations différentielles, les équations de Pauli (exercice 17.4.8, question 3).

Les deux opérateurs de saut quantique de l'équation de Lindblad sont

$$L_+ = \sqrt{\frac{\Gamma_+}{2}} \sigma_+, \quad L_- = \sqrt{\frac{\Gamma_-}{2}} \sigma_- \quad (17.74)$$

Le déplacement d'énergie Δ (ou déplacement Lamb)

$$\Delta = \Delta_- - \Delta_+ = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 (2n_{\lambda} + 1) \left(\frac{\mathbb{P}}{\omega_0 - \omega_{\lambda}} + \frac{\mathbb{P}}{\omega_0 + \omega_{\lambda}} \right) \quad (17.75)$$

représente les corrections radiatives à la différence d'énergie $\hbar\omega_0$ entre les deux niveaux provenant de l'interaction du système à deux niveaux avec le bain thermique d'oscillateurs.

L'équation (17.73) généralise (17.22) obtenue à $T = 0$, où seule l'émission spontanée avait été prise en compte, et le déplacement Lamb ne pouvait pas être calculé. À température non nulle, on doit aussi prendre en compte l'absorption de photons : le taux de relaxation Γ_+ décrit les transitions $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ et Γ_- les transitions $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ (Fig. 17.2). Il est facile de vérifier (exercice 17.4.7) que $\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_-$ est le taux de relaxation des populations, tandis que celui des cohérences est $\Gamma/2$: la relation $T_2 = 2T_1$ est aussi valable à température non nulle. Dans le même exercice, on montre qu'à la limite des temps longs les populations des niveaux $|0\rangle$ and $|1\rangle$ sont donnés par la loi de Boltzmann (1.12), avec une température T égale à celle du bain thermique. Ceci confirme la cohérence de notre approche, car ce résultat montre que le système est en équilibre avec le bain thermique dans la limite des temps longs. La largeur totale Γ est donnée explicitement par

$$\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_- = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 (2n_{\lambda} + 1) \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_{\lambda}). \quad (17.76)$$

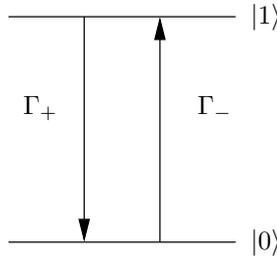


FIG. 17.2 – Taux de transition Γ_+ and Γ_- .

Ceci est une vérification intéressante du calcul, car (17.76) peut être écrit sous la forme de la règle d’or de Fermi (9.152) :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |g(\omega_0)|^2 (2n_0 + 1) \mathcal{D}(\hbar\omega_0),$$

où $\mathcal{D}(\hbar\omega_0)$ est la densité d’états du réservoir. Le rapport Γ_+/Γ_- est donné par la loi de Boltzmann

$$\frac{\Gamma_+}{\Gamma_-} = e^{\hbar\omega/k_B T}.$$

L’équation pilote (17.73) nous permet d’écrire par inspection (en se souvenant de la correspondance $a \rightarrow \sigma_+$, $a^\dagger \rightarrow \sigma_-$; voir la note 7) la généralisation à $T \neq 0$ de (17.36), qui donne l’équation pilote pour un oscillateur harmonique couplé au champ électromagnétique quantifié à température non nulle

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho] + \frac{1}{2} \Gamma_+ [2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}] + \frac{1}{2} \Gamma_- [2a^\dagger \rho a - \{aa^\dagger, \rho\}]. \quad (17.77)$$

Des démonstrations détaillées de cette équation se trouvent dans des livres d’optique quantique cités dans la bibliographie.

17.3.4 Mouvement brownien quantique

Notre dernier exemple sera celui d’une particule de masse M , couplée à un bain thermique d’oscillateurs harmoniques indépendants de masses m_λ et de fréquences ω_λ . Ceci est un cas typique de mouvement brownien, où une particule lourde interagit avec des particules légères (molécules) d’un bain thermique, et où l’on peut identifier deux échelles de temps très différentes : l’échelle de temps τ_* typique du bain et l’échelle de temps τ typique du mouvement de la particule lourde, avec $\tau_* \ll \tau$. Caldeira et Leggett [1983] ont proposé un modèle spécifique pour \mathcal{A} et \mathcal{AR} , où \mathcal{A} est une particule quantique libre¹⁴ se déplaçant dans un espace à une dimension, une simplification

14. On peut aussi mettre la particule dans un potentiel $U(X)$, par exemple un potentiel harmonique $M\Omega^2 X^2/2$, voir (17.97).

qui n'affecte pas la physique

$$H_{AR} = \frac{P^2}{2M} + \sum_{\lambda} \frac{P_{\lambda}^2}{2m_{\lambda}} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} m_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 (X - X_{\lambda})^2 \quad (17.78)$$

(P, P_{λ}) et (X, X_{λ}) sont les opérateurs impulsion et position de la particule et des oscillateurs. Les différents hamiltoniens sont

$$\begin{aligned} H_A &= \frac{P^2}{2M}, \\ H_R &= \sum_{\lambda} \left(\frac{P_{\lambda}^2}{2m_{\lambda}} + \frac{1}{2} \omega_{\lambda}^2 X_{\lambda}^2 \right) = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \\ V &= \frac{1}{2} \kappa X^2 + XR = H_{CT} + X \left[- \sum_{\lambda} g_{\lambda} (a_{\lambda} + a_{\lambda}^{\dagger}) \right] \end{aligned} \quad (17.79)$$

où les coefficients g_{λ} et κ valent

$$g_{\lambda} = \sqrt{\hbar m_{\lambda} \omega_{\lambda}^3 / 2} \quad \kappa = \sum_{\lambda} m_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 \quad (17.80)$$

A est ici l'opérateur position X de la particule brownienne, et CT désigne un « contre-terme », ainsi appelé pour des raisons qui seront explicitées ci-dessous ; nous avons négligé l'énergie de point zéro des oscillateurs. Il semble que l'invariance par translation ait été brisée dans (17.79), mais ceci est bien sûr un artefact de la décomposition : ainsi que nous le verrons ultérieurement, la contribution du contre-terme non invariant par translation

$$H_{CT} = \frac{1}{2} \kappa X^2 \quad (17.81)$$

compense exactement une autre contribution provenant de l'interaction, d'où la dénomination « contre-terme ». La situation ressemble superficiellement à celle étudiée dans le § 17.3.3, mais il y a une différence importante. Dans le cas de l'optique quantique, le temps de relaxation $1/\Gamma = \tau$ doit être grand par rapport au temps d'évolution cohérente de \mathcal{A} : $\tau \gg |\omega - \omega'|^{-1} = \tau_A$, où ω et ω' sont deux fréquences de Bohr typiques (exercice 17.4.8). La condition de validité de l'équation pilote pour le mouvement brownien est au contraire $\tau_A \gg \tau_*$, où par exemple $\tau_A \sim \Omega^{-1}$ si la particule est soumise à un potentiel harmonique $M\Omega^2 X^2/2$: le temps typique de l'évolution cohérente doit être grand par rapport à la fréquence typique du réservoir. Ces conditions de validité sont résumées dans le tableau ci-dessous

optique quantique	$\tau_* \ll \tau, \tau_A \ll \tau$
mouvement brownien	$\tau_* \ll \tau, \tau_* \ll \tau_A$

Il est commode pour des calculs analytiques simples (mais pas indispensable en principe) de prendre une limite haute température, où

$$n_{\lambda} \simeq n_{\lambda} + 1 \simeq \frac{k_B T}{\hbar \omega_{\lambda}} \gg 1$$

Nous rappelons que les fréquences ω_λ sont très resserrées sur un intervalle $\sim 1/\tau_*$, et les sommes sur λ peuvent être remplacées par des intégrales. Les résultats s'expriment en terme de la fonction spectrale $J(\omega)$

$$J(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \delta(\omega - \omega_{\lambda}) = \frac{\pi}{2} \sum_{\lambda} m_{\lambda} \omega_{\lambda}^3 \delta(\omega - \omega_{\lambda}) \quad (17.82)$$

Nous déduisons de (17.52) et (17.82) les expressions de la partie réelle $C(t')$ et de la partie imaginaire $\chi(t')$ de la fonction d'autocorrélation $g(t')$:

$$\begin{aligned} C(t') &= \frac{2k_{\text{B}}T}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos \omega t', \\ \chi(t') &= \frac{2\theta(t')}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \sin \omega t' = -\frac{\theta(t')}{k_{\text{B}}T} \frac{dC}{dt'} \end{aligned} \quad (17.83)$$

Il nous faut maintenant choisir une forme spécifique de la fonction spectrale $J(\omega)$. La fréquence caractéristique typique pour $J(\omega)$ étant $\omega_* = 1/\tau_*$, nous choisissons une fonction $J(\omega)$ s'annulant pour $\omega \gg \omega_*$: ω_* joue le rôle d'un cut-off en fréquence. La forme la plus commode pour les calculs analytiques est celle de Caldeira and Leggett [1983]

$$J(\omega) = M\gamma\omega\theta(\omega_* - \omega) \quad (17.84)$$

L'analyse dimensionnelle montre que γ a les dimensions d'une fréquence, et donc d'un coefficient de frottement, comme dans $\dot{v} = -\gamma v$. Le choix $J(\omega) \propto \omega$ assure que le coefficient de frottement est indépendant de la fréquence. Nous nous attendons à ce que les résultats ne dépendent pas qualitativement de la forme précise de $J(\omega)$, la seule caractéristique importante étant l'existence d'un cut-off en fréquence ω_* . Dans l'exercice 17.4.10, on montre que des résultats équivalents sont obtenus en utilisant

$$J(\omega) = M\gamma\omega \left(\frac{\omega_*^2}{\omega^2 + \omega_*^2} \right) \quad (17.85)$$

On peut relier γ à un coefficient de diffusion D dans l'espace des impulsions grâce à la relation d'Einstein (15.154) $D = M\gamma k_{\text{B}}T$. Avec le choix (17.84), $C(t')$ a une forme analytique simple

$$C(t') = 2k_{\text{B}}TM\gamma \frac{\sin \omega_* t'}{\pi t'} \quad (17.86)$$

La fonction $\sin \omega_* t' / \pi t'$ exhibe un pic de hauteur ω_*/M et de largeur $\sim 1/\omega_* = \tau_*$ à $t' = 0$, et elle devient une fonction delta dans la limite $\omega_* \rightarrow \infty$. Nous appellerons $\delta_*(t')$ une « fonction delta étalée » sur un intervalle de largeur de largeur $\sim \tau_*$, et écrivons $g(t)$ comme

$$g(t) = 2D\delta_*(t) + i\hbar\omega\delta'_*(t) \quad (17.87)$$

Après ces préliminaires, nous sommes maintenant prêts à donner la forme de l'équation pilote (17.62), qui devient dans le cas présent

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \rho \right] - \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \kappa X^2, \rho \right] - \frac{1}{\hbar^2} (E\rho X + X\rho E^\dagger - XE\rho - \rho E^\dagger X) \quad (17.88)$$

avec

$$E = \int_0^\infty g(t') X(-t') dt' \quad (17.89)$$

L'opérateur $X(t)$ est donné dans le point de vue de l'interaction par

$$X(t') = \exp \left[\frac{iP^2 t'}{2M\hbar} \right] X \exp \left[-\frac{iP^2 t'}{2M\hbar} \right] = X + \frac{Pt'}{M} \quad (17.90)$$

un résultat que l'on déduit immédiatement de (8.67). Les termes proportionnels à D dans le membre de droite de l'équation pilote font intervenir l'intégrale

$$\begin{aligned} \frac{2D}{\hbar^2} \int_0^\infty \delta_*(t') \left[\left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \rho(t) X + X \rho(t) \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \right. \\ \left. - X \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \rho(t) - \rho(t) \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) X \right] dt' \end{aligned}$$

En raison de la largeur étroite de la fonction $\delta_*(t')$, les termes proportionnels à Pt'/M sont négligeables, et il nous reste le double commutateur

$$-\frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \rho(t)]]. \quad (17.91)$$

Le terme proportionnel à $M\gamma$ est

$$\begin{aligned} \frac{iM\gamma}{\hbar} \int_0^\infty \delta'_*(t') \left[\left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \rho(t) X + X \rho(t) \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \right. \\ \left. - X \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) \rho(t) - \rho(t) \left(X - \frac{Pt'}{M} \right) X \right] dt' \end{aligned} \quad (17.92)$$

Les deux intégrales dont nous avons besoin sont

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \int_0^\infty \delta'_*(t') t' dt' &= -\frac{1}{2}, \\ \text{(ii)} \quad \int_0^\infty \delta'_*(t') dt' &= \int_0^\infty dt' \frac{d}{dt'} \left(\frac{\sin \omega_* t'}{\pi t'} \right) = -\frac{\omega_*}{\pi}. \end{aligned} \quad (17.93)$$

L'équation (17.92) peut être écrite comme la somme de deux termes. Le premier, qui dépend de (i), est

$$\frac{\gamma}{2i\hbar} [X, \{P, \rho(t)\}] \quad (17.94)$$

et le second, qui dépend de (ii) est

$$\frac{iM\gamma\omega_*}{\pi\hbar} [X^2, \rho(t)] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \kappa X^2, \rho(t) \right] \quad (17.95)$$

car dans le modèle de Caldeira-Leggett κ est donné par

$$\kappa = \sum_{\lambda} m_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) = \frac{2M\gamma\omega_*}{\pi}$$

Dans ces conditions, la contribution de H_{CT} (17.81) à l'évolution de l'opérateur statistique compense exactement (17.95). Il suffit maintenant de reporter (17.91) et (17.94) dans (17.88) pour obtenir le résultat final, qui est une équation pilote pour une particule brownienne quantique

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{P^2}{2M}, \rho(t) \right] - \frac{i\gamma}{2\hbar} [X, \{P, \rho(t)\}] - \frac{D}{\hbar^2} [X, [X, \rho(t)]]} \quad (17.96)$$

L'équation (17.96) est un résultat fondamental de la théorie des systèmes quantiques ouverts. On observe que cette équation n'est pas du type de Lindblad; on peut néanmoins montrer qu'elle préserve la positivité de ρ et se ramener à une équation de Lindblad en ajoutant des termes négligeables dans une limite de haute température¹⁵. Les trois termes du membre de gauche de (17.96) s'interprètent comme suit :

1. Le premier terme est un terme d'évolution libre, $(-i/\hbar)[H_A, \rho(t)]$.
2. Le deuxième terme est un terme de frottement.
3. Le troisième terme correspond à une diffusion, et c'est ce terme qui conduit à la décohérence.

Il est possible de déterminer la solution du modèle de Caldeira-Leggett lorsque la particule est soumise à un potentiel harmonique $M\Omega^2 X^2/2$. On peut en fait écrire une solution exacte¹⁶ au temps t

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} M\Omega^2(t) X^2, \rho(t) \right] - \frac{i\gamma(t)}{2\hbar} [X, \{P, \rho(t)\}] \\ & - \frac{D(t)}{\hbar^2} [X, [X, \rho(t)]] - \frac{f(t)}{\hbar} [X, [P, \rho]] \end{aligned} \quad (17.97)$$

Le dernier terme est appelé terme de diffusion anormale, qui est négligeable dans la limite des temps longs. Les fonctions $\Omega(t)$, $D(t)$, $\gamma(t)$ et $f(t)$ s'expriment sous forme d'intégrales que l'on doit en général calculer numériquement, sauf lorsque $t \rightarrow \infty$, auquel cas une expression analytique est parfois disponible.

15. Breuer et Petruccione [2002], chapitre 4.

16. Le problème étant linéaire (les équations du mouvement sont linéaires), il n'est pas surprenant que l'on sache écrire une solution exacte qui s'obtient par des méthodes d'intégrale de chemin.

17.3.5 Décohérence d'un paquet d'ondes

Supposons que nous partions d'une superposition de deux paquets d'ondes gaussiens centrés à $x = \pm a$ et de largeur $\sigma \ll a$

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \left(\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\right] \right) \quad (17.98)$$

La transformée de Fourier donne la distribution de probabilité en impulsion

$$|\tilde{\varphi}(p)|^2 = \frac{2\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right) \cos^2 \frac{pa}{\hbar} \quad (17.99)$$

On observe des oscillations rapides de période $\pi\hbar/a \ll \hbar/\sigma$ à l'intérieur d'une enveloppe gaussienne, en raison de la cohérence des deux paquets d'ondes. Avant d'exploiter (17.96), donnons une explication qualitative de la décohérence. La particule brownienne subit un grand nombre de collisions avec les particules légères (molécules) dans le bain thermique. En raison de ces collisions, la particule brownienne effectue une marche au hasard dans l'espace des impulsions¹⁷ avec un coefficient de diffusion D (15.154), et la dispersion en impulsion Δp est donnée par

$$\Delta p^2 = 2Dt. \quad (17.100)$$

Chacun des pics dans $|\tilde{\varphi}(p)|^2$ s'élargit sous l'effet des collisions, et ces pics vont être complètement brouillés au bout d'un temps τ_{dec} que l'on évalue à partir de (17.100)

$$\Delta p^2 \sim \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^2 = 2D\tau_{\text{dec}},$$

ou encore

$$\tau_{\text{dec}} \sim \frac{\hbar^2}{Da^2}. \quad (17.101)$$

Pour étudier quantitativement l'évolution du paquet d'ondes, on se reporte à (17.96), en utilisant le fait que les temps courts sont dominés par la diffusion

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x | \rho(t) | x' \rangle \simeq -\frac{D}{\hbar^2} (x-x')^2 \langle x | \rho(t) | x' \rangle$$

Le temps de décohérence se lit directement sur cette équation

$$\tau_{\text{dec}} \simeq \frac{\hbar^2}{4Da^2} \sim \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\lambda_T}{a} \right)^2 \quad (17.102)$$

Le coefficient de diffusion est $D = M\gamma k_B T$ (15.154) et λ_T est la longueur d'onde thermique (14.36)

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi M k_B T}}$$

17. Que l'on ne doit pas confondre avec une diffusion dans l'espace des positions!

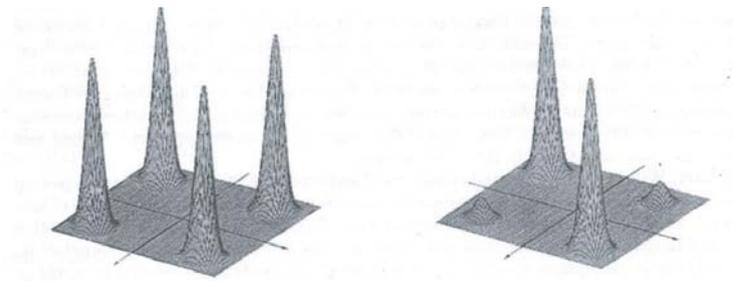


FIG. 17.3 – Évolution temporelle de la matrice statistique pour la superposition de deux paquets d’ondes. Figure de gauche : $t = 0$. Figure de droite : $t \gg \tau_{\text{dec}}$. D’après Zurek [1991], reproduit avec l’aimable autorisation de W. Zurek.

La figure 17.3 montre l’évolution de la matrice statistique : à $t = 0$, on observe des pics à $x = \pm a$ et $x' = \pm a$, mais pour $t \gg \tau_{\text{dec}}$, les pics à $\{x = a, x' = -a\}$ et $\{x = -a, x' = a\}$ ont disparu. Il reste un mélange statistique de deux paquets d’ondes : la décohérence a « transformé » la superposition linéaire en mélange incohérent¹⁸. Les états propres de l’opérateur position X ne s’intriquent pas avec l’environnement : ce sont des états pointeurs.

L’expérience d’interférences avec des molécules lourdes (§ 15.3.5) illustre cette décohérence : on constate sur la figure 15.2 (partie supérieure) que les interférences sont de plus en plus brouillées quand la pression du gaz résiduel augmente. Les molécules lourdes effectuent une marche brownienne dans le gaz, et les paquets d’ondes émis par les deux fentes d’Young perdent leur cohérence.

17.4 Exercices

17.4.1 La transposition n’est pas complètement positive

Soit \mathcal{H}_A et \mathcal{H}_B deux espaces de Hilbert de dimension d . Considérons l’état intriqué de façon maximale

$$|\varphi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N |m_A \otimes m'_B\rangle$$

et l’opérateur statistique correspondant $\rho_{AB} = |\varphi_{AB}\rangle\langle\varphi_{AB}|$. L’opérateur de transposition \mathcal{T}_A dans \mathcal{H}_A est défini par son action sur ρ_{AB} :

$$(\mathcal{T}_A \otimes I_B)\rho_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{m,n} (|n\rangle\langle m|)_A \otimes (|m'\rangle\langle n'|)_B$$

Si l’on définit $\mathcal{N} = N\rho_{AB}$, montrer que l’application de \mathcal{N} sur un vecteur $|\varphi_A \otimes \psi_B\rangle$ a pour résultat

$$\mathcal{N}|\varphi_A \otimes \psi_B\rangle = |\psi_A \otimes \varphi_B\rangle$$

¹⁸. Les guillemets rappellent qu’il s’agit d’un mélange impropre, voir la discussion du § 6.4.4.

Montrer que $\mathcal{N}^2 = 1$. Écrire la forme explicite de \mathcal{N} dans le cas $d = 2$: la matrice correspondante est appelée « matrice SWAP ». Montrer, d'abord dans le cas $d = 2$ et ensuite dans le cas général, que \mathcal{N} doit avoir des valeurs propres négatives.

17.4.2 Représentation de Kraus pour le modèle d'émission spontanée

1. On reprend le modèle pour l'émission spontanée du § 6.4.2, la loi pour les sauts quantiques étant

$$\begin{aligned} U_{AE}|0_A \otimes 0_E\rangle &= |0_A \otimes 0_E\rangle, \\ U_{AE}|1_A \otimes 0_E\rangle &= \sqrt{1-p} |1_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{p} |0_A \otimes 1_E\rangle \end{aligned}$$

Écrire les opérateurs de Kraus M_0 et M_1 , en déduire $\mathcal{K}(\rho)$ et retrouver la loi d'évolution (6.87) pour les populations et les cohérences.

2. Partant de (17.15), utiliser la méthode du § 6.4.2 pour obtenir directement $\mathcal{K}(\rho)$.

17.4.3 Modèle de dépolarisation

Dans cet exercice \mathcal{H}_E est de dimension 4 et une base orthonormée est formée par un état de référence $|0_E\rangle$ et trois états $|i_E\rangle$, $i = 1, 2, 3$; \mathcal{H}_A est de dimension 2. La loi pour les sauts quantiques est définie par

$$U_{AE}|\varphi_A \otimes 0_E\rangle = \sqrt{1-p} |\varphi_A \otimes 0_E\rangle + \sqrt{\frac{p}{3}} \left[\sum_{i=1}^3 (\sigma_{iA} \otimes I_E) |\varphi_A \otimes i_E\rangle \right]$$

Montrer que les opérateurs de Kraus sont

$$M_0 = \sqrt{1-p} I, \quad M_i = \sqrt{\frac{p}{3}} \sigma_i$$

Vérifier $\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} = I$ et calculer $\mathcal{K}(\rho)$. Montrer que l'évolution peut s'écrire en fonction du vecteur de Bloch : si

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b})$$

alors

$$\mathcal{K}(\rho) = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b}') \quad \vec{b}' = \left(1 - \frac{4p}{3} \right) \vec{b}$$

Pourquoi peut-on parler de modèle pour la dépolarisation ?

17.4.4 Amortissements de phase et d'amplitude

1. Examinons le modèle suivant d'amortissement simultané de phase et d'amplitude pour un système à deux niveaux. Les trois opérateurs de Kraus sont donnés par

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\lambda-\gamma} \end{pmatrix} \quad M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda} \end{pmatrix}$$

Vérifier que

$$\sum_{\mu=0}^2 M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} = I$$

Quelles sont les restrictions sur λ et γ ?

2. Montrer que l'opérateur statistique transformé $\mathcal{K}[\rho]$ est

$$\begin{pmatrix} \rho_{00} + \gamma\rho_{11} & \rho_{01}\sqrt{1-\lambda-\gamma} \\ \rho_{10}\sqrt{1-\lambda-\gamma} & \rho_{11}(1-\gamma) \end{pmatrix}$$

3. Quel est le résultat après n itérations de l'opérateur de Kraus ? Posant

$$\gamma = \frac{\Gamma t}{n}, \quad \lambda = \frac{\Lambda t}{n}, \quad n \gg 1$$

montrer que

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 1 - \rho_{11}e^{-\Gamma t} & \rho_{01}e^{-(\Lambda+\Gamma)t/2} \\ \rho_{10}e^{-(\Lambda+\Gamma)t/2} & \rho_{11}e^{-\Gamma t} \end{pmatrix}$$

Quels sont les temps de relaxation T_1 and T_2 ? Vérifier que $T_2 \leq 2T_1$.

17.4.5 Détails de la preuve de l'équation pilote

1. Vérifier que si $\rho_{AR}(0) = \rho_A(0) \otimes \rho_R(0)$, alors

$$\text{Tr}_{\mathcal{R}} [W(t), \rho_{AR}(0)] = [A(t), \rho_A(0)] \text{Tr} (R(t)\rho_R(0)) = 0$$

2. Compléter les détails du calcul conduisant à (17.62). Suggestion

$$g(t-t') = \text{Tr} [R(t)R(t')\rho_R(0)] = \text{Tr} [R(t')\rho_R(0)R(t)]$$

Pour le passage du point de vue de l'interaction à celui de Schrödinger, utiliser

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_A, \rho] + e^{iH_A t/\hbar} \frac{d\tilde{\rho}}{dt} e^{-iH_A t/\hbar}$$

17.4.6 Superposition d'états cohérents

Nous voulons étudier la décohérence d'une superposition de deux états cohérents dans le modèle d'oscillateur harmonique amorti de la section 17.2.3. L'évolution temporelle de l'opérateur statistique est donné par (17.36) :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho] + \frac{1}{2} \Gamma [2a\rho a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho\}]$$

Dans cet exercice, il est instructif de conserver la partie H_0 de l'évolution.

1. Considérons deux états propres $|n\rangle$ du hamiltonien libre $H_0 = \omega_0 a^\dagger a$, et soit ρ_{nm} les éléments de matrice $\langle n|\rho|m\rangle$ de ρ . Montrer que les éléments de matrice diagonaux ρ_{nn} obéissent à

$$\frac{d\rho_{nn}}{dt} = -n\Gamma\rho_{nn} + (n+1)\Gamma\rho_{n+1,n+1}$$

Donner l'interprétation physique des deux termes de cette équation. Donner des arguments permettant d'interpréter Γ comme le taux d'émission d'un photon (ou d'un phonon). Quelle est l'équation d'évolution des cohérences $\rho_{n+1,n}$?

2. Introduisons la fonction $C(\lambda, \lambda^*; t)$ par

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \text{Tr} (\rho e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a})$$

Montrer que les dérivées partielles par rapport à λ ont l'effet suivant à l'intérieur de la trace

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \rightarrow \rho a^\dagger, \quad \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} - \lambda^* \right) \rightarrow a^\dagger \rho$$

Suggestion : utiliser l'identité (2.55) pour commuter $\exp(\lambda a^\dagger)$ et $\exp(-\lambda^* a)$. Quelles sont les identités correspondantes pour $\partial/\partial \lambda^*$?

3. Montrer que $C(\lambda, \lambda^*; t)$ obéit à l'équation aux dérivées partielles

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - i\omega_0 \right) \frac{\partial}{\partial \ln \lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + i\omega_0 \right) \frac{\partial}{\partial \ln \lambda^*} \right] C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

Cette équation se résout par la méthode des caractéristiques. La solution est (à démontrer ou à vérifier)

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = C_0(\lambda \exp[-(\Gamma/2 - i\omega_0)t], \lambda^* \exp[-(\Gamma/2 + i\omega_0)t])$$

avec

$$C(\lambda, \lambda^*; t = 0) = C_0(\lambda, \lambda^*)$$

4. Supposons que l'état initial à $t = 0$ soit un état cohérent $|z\rangle$

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{za^\dagger} |0\rangle$$

Montrer que dans ce cas

$$C_0 = \exp(\lambda z^* - \lambda^* z),$$

et que cet état est devenu au temps t l'état cohérent $|z(t)\rangle$ avec

$$z(t) = z e^{-i\omega_0 t} e^{-\Gamma t/2}.$$

En conséquence, un état cohérent reste un état cohérent quand $\Gamma \neq 0$ (comparer avec (11.38)), mais $|z(t)| \rightarrow 0$ pour $t \gg 1/\Gamma$. Dans le plan complexe, $z(t)$ décroît en spirale vers l'origine. Comme $\Gamma \ll \omega_0$, on observe un grand nombre de tours autour de l'origine.

5. Considérons maintenant une superposition de deux états cohérents à $t = 0$:

$$|\Phi\rangle = c_1 |z_1\rangle + c_2 |z_2\rangle$$

Montrer qu'à $t = 0$

$$C_{12}(t = 0) = \text{Tr} \left(|z_1\rangle \langle z_2| e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} \right) = \langle z_2 | z_1 \rangle e^{\lambda z_2^*} e^{-\lambda^* z_1}$$

Quelle est l'interprétation de $C_{12}(t)$? Définissons

$$\eta(t) = \frac{\langle z_2 | z_1 \rangle}{\langle z_2(t) | z_1(t) \rangle}$$

et écrivons $C_{12}(t)$ sous la forme

$$C_{12}(t) = \eta(t) \langle z_2(t) | z_1(t) \rangle e^{\lambda z_2^*(t)} e^{-\lambda^* z_1(t)}$$

Montrer que

$$|\eta(t)| = \exp \left[-\frac{1}{2} |z_1 - z_2|^2 (1 - e^{-\gamma t}) \right] \simeq \exp \left[-\frac{\Gamma}{2} |z_1 - z_2|^2 t \right]$$

où la dernière expression est valable pour $\Gamma t \ll 1$. Le temps de décohérence est donc

$$\tau_{\text{dec}} = \frac{2}{\Gamma|z_1 - z_2|^2}$$

6. Choisissons $z_1 = 0$ (état fondamental de l'oscillateur) et $z_2 = z$. D'après la question 1, le temps moyen pour l'émission d'un photon est $\sim (\Gamma|z_2|^2)^{-1}$. À partir de la trace sur l'environnement (ici le champ de rayonnement) justifier le fait que la cohérence entre les composantes $z_1 = 0$ et z de $|\Phi\rangle$ est perdue après l'émission spontanée d'un seul photon.

17.4.7 Dissipation dans un système à deux niveaux

1. Partant de (17.68), déduire les équations d'évolution pour les éléments de matrice de l'opérateur statistique ρ :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{00}}{dt} &= (G_+ + G_+^*)\rho_{11} - (G_- + G_-^*)\rho_{00} \\ \frac{d\rho_{01}}{dt} &= i\omega_0\rho_{01} - (G_+^* + G_-)\rho_{01} + (G_+ + G_-^*)\rho_{10} \end{aligned}$$

La dernière ligne de (17.68) ne contribue donc pas à l'évolution des populations.

2. Montrer qu'à l'approximation séculaire on peut négliger le terme $(G_+ + G_-^*)\rho_{10}$ dans l'évolution de ρ_{01} . Dans le cadre de cette approximation, récrire les équations d'évolution en terme de Γ_{\pm} and Δ_{\pm} (17.71)–(17.72). Vérifier que le taux de relaxation est $\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_-$ pour les populations et $\Gamma/2$ pour les cohérences.

3. À partir des expressions de Γ_+ et Γ_- , montrer qu'à l'équilibre les populations des niveaux $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont

$$p_0 = \frac{\Gamma_-}{\Gamma} \quad p_1 = \frac{\Gamma_+}{\Gamma}$$

et que leur rapport est donné par la loi de Boltzmann

$$\frac{p_1}{p_0} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)$$

17.4.8 Approximation séculaire et équation de Lindblad

1. On écrit l'interaction système-réservoir (17.47) sous la forme générale¹⁹

$$W = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes R_{\alpha}$$

Partons de la représentation spectrale de H_A

$$H_A = \sum_{\varepsilon} \varepsilon \mathcal{P}(\varepsilon)$$

où $\mathcal{P}(\varepsilon)$ est le projecteur sur le sous-espace de la valeur propre ε pour définir l'opérateur $A_{\alpha}(\omega)$ par

$$A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \mathcal{P}(\varepsilon) A_{\alpha} \mathcal{P}(\varepsilon')$$

19. Breuer et Petruccione [2002], chapitre 3.

Montrer que

$$[H_A, A_\alpha(\omega)] = -\hbar\omega A_\alpha(\omega)$$

Les opérateurs $A_\alpha(\omega)$ sont les « opérateurs propres » de H_A . Le commutateur ci-dessus généralise

$$\left[-\frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_3, \sigma_\pm\right] = \mp\hbar\omega\sigma_\pm \quad \text{ou} \quad [\hbar\omega a^\dagger a, a] = -\hbar\omega a$$

2. On généralise (17.66) en écrivant

$$G_+^{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty dt' \text{Tr} [R_\alpha(t)R_\beta(t-t')\rho_R(0)] e^{i\omega t'}$$

Montrer que l'équation d'évolution de $\tilde{\rho}$ est

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)t} G_+^{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(t)A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega')A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(t) \right] + \text{h.c.}$$

L'approximation séculaire consiste à omettre tous les termes tels que $\omega \neq \omega'$.

3. Une fois faite l'approximation séculaire, montrer que les populations $\rho_{nn}(t) = \mathbf{p}(n, t)$ vérifient l'équation de Pauli à condition que le spectre de H_A soit non dégénéré

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}(n, t) = \sum_m [W(n|m)\mathbf{p}(m, t) - W(m|n)\mathbf{p}(n, t)]$$

Donner l'expression des coefficients $W(m|n)$.

17.4.9 Modèles simples de relaxation

1. Dans le premier modèle, un atome à deux niveaux \mathcal{A} est préparé dans une superposition des états fondamental ($|0_A\rangle$) et excité ($|1_A\rangle$) au temps $t = 0$. Le champ électromagnétique est supposé dans son état fondamental (le vide) $|0_E\rangle$, de sorte que le vecteur d'état initial est

$$|\Psi(t=0)\rangle = (\lambda|0_A\rangle + \mu|1_A\rangle) \otimes |0_E\rangle, \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

Guidés par la méthode de Wigner-Weisskopf (Annexe B), nous écrivons le vecteur d'état au temps t comme

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda|0_A \otimes 0_E\rangle + \alpha\mu|0_A \otimes 1_E\rangle + \mu e^{-(i\omega_0 + \Gamma/2)t}|1_A \otimes 0_E\rangle$$

où $|1_A\rangle$ est un état à un photon normalisé. Utiliser la conservation de la norme $\|\Psi(t)\|^2 = 1$ pour calculer α et déduire de ce calcul les éléments de matrice de l'opérateur statistique au temps t . Comparer avec les modèles d'amortissement de la section 17.2. et trouver les opérateurs de Kraus. Montrer que $T_2 = 2T_1$.

2. Dans le second modèle, l'état $|1\rangle$ est supposé stable, mais la fréquence de résonance dépend du temps. Ceci sera le cas par exemple en RMN, où un spin 1/2 est soumis à un champ magnétique fluctuant $\vec{B}_0(t)$. Le vecteur d'état du spin est au temps t

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda(t)|0\rangle + \mu(t)|1\rangle$$

avec $\lambda(t)$ et $\mu(t)$ donnés par

$$i\dot{\lambda}(t) = -\frac{1}{2}\omega_0(t)\lambda(t) \quad i\dot{\mu}(t) = \frac{1}{2}\omega_0(t)\mu(t) \quad \lambda(0) = \lambda_0, \quad \mu(0) = \mu_0$$

La solution est

$$\lambda(t) = \lambda_0 \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t \omega_0(t') dt'\right) \quad \mu(t) = \mu_0 \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^t \omega_0(t') dt'\right)$$

On suppose que $\omega_0(t)$ est une fonction aléatoire gaussienne dont la fonction d'autocorrélation connexe est

$$C(t') = \langle \omega_0(t+t')\omega_0(t) \rangle - \langle \omega_0 \rangle^2$$

où $\langle \bullet \rangle$ est une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations de la fonction aléatoire. Supposant aussi que

$$C(t') \simeq C \exp\left(-\frac{|t'|}{\tau}\right)$$

montrer que les populations ρ_{00} et ρ_{11} sont indépendantes du temps, mais que les cohérences sont données par

$$\rho_{01}(t) = \rho_{01}(t=0) e^{i\langle \omega_0 \rangle t} e^{-C\tau t}, \quad t \gg \tau.$$

17.4.10 Un autre choix pour la fonction spectrale $J(\omega)$

Au lieu de (17.84), on utilise un autre choix de fonction spectrale $J(\omega)$, à savoir

$$J(\omega) = M\gamma\omega \frac{\omega_*^2}{\omega^2 + \omega_*^2}$$

Montrer que la partie réelle $C(t)$ de la fonction d'autocorrélation est

$$C(t) = k_B T M \gamma \omega_* e^{-\omega_* |t|}$$

Montrer que toutes les étapes conduisant à (17.96) restent valables avec cette nouvelle fonction spectrale.

17.4.11 L'équation de Fokker-Planck-Kramers pour une particule brownienne

1. Dédurre de (17.96) l'équation aux dérivées partielles (Fokker-Planck-Kramers) pour la distribution de Wigner (12.116) $w(x, p; t)$:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial w}{\partial x} = \gamma \frac{\partial}{\partial p} [pw] + D \frac{\partial^2 w}{\partial p^2}$$

2. Intégrer sur x pour obtenir une équation de Fokker-Planck pour la densité de probabilité $w_p(p; t)$

$$\frac{\partial w_p}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial p} [pw_p] + D \frac{\partial^2 w_p}{\partial p^2}$$

Montrer que dans la limite des temps longs w_p est une distribution de Maxwell et retrouver la relation d'Einstein entre γ et $k_B T$.

17.5 Bibliographie

Ce chapitre s'est inspiré des sources suivantes : Peres [1993], chapitre 9, Preskill [1999], chapitre 3, Nielsen et Chuang [2000], chapitres 2 et 8, Dalibard [2003], Haroche et Raimond [2006], chapitre 4 et Breuer et Petruccione [2002], chapitres 3 et 4. Levitt [2001], chapitre 16 étudie les mécanismes de relaxation en RMN. Le concept de système quantique ouvert est largement utilisé en optique quantique : voir par exemple Carmichael [1993] ou Scully et Zubairy [1997]. Les effets de mémoire et le mouvement brownien sont étudiés en détail par exemple dans Foerster [1975], chapitres 1 à 6 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 9. Le modèle du § 17.3.4 a été proposé par Caldeira et Leggett [1983] ; voir également Cohen-Tannoudji *et al.* [1988], chapitre IV. On trouvera des références récentes sur le modèle de Caldeira-Leggett dans l'article de revue de Zurek [2003].

Appendice A

Théorème de Wigner et renversement du temps

DANS CET APPENDICE, nous allons donner la démonstration du théorème de Wigner énoncé au § 8.1.2 et examiner l'invariance par rapport au renversement du sens du temps (ou simplement renversement du temps), qui est particulière car l'opérateur qui réalise la symétrie dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} est antiunitaire, et non unitaire comme dans tous les cas que nous avons rencontrés jusqu'ici. Rappelons la définition du § 8.1.1 d'un rayon de l'espace de Hilbert : *un rayon est un vecteur à un facteur de phase près*. Deux vecteurs unitaires φ et $\bar{\varphi}$ qui diffèrent par un facteur de phase : $\varphi = \exp(i\alpha)\bar{\varphi}$ appartiennent à une même classe d'équivalence, qui est précisément un rayon $\tilde{\varphi}$ de \mathcal{H} . Comme le module du produit scalaire est indépendant du représentant dans la classe d'équivalence

$$|(\bar{\varphi}, \bar{\chi})| = |(\varphi, \chi)|$$

le *module* du produit scalaire de deux rayons $\tilde{\varphi}$ et $\tilde{\chi}$ est bien défini en choisissant deux représentants arbitraires dans chaque classe d'équivalence

$$|(\tilde{\varphi}, \tilde{\chi})| = |(\varphi, \chi)| \tag{A.1}$$

mais bien évidemment cela n'a pas de sens de parler du produit scalaire de deux rayons. Nous utilisons la notation (\bullet, \bullet) pour le produit scalaire, afin d'éviter les ambiguïtés de la notation de Dirac, qui seraient particulièrement gênantes dans cette annexe.

Soit dans \mathcal{H} une correspondance entre rayons

$$\tilde{\varphi} \rightarrow T\tilde{\varphi} \tag{A.2}$$

telle que le module du produit scalaire soit invariant

$$|(\tilde{\varphi}, \tilde{\chi})| = |(T\tilde{\varphi}, T\tilde{\chi})| \tag{A.3}$$

Le théorème de Wigner énonce qu'il est toujours possible de choisir les phases des vecteurs de telle sorte que la correspondance entre *rayons* devienne une correspondance entre *vecteurs*

$$\varphi \rightarrow U\varphi \quad |(U\varphi, U\chi)| = |(\varphi, \chi)| \quad (\text{A.4})$$

où la transformation U est soit linéaire unitaire

$$(U\varphi, U\chi) = (\varphi, \chi) \quad (\text{A.5})$$

soit antilinéaire unitaire (= antiunitaire)

$$(U\varphi, U\chi) = (\chi, \varphi) = (\varphi, \chi)^* \quad (\text{A.6})$$

A.1 Démonstration du théorème

Soit $\{\chi_i\}, i = 1, \dots, N$ une base orthonormée de \mathcal{H} supposé de dimension N , $(\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik}$. Nous allons faire jouer un rôle particulier au premier vecteur de base : *par convention les indices i et k varieront entre 1 et N et les indices j et l entre 2 et N* . Choisissons un représentant $\chi''_1 \equiv \chi'_1$ dans la classe de $T\tilde{\chi}_1$ et un représentant χ''_j dans la classe de $T\tilde{\chi}_j$, $j = 2, \dots, N$. D'après (A.3), l'ensemble $\{\chi''_1, \chi''_j\}$ forme aussi une base de \mathcal{H} car

$$|(\chi''_i, \chi''_k)| = |(\chi_i, \chi_k)| = \delta_{ik}$$

Considérons l'ensemble des vecteurs φ_j

$$\varphi_j = \chi_1 + \chi_j \quad j = 2, \dots, N \quad (\text{A.7})$$

et soit $T\tilde{\varphi}_j$ le transformé du rayon $\tilde{\varphi}_j$. Si φ''_j est un représentant de $T\tilde{\varphi}_j$, nous aurons

$$\begin{aligned} |(\chi'_1, \varphi''_j)| &= |(\chi_1, \varphi_j)| = 1 \\ |(\chi''_j, \varphi''_l)| &= |(\chi_j, \varphi_l)| = \delta_{jl} \end{aligned}$$

Un représentant φ''_j de $T\tilde{\varphi}_j$ aura donc des composantes uniquement suivant χ'_1 et χ''_j

$$\varphi''_j = c_j \chi'_1 + d_j \chi''_j$$

et ces composantes seront de module unité : $|c_j| = |d_j| = 1$. On peut maintenant choisir des représentants φ'_j et χ'_j

$$\varphi'_j = \frac{1}{c_j} \varphi''_j \quad \chi'_j = \frac{d_j}{c_j} \chi''_j \quad (\text{A.8})$$

de sorte que

$$\varphi'_j = \frac{1}{c_j} (c_j \chi'_1 + d_j \chi''_j) = \chi'_1 + \chi'_j \quad (\text{A.9})$$

Nous avons donc défini une application sur des vecteurs de \mathcal{H}

$$\chi_1 + \chi_j \rightarrow (\chi_1 + \chi_j)' = \chi'_1 + \chi'_j$$

telle que $\chi'_1 \in T\tilde{\chi}_1$, $\chi'_j \in T\tilde{\chi}_j$ et $\chi'_1 + \chi'_j \in T(\widetilde{\chi_1 + \chi_j})$. Essayons maintenant de déterminer s'il est possible qu'un vecteur arbitraire ψ se transforme suivant

$$\psi = \sum_{k=1}^N c_k \chi_k \rightarrow \psi' = \sum_{k=1}^N c'_k \chi'_k$$

Si une telle loi de transformation est valide, nous devons avoir d'une part

$$|c'_k| = |(\chi'_k, \psi')| = |(\chi_k, \psi)| = |c_k|$$

et d'autre part

$$(\chi_1 + \chi_j, \psi) = c_1 + c_j \quad (\chi'_1 + \chi'_j, \psi') = c'_1 + c'_j$$

ce qui implique, d'après (A.3), que

$$|c_1 + c_j| = |c'_1 + c'_j| \tag{A.10}$$

Les deux couples de nombres complexes (c_1, c_j) et (c'_1, c'_j) doivent être tels que $|c_1| = |c'_1|$ et $|c_j| = |c'_j|$ et de plus vérifier (A.10). Posons

$$\begin{aligned} c_1 &= |c_1| e^{i\theta_1} & c_j &= |c_j| e^{i\theta_j} \\ c'_1 &= |c'_1| e^{i\theta'_1} & c'_j &= |c'_j| e^{i\theta'_j} \end{aligned}$$

Les angles (θ_1, θ_j) et (θ'_1, θ'_j) sont liés par l'équation

$$\cos(\theta_1 - \theta_j) = \cos(\theta'_1 - \theta'_j) \tag{A.11}$$

qui a deux solutions

$$\theta_1 - \theta_j = \theta'_1 - \theta'_j \tag{A.12}$$

$$\theta_1 - \theta_j = -(\theta'_1 - \theta'_j) \tag{A.13}$$

Examinons le premier cas. On peut redéfinir la phase de ψ' de telle sorte que $c'_1 = c_1$ et donc $\theta'_1 = \theta_1$. Dans ce cas $\theta'_j = \theta_j$ et $c'_j = c_j$

$$\psi' = \sum_k c_k \chi'_k$$

Si l'on considère un autre vecteur $\eta = \sum_k d_k \chi_k$ avec à nouveau $d'_1 = d_1$, on aura

$$(\lambda\psi + \mu\eta)' = \sum_k (\lambda c_k + \mu d_k) \chi'_k = \lambda\psi' + \mu\eta'$$

Par un choix convenable des phases, la transformation T peut être choisie linéaire, et comme elle conserve le module du produit scalaire, elle est aussi unitaire : $T \rightarrow U$ avec $U^\dagger U = U U^\dagger = I$.

Dans le second cas on redéfinit la phase de ψ' de telle sorte que $c'_1 = c_1^*$. On a alors $c'_j = c_j^*$ et

$$\psi' = \sum_k c_k^* \chi'_k$$

Le transformé de $\lambda\psi + \mu\eta$ est alors

$$(\lambda\psi + \mu\eta)' = \left[\sum_k (\lambda c_k + \mu d_k) \chi_k \right]' = \lambda^* \psi' + \mu^* \eta' \quad (\text{A.14})$$

et la loi de transformation du produit scalaire est

$$(\psi', \eta') = (\psi, \eta)^* = (\eta, \psi) \quad (\text{A.15})$$

La transformation $T \rightarrow V$, où V est dite *antiunitaire* : elle est antilinéaire et conserve la norme.

La démonstration précédente est en fait incomplète : en effet il faudrait montrer que l'on ne peut pas avoir (A.12) pour c_j et (A.13) pour $c_l, l \neq j$. La vérification que ceci ne peut pas se produire est fastidieuse et laissée au lecteur¹ : il faut examiner le comportement du transformé d'un vecteur $\psi = \chi_1 + \chi_j + \chi_l$.

A.2 Renversement du sens du temps

En mécanique classique, l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(t))$$

est invariante par renversement du sens du temps $t \rightarrow -t$. Posons en effet $\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t)$

$$m \frac{d^2 \vec{r}'(t)}{dt^2} = m \frac{d^2 \vec{r}(-t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(-t)) = \vec{F}(\vec{r}'(t))$$

On constate que $\vec{r}'(t)$ obéit bien aux équations de Newton. La raison en est évidemment que ces équations ne dépendent que de la dérivée seconde par rapport au temps de \vec{r} et pas de la dérivée première². Une image intuitive

1. Voir Weinberg [1995], chapitre 2, qui détaille toutes les subtilités de la preuve.

2. Une équation du type oscillateur harmonique amorti

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} + m\omega^2 x = 0$$

n'est pas invariante par renversement du sens du temps, mais la force de viscosité $-\gamma\dot{x}$ est une force effective, représentant phénoménologiquement l'effet des collisions des molécules du fluide sur la particule de masse m .

du renversement du temps est la suivante : imaginons que nous suivions la trajectoire d'une particule de $t = -\infty$ à $t = 0$ et qu'à $t = 0$ nous renversons brutalement le sens de l'impulsion (ou de la vitesse) : $\vec{p}(0) \rightarrow -\vec{p}(0)$. Dans ces conditions la particule va « remonter sa trajectoire », elle repassera au temps t par la position qu'elle avait au temps $-t$ avec une impulsion opposée (figure A.1)

$$\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t) \quad \vec{p}'(-t) = -\vec{p}(t) \quad (\text{A.16})$$

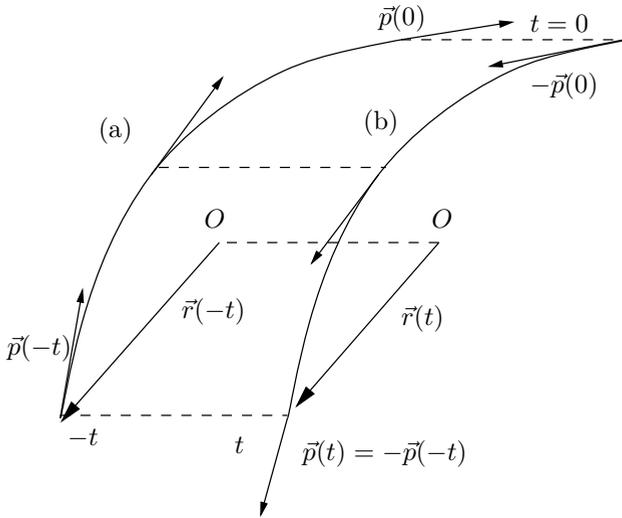


FIG. A.1 – Renversement du temps sur une trajectoire classique.

Le vecteur position \vec{r} est pair par renversement du temps, et \vec{p} est impair dans cette même opération. L'invariance par renversement du temps est appelée *microréversibilité*. Si l'on filme le mouvement de particules et que l'on projette le film à l'envers, la microréversibilité implique que la projection apparaît physiquement possible³. On sait que tel n'est pas le cas dans la vie courante, qui est fondamentalement irréversible, et il n'est pas évident⁴ de comprendre comment une dynamique réversible à l'échelle microscopique peut conduire à des phénomènes irréversibles à l'échelle macroscopique.

Revenons à la mécanique quantique, en appelant Θ l'opérateur qui réalise le renversement du temps dans \mathcal{H} . Cet opérateur doit transformer \vec{R} , \vec{P} et \vec{J} suivant

$$\Theta \vec{R} \Theta^{-1} = \vec{R} \quad \Theta \vec{P} \Theta^{-1} = -\vec{P} \quad \Theta \vec{J} \Theta^{-1} = -\vec{J} \quad (\text{A.17})$$

3. On notera l'analogie avec la conservation de la parité : l'image d'une expérience dans un miroir apparaît physiquement possible si la parité est conservée.

4. Comme l'ont montré les discussions acharnées de Boltzmann avec ses contradicteurs ! Voir par exemple Balian[1991], chapitre 15 ou Le Bellac *et al.* [2004], chapitre 2.

En effet \vec{J} doit se transformer comme $\vec{R} \times \vec{P}$, qui est impair par renversement du temps : le moment angulaire définit un sens de rotation qui est inversé par renversement du temps. L'examen de la transformation par Θ des relations de commutation canoniques montre que Θ doit être antiunitaire. Calculons de deux façons différentes un élément de matrice du commutateur $[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I$

$$\begin{aligned} (\Theta\varphi, \Theta[X_i, P_j]\psi) &= (\Theta\varphi, \Theta i\hbar\delta_{ij}I\psi) = \delta_{ij}(\varphi, i\hbar\psi)^* = -i\hbar\delta_{ij}(\varphi, \psi)^* \\ &= (\Theta\varphi, \Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1}\Theta\psi) = (\Theta\varphi, -i\hbar\delta_{ij}I\Theta\psi) = -i\hbar\delta_{ij}(\varphi, \psi)^* \end{aligned}$$

où nous avons utilisé dans la seconde ligne les lois de transformation (A.17) de X_i et P_j

$$\Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1} = -[X_i, P_j]$$

Les deux lignes de l'équation précédente sont compatibles, ce qui ne serait pas le cas si la transformation Θ était unitaire.

Il existe un autre argument très instructif prouvant le caractère antiunitaire de Θ . Soit $\varphi(t)$ le vecteur d'état d'un système quantique au temps t , $\varphi = \varphi(t=0)$ son état au temps $t=0$

$$\varphi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)\varphi$$

L'invariance par rapport au renversement du temps implique que l'état transformé de $\varphi(-t)$ par renversement du temps, $\Theta\varphi(-t)$, coïncide avec l'état obtenu par évolution temporelle de $\Theta\varphi(0)$

$$\Theta\varphi(-t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)\Theta\varphi$$

et comme les équations sont valables pour tout φ

$$\Theta \exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)\Theta \quad (\text{A.18})$$

Si Θ était unitaire, cela impliquerait que

$$\Theta H = -H\Theta$$

et à tout vecteur propre φ_E de H d'énergie E correspondrait un vecteur propre $\Theta\varphi_E$ avec une énergie $-E$. Dans ces conditions l'énergie ne serait pas bornée inférieurement et il existerait une instabilité fondamentale. Si au contraire Θ est antiunitaire, grâce à

$$\Theta iH = -i\Theta H$$

l'équation (A.18) implique

$$\Theta H = H\Theta \quad \text{ou} \quad \Theta H\Theta^{-1} = H \quad (\text{A.19})$$

Cette dernière équation traduit l'invariance de H par renversement du sens du temps. Cependant, contrairement à l'opérateur parité Π , Θ ne conduit pas à une grandeur conservée, car l'équation (8.17) implique que l'opérateur A soit hermitien, ce qui n'est pas le cas de Θ . On sait actuellement que toutes les interactions fondamentales de la physique sont invariantes par renversement du temps, sauf une interaction extrêmement faible, dont on ne voit les effets que dans le système de mésons $K^0 - \overline{K}^0$ (exercice 4.4.8), et que l'on a aussi observée tout récemment dans le système de mésons B , formés d'un quark ordinaire et d'un antiquark b (ou l'inverse).

Un double renversement du temps n'a évidemment aucun effet, et l'état $\Theta^2\varphi$ est équivalent à φ , $\Theta^2 = cI$, où c est un facteur de phase. La chaîne d'égalités

$$(\Theta\varphi_a, \varphi_b) = (\Theta\varphi_b, \Theta^2\varphi_a) = c(\Theta\varphi_b, \varphi_a) = c(\Theta\varphi_a, \Theta^2\varphi_b) = c^2(\Theta\varphi_a, \varphi_b)$$

montre que $c^2 = 1$, et donc $c = \pm 1$. Dans le cas où $c = -1$, le choix $\varphi_a = \varphi_b$ dans l'équation précédente entraîne

$$(\Theta\varphi_a, \varphi_a) = 0 \tag{A.20}$$

Si $c = -1$ et que H est invariant par renversement du temps, les états propres de H peuvent être rangés en paires d'états dégénérés par renversement du temps. Soit en effet φ un vecteur propre de $H : H\varphi = E\varphi$. Alors

$$H(\Theta\varphi) = \Theta(H\varphi) = E(\Theta\varphi)$$

et $\Theta\varphi$ est vecteur propre de H avec la valeur propre E : si $(\Theta\varphi, \varphi) = 0$, il existe (au moins) deux états propres de H avec la valeur propre E . Cette propriété est appelée *dégénérescence de Kramers*.

Compte tenu des propriétés de transformation de \vec{J} (A.17), on doit avoir

$$\Theta|jm\rangle = e^{i\alpha} (-1)^{j-m} |j, -m\rangle \tag{A.21}$$

où, par application de J_+ et de J_- on montre que α peut dépendre de j , mais non de m . On en déduit, en utilisant l'antilinearité de Θ

$$\Theta^2|jm\rangle = (-1)^{2j} |jm\rangle \tag{A.22}$$

et $\Theta^2 = I$ si j est entier, $\Theta^2 = -I$ si j est demi-entier. La dégénérescence de Kramers entraîne alors qu'un système avec un nombre impair d'électrons possède des niveaux d'énergie doublement dégénérés en l'absence de champ magnétique. La présence d'un champ magnétique brise l'invariance par renversement du sens du temps, car pour respecter cette invariance, il faudrait inverser le sens des courants qui produisent ce champ : la raison pour laquelle l'effet Zeeman lève complètement la dégénérescence des niveaux est que le champ magnétique brise l'invariance par renversement du temps.

L'invariance par renversement du temps implique que pour une transition $\mathcal{T}_{a \rightarrow b}$

$$\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = \mathcal{T}_{\Theta b \rightarrow \Theta a} \quad (\text{A.23})$$

où Θa (Θb), est l'état obtenu à partir de a (b) par renversement du temps, en inversant toutes les impulsions et tous les moments angulaires. Nous en déduisons par exemple la relation pour l'amplitude de diffusion utilisée dans § 13.3.2

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}')$$

et plus généralement pour une réaction où les particules incidentes ont des impulsions (\vec{p}_1, \vec{p}_2) et des projections de leurs spins (m_1, m_2) , tandis que les particules finales sont caractérisées par (\vec{p}_3, \vec{p}_4) et (m_3, m_4)

$$f_{m_1, m_2; m_3, m_4}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_3 + \vec{p}_4) = f_{-m_3, -m_4; -m_1 - m_2}(-\vec{p}_3 - \vec{p}_4 \rightarrow -\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$$

Pour une particule sans spin, l'opération de renversement du temps est simplement la conjugaison complexe. En effet si $\psi(\vec{r}, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$$

la fonction $\Theta\psi(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, -t)$ vérifie

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, -t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, -t) + V(\vec{r})\psi^*(\vec{r}, -t)$$

pourvu que le potentiel $V(\vec{r})$ soit réel. Cette propriété a été utilisée au paragraphe 9.3.4 pour restreindre la forme de la matrice de passage M et de la matrice S .

Comme dernier exemple, examinons l'impact de l'invariance par renversement du temps sur le moment dipolaire électrique du neutron. Comme l'opérateur moment dipolaire \vec{D} est impair dans l'opération parité

$$\Pi \vec{D} \Pi^{-1} = -\vec{D}$$

le moment dipolaire⁵ d'une particule est nul si cette particule a une parité déterminée, ce qui sera le cas si ses interactions conservent la parité. C'est pourquoi les atomes dans leur état fondamental n'ont pas de moment dipolaire permanent. Cependant la parité n'est pas conservée dans les interactions faibles, et cela peut *a priori* rétablir la possibilité d'un moment dipolaire. En fait il est de plus nécessaire que l'invariance par renversement du temps soit violée. En effet le seul vecteur à notre disposition est le spin $\hbar\vec{\sigma}/2$ du neutron, et on doit avoir $\vec{D} = \lambda\vec{\sigma}$, où λ est une constante; on remarque que $\lambda \neq 0$ implique la violation de la parité, car \vec{D} est un vecteur et $\vec{\sigma}$ un pseudo-vecteur.

5. Pour que le moment dipolaire électrique d'une particule puisse être non nul, il est impératif que son moment angulaire soit différent de zéro : dans le cas contraire, l'invariance par rotation est incompatible avec l'existence d'un moment dipolaire.

Le couplage $\vec{D} \cdot \vec{E}$ du dipôle avec un champ électrique est impair par renversement du temps et doit s'annuler si l'invariance par renversement du temps est valide, car d'après (A.17) $\vec{\sigma}$ est impair et \vec{E} pair : dans un renversement du temps, les charges sont inchangées (au contraire des courants, qui, comme on l'a vu, sont inversés). Si l'on envoie un neutron possédant un moment dipolaire électrique dans un champ électrique et un champ magnétique inhomogènes et constants et que l'on inverse à $t = 0$ la vitesse du neutron et les courants créant le champ magnétique, alors, à la différence de la figure A.1, le neutron ne « remontera pas sa trajectoire ».

Essayons d'estimer le moment dipolaire du neutron par un argument dimensionnel. Ce moment dipolaire doit faire intervenir les interactions faibles, et donc la constante de Fermi G_F (exercice 13.5.6), ou plus précisément la combinaison $G_F/(\hbar c)^3$, et un paramètre sans dimension ε mesurant l'importance de la violation de l'invariance par renversement du temps, dont l'ordre de grandeur peut être estimé à environ 10^{-3} à partir de l'étude des mésons K neutres. On dispose en plus d'une masse, la masse du neutron $m_n \simeq 1 \text{ GeV}/c^2$, et la seule solution possible est par analyse dimensionnelle

$$d \sim q_e \frac{G_F}{(\hbar c)^3} \varepsilon m_n (\hbar c^3)$$

Il est commode d'utiliser un système d'unités où $\hbar = c = 1$ (exercice 13.5.1), $200 \text{ MeV} \simeq 1 \text{ fm}^{-1}$, ou $1 \text{ fm} \simeq 5 \text{ GeV}^{-1}$

$$d \sim q_e \times 10^{-5} \times 10^{-3} \times 1 = q_e \times 10^{-8} \text{ GeV}^{-1} \sim q_e \times 10^{-9} \text{ fm} = q_e \times 10^{-24} \text{ m}$$

Les mesures les plus précises du moment dipolaire du neutron ont été effectuées au réacteur de recherches de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble et donnent la borne supérieure

$$d \lesssim q_e \times 10^{-27} \text{ m}$$

qui viole largement notre estimation naïve ! En fait, à cause d'une propriété technique du modèle standard⁶, le moment dipolaire du neutron doit être proportionnel à G_F^2

$$d \sim G_F^2 \varepsilon m_n^3 (\hbar c^7) \simeq q_e \times 10^{-29} \text{ m}$$

Les estimations théoriques du moment dipolaire du neutron ne sont pas très précises et varient aux alentours de $q_e \times 10^{-32} \text{ m}$: notre estimation est réduite par un facteur $\sim 10^{-3}$ car les calculs perturbatifs du modèle standard conduisent à un facteur numérique multiplicatif $\pi^{-4} \simeq 10^{-2}$ et suggèrent de prendre une masse caractéristique de l'ordre de 0.3 GeV au lieu de m_n .

6. Voir par exemple J. Donoghue *et al.* [1992], chapitre IX.

Appendice B

Méthode de Wigner et Weisskopf

LA DÉDUCTION DE LA RÈGLE d'or de Fermi du § 9.5.3 est limitée à des temps suffisamment courts, $t \ll \tau_2$, et il n'est pas possible de justifier avec les seuls arguments du § 9.5.3 la loi de décroissance exponentielle (9.153). Une méthode due à Wigner et Weisskopf¹ permet de justifier cette loi pour des temps longs à l'aide d'un autre schéma d'approximations. Considérons la situation suivante : un état d'un système isolé a , d'énergie E_a , se désintègre vers un continuum d'états b , d'énergie E_b . Des exemples d'une telle situation sont la désexcitation d'un état excité d'un atome, d'une molécule, d'un noyau atomique. . . avec émission d'un photon, ou la désintégration d'une particule élémentaire. Les états d'énergie E_a et E_b sont états propres d'un hamiltonien $H^{(0)}$

$$H^{(0)}|a\rangle = E_a|a\rangle \quad H^{(0)}|b\rangle = E_b|b\rangle \quad (\text{B.1})$$

et une perturbation W indépendante du temps est responsable de la transition $a \rightarrow b$; dans le cas de l'émission spontanée d'un photon, W est donné par (15.58). Les états a et b ne sont pas des états stationnaires du hamiltonien *total* indépendant du temps $H = H^{(0)} + W$. Nous pouvons supposer que les éléments de matrice diagonaux de W sont nuls² : $W_{aa} = W_{bb} = 0$ et nous notons $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état du système, dont l'état initial est $|\psi(t=0)\rangle = |a\rangle$.

1. La méthode de Wigner et Weisskopf est décrite par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément D_{XIII}, ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 17; un traitement détaillé et rigoureux est donné par Messiah [1959], chapitre XXI.

2. Si tel n'était pas le cas, on pourrait toujours redéfinir $H^{(0)}$

$$H^{(0)} \rightarrow H^{(0)'} = H^{(0)} + |a\rangle W_{aa} \langle a| + \int dE_b \mathcal{D}(E_b) |b\rangle W_{bb} \langle b|$$

Décomposons l'état $|\psi(t)\rangle$ sur les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ en faisant intervenir la densité d'états $\mathcal{D}(E_b)$

$$|\psi(t)\rangle = \gamma_a(t)e^{-iE_a t/\hbar}|a\rangle + \int dE_b \mathcal{D}(E_b) \gamma_b(t) e^{-iE_b t/\hbar} \quad (\text{B.2})$$

L'équation de Schrödinger appliquée sur la décomposition (B.2)

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (H^{(0)} + W) |\psi(t)\rangle$$

conduit au système d'équations différentielles

$$i\hbar \dot{\gamma}_a(t) = \int e^{i\omega_{ab}t} W_{ab} \gamma_b(t) \mathcal{D}(E_b) dE_b \quad (\text{B.3})$$

$$i\hbar \dot{\gamma}_b(t) = e^{-i\omega_{ab}t} W_{ab}^* \gamma_a(t) \quad (\text{B.4})$$

avec $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$. Nous savons empiriquement que $|\gamma_a(t)|^2$ est donné par une loi exponentielle

$$|\gamma_a(t)|^2 = e^{-\Gamma t} \quad (\text{B.5})$$

ce qui suggère d'essayer un comportement

$$\gamma_a(t) = \exp\left(-\frac{i\delta}{2} t\right) \quad \delta = \delta_1 - i\Gamma \quad (\text{B.6})$$

où δ_1 est réel. La substitution de (B.6) dans (B.4) avec les conditions initiales $\gamma_b(t=0) = 0$ donne par intégration sur t

$$\gamma_b(t) = \frac{W_{ab}^*}{\hbar[\omega_{ab} + \delta/2]} [\exp(-i(\omega_{ab} + \delta/2)t) - 1] \quad (\text{B.7})$$

Pour des temps longs, $t \gg \Gamma^{-1}$, l'exponentielle dans (B.7) tend rapidement vers zéro et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\gamma_b(t)|^2 = \frac{|W_{ab}|^2}{\hbar^2 [(\omega_{ab} + \delta_1/2)^2 + \Gamma^2/4]} \quad (\text{B.8})$$

Pour vérifier la cohérence de notre hypothèse de départ avec les équations d'évolution (B.3) et (B.4), il faut reporter (B.6) dans (B.3), ce qui donne

$$\frac{\hbar\delta}{2} = \int dE_b \mathcal{D}(E_b) |W_{ab}|^2 \frac{1 - \exp(i[\omega_{ab} + \delta/2]t)}{\hbar(\omega_{ab} + \delta/2)} \quad (\text{B.9})$$

La constante δ doit être solution de l'équation intégrale (B.9). Pour fixer les idées, examinons la transition d'un état excité i d'un atome d'énergie E_i vers l'état fondamental f d'énergie E_f de cet atome, avec émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. On peut, à une excellente approximation, négliger l'énergie cinétique de recul de l'atome final dont l'énergie est simplement E_f avec comme choix de référentiel celui où l'atome est au repos dans son état initial (*cf.*

la discussion du § 15.3.4). La densité d'états finaux à utiliser dans (B.9) est celle (15.62) du photon. En résumé, nous avons $|a\rangle = |i\rangle$ et $|b\rangle =$ atome dans l'état $f + \text{photon} = |f \otimes \vec{k}s\rangle$, ainsi que la conservation de l'énergie

$$\hbar\omega_{ab} = E_a - E_b = E_i - (E_f + \hbar\omega) = \hbar(\omega_0 - \omega) \quad (\text{B.10})$$

avec $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$. L'équation (B.9) devient, en choisissant ω comme variable d'intégration au lieu de E_f , $dE_b = \hbar d\omega$

$$\frac{\hbar\delta}{2} = \int_0^\infty d\omega \mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2 \frac{1 - \exp(i[\omega_0 - \omega + \delta/2]t)}{\omega_0 - \omega + \delta/2} \quad (\text{B.11})$$

Nous sommes intéressés par le comportement de cette équation aux temps longs, et nous avons besoin du comportement pour $t \rightarrow \infty$ de la fonction $f(t, x)$ considérée comme distribution

$$f(t, x) = \frac{1 - e^{itx}}{x}$$

Lorsque x est réel, sa transformée de Fourier est

$$\tilde{f}(t, u) = i[\theta(u) - \theta(t + u)] \quad (\text{B.12})$$

car

$$-i \int_{-t}^0 dx e^{-iux} = \frac{1 - e^{itx}}{x}$$

et la limite $t \rightarrow \infty$ de $\tilde{f}(t, u)$ est simplement $-i\theta(-u)$, ce qui donne pour $f(t, x)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = \mathbf{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (\text{B.13})$$

Ce résultat est aussi valable lorsque x a une petite partie imaginaire, $x = \text{Re } x \pm i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$. Il suffit pour le voir d'intégrer sur x dans le plan complexe, en complétant le contour d'intégration par un demi-cercle dont le rayon tend vers l'infini. Si δ_1 et Γ sont petits par rapport aux intervalles caractéristiques de variation des fonctions $\mathcal{D}(\omega)$ et $|W_{ab}(\omega)|^2$, on peut reporter (B.13) dans (B.11) et déterminer la valeur de δ

$$\delta = \frac{2}{\hbar} \mathbf{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2}{\omega_0 - \omega} - \frac{2i\pi}{\hbar} \mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2 \quad (\text{B.14})$$

Le deuxième terme du membre de droite de (B.14) confirme que $\Gamma = -i \text{Im } \delta$ est bien donné par la règle d'or de Fermi

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2 \quad (\text{B.15})$$

tandis que le premier terme correspond au déplacement du niveau d'énergie

$$\operatorname{Re} \delta = \delta_1 = \frac{2}{\hbar} \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2}{\omega_0 - \omega} \quad (\text{B.16})$$

Ce déplacement aurait pu être obtenu par un calcul au second ordre en théorie des perturbations indépendantes du temps ; il est nul au premier ordre d'après notre hypothèse $W_{aa} = W_{bb} = 0$. On peut absorber δ_1 dans une redéfinition de ω_0 : $\omega_0 \rightarrow \omega_0 + \delta_1$ et d'après (B.8), la probabilité d'observer un photon de fréquence ω est

$$\mathbf{p}(\omega) d\omega \simeq \frac{\mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2}{\hbar [(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4]} d\omega \quad (\text{B.17})$$

Cette probabilité est correctement normalisée à l'unité

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{p}(\omega) d\omega = 1 \quad \text{car} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{\pi}{a}$$

compte tenu de la valeur (B.15) de Γ . La courbe représentative de $\mathbf{p}(\omega)$ est une lorentzienne (aussi appelée courbe de Breit-Wigner)

$$\mathbf{p}(\omega) = \frac{\mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2}{\hbar [(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4]} \quad (\text{B.18})$$

La fréquence du photon final n'a pas une valeur bien déterminée : elle présente une « dispersion »³ $\Delta\omega = \Gamma$, définie comme la largeur à mi-hauteur de la courbe $\mathbf{p}(\omega)$

$$\mathbf{p}\left(\omega_0 \pm \frac{1}{2} \Delta\omega\right) = \frac{1}{2} \mathbf{p}(\omega = \omega_0)$$

En d'autres termes, le spectre de fréquences du photon émis n'est pas monochromatique. La quantité Γ est appelée *largeur de raie* ou parfois largeur naturelle de raie, étant donné qu'il existe d'autres causes d'élargissement comme l'effet Doppler ou les collisions ; en raison de (B.5), la vie moyenne de l'état excité est l'inverse de la largeur de raie, $\tau = 1/\Gamma$. La dispersion en énergie du photon final montre, par conservation de l'énergie, que l'énergie de l'état excité présente une dispersion $\Delta E = \hbar\Gamma$, et nous en déduisons la relation (4.29) entre la vie moyenne et la dispersion sur l'énergie

$$\tau \Delta E = \hbar \quad (\text{B.19})$$

La conservation de l'énergie implique que l'énergie de l'état excité n'a pas une valeur précise, mais présente une dispersion $\Delta E \simeq \hbar\Gamma$ autour de sa valeur

3. Dispersion est à mettre entre guillemets car l'intégrale

$$\int_0^{\infty} d\omega (\omega - \omega_0)^2 \mathbf{p}(\omega)$$

est divergente, et on ne peut pas définir une dispersion au sens strict du terme (voir § 4.2.4).

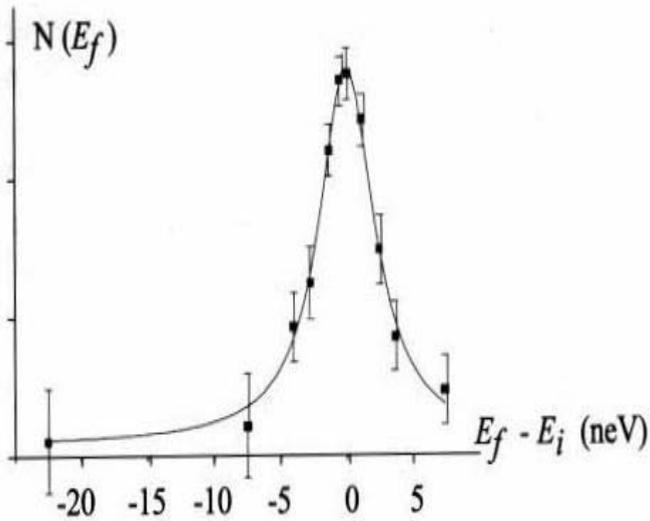
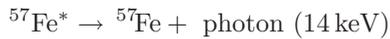


FIG. B.1 – Spectre des photons de désintégration $^{57}\text{Fe}^* \rightarrow ^{57}\text{Fe} + \text{photon}$. D'après Basdevant et Dalibard [2001].

centrale E_i . Cependant il n'y a pas de limitation de principe à la précision avec laquelle on peut mesurer cette valeur centrale. La figure B.1 montre la détermination expérimentale de $\rho(\omega)$ pour la désintégration d'un niveau excité du $^{57}\text{Fe}^*$



dont la vie moyenne est $\tau \simeq 1.4 \times 10^{-7} \text{ s}$.

Appendice C

Constantes physiques

Vitesse de la lumière dans le vide	:	$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$
Constante de Planck	:	$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Constante de Planck divisée par 2π	:	$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Charge de l'électron ($q_e < 0$)	:	$ q_e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masse de l'électron	:	$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ $= 0.511 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du proton	:	$m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 938.3 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du neutron	:	$m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 939.5 \text{ MeV.c}^{-2}$
Constante de Rydberg	:	$R_\infty = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = 13.61 \text{ eV}$
Magnéton de Bohr	:	$\mu_B = \frac{ q_e \hbar}{2m_e} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV.T}^{-1}$
Magnéton de Bohr nucléaire	:	$\mu_N = \frac{ q_e \hbar}{2m_p} = 3.15 \times 10^{-8} \text{ eV.T}^{-1}$
Constante de Boltzmann	:	$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
Constante de gravitation	:	$G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ N.m}^2.\text{kg}^{-2}$
Conversion énergie-longueur d'onde	:	$E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \lambda = 1.24 \mu\text{m}$
Conversion énergie-fréquence	:	$E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$
Conversion énergie-température	:	$E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow T = 11600 \text{ K}$

Références

- [1] Abers [2004] : E. Abers, *Quantum mechanics*, Pearson Education, New Jersey.
- [2] Abramowitz et Stegun [1964] : M. Abramowitz and I. Stegun eds., *Handbook of mathematical functions*, Dover, New-York
- [3] Ahmad *et al.* [2001] : Q. Ahmad *et al.*, (SNO Collaboration), Interactions produced by B^8 solar neutrinos at the Sudbury Neutrino Observatory, *Phys.Rev. Lett.* **87**, 071301.
- [4] Akitt [1992] : J.W. Akitt, *NMR chemistry, an introduction to modern NMR spectroscopy*, Chapman&Hall, New-York.
- [5] Anandan [1992] : J. Anandan, The geometric phase, *Nature* **360**, 307.
- [6] Arndt *et al.* [1999] : M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw and A. Zeilinger, Wave-particle duality of C_{60} molecules, *Nature* **401**, 680 (1999)
- [7] Arndt *et al.* [2005] : M. Arndt, K. Hornberger and A. Zeilinger, Probing the limits of the quantum world, *Physics World* **18**, March 2005, pp. 35–40.
- [8] Aspect [1999] : A. Aspect, Bell's inequalities : more ideal than ever, *Nature* **398**, 189-190.
- [9] Aspect *et al.* [1982] : A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen gedanken experiment : a new violation of Bell's inequalities, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982) ; A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, Experimental test of Bell's inequalities using time varying analyzers, *Phys. Rev. Lett.* **49** 1804 (1982).
- [10] Aspect *et al.* [1989] : A. Aspect, P. Grangier et G. Roger, Dualité onde-corpuscule pour un photon unique, *J. Optics (Paris)* **20**, 119.
- [11] Badurek *et al.* [1985] : G. Badurek, H. Rauch and D. Tuppinger, Neutron interferometric double-resonance experiment, *Phys. Rev.* **A34**, 2600-2608.
- [12] Baggott [2004] : J. Baggott, *Beyond measure*, Oxford University Press, Oxford.
- [13] Balian [1991] : R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics*, Springer, Berlin
- [14] Ballentine [1990] : L. Ballentine, Limitations of the projection postulate, *Found. Phys.* **20**, 1329.

- [15] Ballentine [1998] : L. Ballentine, *Quantum Mechanics*, World Scientific.
- [16] Barrett *et al* [2004] : M. Barrett *et al.*, Deterministic quantum teleportation of atomic qubits, *Nature* **429**, 737.
- [17] Basdevant et Dalibard [2001] : J-L Basdevant et J. Dalibard, *Mécanique quantique*, Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau.
- [18] Baym [1969] : G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin, Reading.
- [19] Baym [1998] : G. Baym, The physics of Hanbury Brown-Twiss intensity interferometry : from stars to nuclear collisions, *Acta Physica Polonica* **B29**, 1839.
- [20] Bell [1990] : J. Bell, Against measurement, *Physics World* **33**, August, p. 33.
- [21] Bennett *et al.* [1992] : C. Bennett, G. Brassard et A. Ekert, Quantum cryptography, *Scientific American* **267**, October p. 26.
- [22] Berry [1991] : M. Berry, Some Quantum to Classical Asymptotics, Les Houches 1989, *Chaos et Physique Quantique*, Elsevier.
- [23] Berry et Robbins [1997] : M. Berry and J. Robbins, Indistinguishability for quantum particles : spin, statistics and the geometric phase, *Proc. Roy. Soc. London* **A453**, 1771.
- [24] Bethe et Morrison [1956] : H. Bethe et Ph. Morrison, *Elementary Nuclear Theory*, John Wiley.
- [25] Blatt [2004] : R. Blatt, Quantum information processing in ion traps, in Les Houches Summer School 2003, *Quantum entanglement and information processing*, D. Estève, J.-M. Raimond, and M. Brune eds., Elsevier, Amsterdam, p. 223-260.
- [26] Braginsky *et al.* [1980] : V. Braginsky, Y. Vorontsov and K. Thorne, Quantum non demolition measurements, *Science* **209**, 547.
- [27] Bransden et Joachain [1983] : B. Bransden and C. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific and Technical, Harlow (1983)
- [28] Breuer et Petruccione [2002] : H. Breuer et F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press, Oxford
- [29] Brown et Holland [1999] : H. Brown et P. Holland, The Galilean covariance of quantum mechanics in the case of external fields, *Am. Journ. Phys.* **67**, 204.
- [30] Brune *et al.* [1996a] : M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J-M Raimond and S. Haroche, Quantum Rabi oscillations : a direct test of field quantization, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1800.
- [31] Brune *et al.* [1996b] : M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J-M Raimond and S. Haroche, Observing the progressive decoherence of the "meter" in a quantum measurement, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996)
- [32] Buzek et Hillery [1996] : V. Buzek and M. Hillery, Quantum copying : beyond the no-cloning theorem, *Phys. Rev.* **A54**, 1844.

- [33] Caldeira et Leggett [1983] : A. Caldeira and A. Leggett, Path integral approach to quantum Brownian motion, *Ann. Phys.* **149**, 374.
- [34] Carmichael [1993] : H. Carmichael, *An open system approach to quantum optics*, Springer-Verlag, Berlin.
- [35] Castin [2001] : Y. Castin, Bose-Einstein condensates in atomic gases : simple theoretical results, dans *Coherent atomic matter waves*, École d'été des Houches, R. Kaiser, C. Westbrook, and F. David eds., EDP Sciences/Springer-Verlag
- [36] Caves *et al.* [1980] : C. Caves *et al.*, On the measurement of a weak classical force coupled to a quantum mechanical oscillator, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 341.
- [37] Child [1991] : M. Child, *Semiclassical mechanics with molecular applications*, Clarendon Press, Oxford.
- [38] Cohen-Tannoudji [1989] : C. Cohen-Tannoudji, Cohérences quantiques et dissipation, Cours au Collège de France 1988/89, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr
- [39] Cohen-Tannoudji [1990] : C. Cohen-Tannoudji, Théorie de la mesure, Cours au Collège de France 1989/90, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr
- [40] Cohen-Tannoudji [1992] : C. Cohen-Tannoudji, *Atomic Motion in Laser Light*, dans *Optical Coherence and Quantum Optics*, École des Houches, North Holland.
- [41] Cohen-Tannoudji [1999] : C. Cohen-Tannoudji, *Condensats de Bose-Einstein atomiques*, Cours au Collège de France 1998/1999, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr
- [42] Cohen-Tannoudji *et al.* [1973] : C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris.
- [43] Cohen-Tannoudji *et al.* [1998] : C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, Inter-Éditions/Éditions du CNRS, Paris.
- [44] Cohen-Tannoudji *et al.* [2005] : C. Cohen-Tannoudji, J. Dalibard et F. Laloë, La condensation de Bose-Einstein dans les gaz, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 87, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.
- [45] Colella *et al.* [1975] : R. Colella, A. Overhauser and S. Werner, Observation of gravitationally induced quantum interference, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1472.
- [46] Comtet *et al.* [1992] : A. Comtet, J. Mc Cabe et S. Ouvry, Vers de nouvelles statistique quantiques, *Images de la Physique*, CNRS, p. 21.
- [47] Dalibard [2003] : J. Dalibard, *Cohérence quantique et dissipation*, disponible sur le site web www.lkb.ens.fr
- [48] Darrigol [2005] : O. Darrigol, 1905 : un nouvel élan, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 1, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.

- [49] Diu *et al.* [1990] : B. Diu, C. Guthman, D. Lederer et B. Roulet, *Physique statistique*, Hermann, Paris.
- [50] Donoghue *et al.* [1992] : J. Donoghue, E. Golowich and B. Holstein, *Dynamics of the standard model*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [51] Dürr *et al.* [1998] : S. Dürr, T. Nonn, and G. Rempe, Origin of quantum-mechanical complementarity probed by a ‘which way’ experiment in an atom interferometer, *Nature* **395**, 33–37.
- [52] Eguchi *et al.* [2003] : K. Eguchi *et al.* (Kamland Collaboration), First results from Kamland : evidence for reactor neutrino disappearance, *Phys.Rev. Lett.* **90**, 021802.
- [53] Einstein *et al.* [1935] : A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **47**, 777–780.
- [54] Englert *et al.* [1991] : B. Englert, M. Scully and H. Walther, Quantum optical tests of complementarity, *Nature* **351**, 111.
- [55] Englert *et al.* [1995] : B. Englert, M. Scully and H. Walther, La dualité de la lumière et de la matière, *Pour la Science* **208**, 60.
- [56] d’Espagnat [1995] : B. d’Espagnat, *Le réel voilé*, Fayard, Paris.
- [57] Feynman *et al.* [1965] : R. Feynman, R. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading.
- [58] Foerster [1975] : D. Foerster, *Hydrodynamics fluctuations, broken symmetry and correlation functions*, Benjamin, New York.
- [59] Fukuda *et al.* [2001] : S. Fukuda *et al.* (SuperKamiokande Collaboration), Solar B⁸ and high energy physics neutrino measurements from 1258 days of SuperKamiokande data, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5651.
- [60] Gasiorowicz [1966] : S. Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics*, J. Wiley, New-York.
- [61] Gatz [1971] : C. Gatz, *Introduction to Quantum Chemistry*, C.E. Merrill, Columbia.
- [62] Gerry et Knight [2005] : C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press.
- [63] Ginsberg *et al.* [2007] : N. Ginsberg, S. Garner and L. Hau, Coherent control of optical information with matter wave dynamics, *Nature* **445**, 623.
- [64] Gisin *et al.* [2002] : N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel and H. Zbinden, Quantum cryptography, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145–195.
- [65] Goodrich [1972] : F. Goodrich, *A Primer of Quantum Chemistry*, Wiley, New-York.
- [66] Grangier [2002] : Ph. Grangier, Single photons stick together, *Nature* **419**, 577.
- [67] Grynberg *et al.* [1997] : G. Grynberg, A. Aspect et C. Fabre, *Introduction aux lasers et à l’optique quantique*, Ellipses, Paris.
- [68] Gutzwiller [1990] : M. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Systems*, Springer.

- [69] Haroche *et al.* [1997] : S. Haroche, J-M Raimond et M. Brune, *La Recherche* **301**, p. 50
- [70] Haroche et Raimond [2006] : S. Haroche and J.-M. Raimond, *Exploring the quantum*, Oxford University Press, Oxford.
- [71] Hasegawa *et al.* [2006] : Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron and H. Rauch, Quantum contextuality in a single-neutron optical experiment, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 230401.
- [72] Hecht [1987] : E. Hecht, *Optics*, Addison-Wesley, New-York.
- [73] Hey et Walters [2003] : T. Hey and P. Walters, *The New Quantum Universe*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [74] Hillery *et al.* [1984] : M. Hillery, R. O’Connell, M. Scully and E. Wigner, Distribution functions in Physics : Fundamentals, *Phys. Reports* **106**, 121-167.
- [75] Huang [1963] : K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley, New-York.
- [76] Isham [1995] : C. Isham, *Lectures on Quantum Theory*, Imperial College Press, Londres.
- [77] Itzykson et Zuber [1980] : C. Itzykson et J-B Zuber, *Quantum Field Theory*, Mac Graw Hill, New-York.
- [78] Jackson [2001] : J.D. Jackson, *Électrodynamique classique*, Dunod, Paris.
- [79] Jacques *et al.* [2007] : V. Jacques, E. Wu, F. Grosshans, F. Treussart, Ph. Grangier, A. Aspect and J-F Roch, Experimental realization of Wheeler’s delayed choice experiment, *Science* **315**, 966.
- [80] Jauch [1968] : J. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Reading.
- [81] Jacob [2002] : M. Jacob, Le modèle standard de la physique des particules, *Pour la Science* **300**, p. 58, octobre.
- [82] Jeltès *et al.* [2007] : T. Jeltès *et al.*, Comparison of the Hanbury Brown-Twiss effect for bosons and fermions, *Nature* **445**, 402.
- [83] E. Joos et H. Zeh [1985] : The emergence of classical properties through interaction with the environment, *Zeit. Phys.* **B59**, 223.
- [84] Kiesel *et al.* [2002] : H. Kiesel, A. Renz and F. Hasselbach, Observation of Hanbury Brown and Twiss anticorrelations for free electrons, *Nature* **418**, 392.
- [85] Kittel [1970] : C. Kittel, *Introduction à la physique du solide*, Dunod, Paris.
- [86] Kragh [2000] : H. Kragh, Max Planck : the reluctant revolutionary, *Physics World* **13**(12) December.
- [87] Landau et Lifschitz [1966] : L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Éditions MIR, Moscou.
- [88] Laloë [2001] : F. Laloë, Do we really understand Quantum Mechanics ? Strange correlations, paradoxes and theorems, *Am. Journ. Phys.* **69**, 655.

- [89] Le Bellac [1988] : M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Interéditions/Éditions du CNRS, Paris.
- [90] Le Bellac *et al.* [2004] : M. Le Bellac, F. Mortessagne and George Batriouni *Equilibrium and Non Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [91] Le Bellac [2006] : M. Le Bellac, *A short introduction to quantum information and computation*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [92] Le Bellac et Lévy-Leblond [1973] : M. Le Bellac and J.-M. Lévy-Leblond, Galilean Electromagnetism, *Nuovo Cimento* **B14**, 217.
- [93] Legget [2001] : A. Leggett, Bose-Einstein condensation in the alkali gases : some fundamental concepts, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307.
- [94] Leggett [2002a] : A. Leggett, Qubits, cbits, quantum measurement and environment, in *Fundamentals of quantum information*, D. Heiss editor, Lecture notes in Physics **587**, p. 3, Springer-Verlag, Berlin.
- [95] Leggett [2002b] : A. Leggett, Testing the limits of quantum mechanics, *J. Phys. Cond. Mat.* **14**, R415
- [96] Leggett [2005] : A. Leggett, The quantum measurement problem, *Science* **307**, 871.
- [97] Leggett [2006] : A. Leggett, *Quantum fluids*, Oxford University Press, Oxford.
- [98] Levitt [2001] : M. H. Levitt, *Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley, New-York.
- [99] Lévy-Leblond [1967] : J.-M. Lévy-Leblond, Non relativistic particles and wave equations, *Comm. Math. Phys.* **6**, 286.
- [100] Lévy-Leblond et Balibar [1984] : J.-M. Lévy-Leblond et F. Balibar, *Quantique : Rudiments*, InterEditions, Paris.
- [101] Mandel and Wolf [1995] : L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge
- [102] May et Cazabat [1996] : M. May et A.-M. Cazabat, *Optique*, Dunod, Paris.
- [103] Mazoyer [2002] : B. Mazoyer, L'imagerie cérébrale : IRM et TEP, *Pour la Science* **302**, décembre, p. 42.
- [104] Mermin [1993] : N. Mermin, Hidden variables and the two theorems of John Bell, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 803.
- [105] Mermin [1998] : N. Mermin, What is Quantum Mechanics trying to teach us?, *Am. Journ. Phys.* **66**, 753.
- [106] Merzbacher [1970] : E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New-York.
- [107] Messiah [1959] : A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris.
- [108] Messiah et Greenberg [1964] : A. Messiah and O. Greenberg, Symmetrization postulate and its experimental verification, *Phys. Rev.* **136**, B248.
- [109] Mewes *et al.* [1996] : M. Mewes *et al.*, Bose-Einstein condensation in a tightly confining magnetic trap, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 416.

- [110] Mohiden et Roy [1998] : U. Mohiden and A. Roy, Precision measurements of the Casimir force from 0.1 to 0.9 μm , *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4549.
- [111] Nielsen and Chuang [2001] : M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [112] Noguez *al.* [1999] : G. Noguez *al.*, Seeing a single photon without observing it, *Nature* **400** 239.
- [113] Nozières et Pines [1990] : Ph. Nozières and D. Pines, *The theory of quantum liquids*. Vol II, Addison-Wesley, New-York.
- [114] Omnès [1994] : R. Omnès, *The interpretation of quantum mechanics*, Princeton University Press, Princeton.
- [115] Parisi [1989] : G. Parisi, *Statistical field theory*, Addison-Wesley, New-York.
- [116] Peres [1980] : A. Peres, Non exponential decay law *Ann. Phys. (N.Y.)*, **129**, 33.
- [117] Peres [1993] : A. Peres, *Quantum Theory, Concepts and Methods*, Kluwer, Boston.
- [118] Perkins [2000] : D. Perkins, *An Introduction to High Energy Physics*, 4^e édition, Cambridge University Press, Cambridge.
- [119] Pines et Nozières [1989] : D. Pines and Ph. Nozières, *The theory of quantum liquids*. Vol I, Addison-Wesley, New-York.
- [120] Pocholle [2005] : J.-P. Pocholle, De l'émission stimulée d'Einstein aux lasers d'aujourd'hui, dans *Einstein aujourd'hui*, p. 129, M. Le Bellac et M. Leduc eds., EDP Sciences/Éditions du CNRS, Paris.
- [121] Preskill [1999] : J. Preskill, Quantum computation, <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/>
- [122] Rauch et Werner [2000] : H. Rauch and S. Werner, *Neutron Interferometry*, Clarendon Press, Oxford.
- [123] Rich [2002] : J. Rich, *Principes de la cosmologie*, Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau.
- [124] Riebe *et al* [2004] : M. Riebe *et al.*, Deterministic quantum teleportation with atoms, *Nature* **429**, 734–737.
- [125] Riesz et Nagy [1955] : F. Riesz et B. Nagy, *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Gauthier-Villars, Paris.
- [126] Santori *et al.* [2002] : C. Santori, J. Vukovic, G. Solomon and Y. Yamamoto, Indistinguishable photons from a single photon device, *Nature* **419**, 594.
- [127] Scarani [2003] : V. Scarani, *Initiation à la physique quantique*, Vuibert, Paris.
- [128] Scarani *et al.* [2005] : V. Scarani, S. Iblisdir, N. Gisin and A. Acin, Quantum cloning, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1225.

- [129] Schlossauer [2004] : M. Schlossauer, Decoherence, the measurement problem and interpretations of quantum mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1267 (2004)
- [130] Schmid-Kaler *et al.* [2003] : F. Schmid-Kaler *et al.*, Realization of the Cirac-Zoller controlled-NOT gate, *Nature* **422**, 408.
- [131] Schrödinger [1952] : E. Schrödinger, *Br. J. Philos. Sc.*, **3**, 109.
- [132] Schulman [1981] : L. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley.
- [133] Shapere et Wilczek [1989] : A. Shapere and F. Wilczek eds., *Geometric phases in physics*, World Scientific.
- [134] Scully *et al.* [1989] : M. Scully, B. Englert and J. Schwinger, Spin coherence and Humpty-Dumpty III : the effect of observation, *Phys. Rev. A* **40**, 1775.
- [135] Scully et Zubairy [1997] : M. Scully and M. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [136] Shimizu *et al.* [1992] : F. Shimizu, K. Shimizu et H. Takuma, Double-slit interference with ultracold metastable neon atoms, *Phys. Rev.* **A46**, R17 (1992)
- [137] Stöckman [1999] : H. Stöckman, *Quantum chaos*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [138] Stolze et Suter [2004] : J. Stolze and D. Suter, *Quantum computing*, Wiley.
- [139] Streater et Wightman [1964] : R. Streater and A. Wightman, *PCT, spin and statistics and all that*, Benjamin, New-York.
- [140] Suter [1997] : D. Suter, *The Physics of Laser-Atom Interactions*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [141] Tanzilli *et al.* [2002] : S. Tanzilli, W. Tittel, H. de Riedmatten, H. Zbinden, P. Baldi, M. de Micheli, D. Ostrowsky et N. Gisin, PPLN wave-guide for quantum communication, *Eur. Phys. Journ.* **D 18**, 155.
- [142] Taylor et Heinonen [2002] : Ph. Taylor et O. Heinonen, *Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [143] Taylor et Wheeler [1963] : E. Taylor and J. Wheeler, *Space-Time Physics*, W. H. Freeman, New-York.
- [144] Tinkham [1964] : M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, Mc Graw Hill, New-York.
- [145] Vandersypen *et al.* [2001] : L. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. Yannoni, M. Sherwood, and I. Chuang, Experimental realization of quantum Shor's factoring algorithm using nuclear magnetic resonance, *Nature* **414**, 883.
- [146] Wark [2005] : D. Wark, Neutrinos : ghosts of matter, *Physics World* **18**(6), June.
- [147] Weihs *et al.* [1998] : G. Weihs *et al.*, Violation of Bell's inequalities under strict locality conditions, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039.

- [148] Weinberg [1978] : S. Weinberg *Les trois premières minutes de l'Univers*, Éditions du Seuil, Paris (1978).
- [149] Weinberg [1995] : S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [150] Werner *et al.* [1975] : S. Werner, R. Colella, A. Overhauser et C. Eagen, Observation of the phase-shift of a neutron due to precession in a magnetic field, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1053.
- [151] Wichman [1974] : E. Wichman, *Physique quantique*, cours de physique de Berkeley volume 5, Armand Colin, Paris.
- [152] Wigner [1970] : E. Wigner, On hidden variables and quantum mechanical probabilities, *Am. J. Phys.* **38**, 1005.
- [153] Wheeler et Zurek [1983] : J-A Wheeler and W. Zurek eds., *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton.
- [154] Wootters et Zurek [1979] : W. Wootters and W. Zurek eds., Complementarity in the double-slit experiment : quantum non separability and a quantitative statement of Bohr's principle, *Phys.Rev.* **D19**, 473.
- [155] Wu et Shaknow [1950] : C. Wu and I. Shaknow, The angular correlations of scattered annihilation radiation, *Phys. Rev.* **77**, 136.
- [156] Zeh [1970] : H. Zeh, On the interpretation of measurement in quantum theory, *Found. Phys.* **1**, 69.
- [157] Zeilinger [1981] : A. Zeilinger, General properties of lossless beam splitters in interferometry, *Am. J. Phys.* **49**, 882.
- [158] Zeilinger [1999] : A. Zeilinger, Experiments and the foundations of quantum physics, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288.
- [159] Zeilinger [2000] : A. Zeilinger, La téléportation quantique, *Pour la Science* **272**, p. 36.
- [160] Zeilinger *et al.* [1988] : A. Zeilinger, R. Gähler, C. Shull, W. Treimer et W. Mampe, Single and double-slit diffraction of neutrons, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067.
- [161] Zinn-Justin [1989] : J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford.
- [162] Zinn-Justin [2003] : J. Zinn-Justin, *Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction*, EDP Sciences/CNRS Éditions.
- [163] Zurek [1991] : W. Zurek, Decoherence and the transition from quantum to classical, *Physics Today*, October 1991, p. 36.
- [164] Zurek [2003] : W. H. Zurek, Decoherence, einselection and the quantum origin of the classical, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715.

Index

A

absorption stimulée 162, 604
action 463
 euclidienne 502
adjoint 50
alcalin 363, 572, 595, 658
algèbre de Lie 264, 282
 de $SO(3)$ 266
 de $SU(2)$ 268
algorithme de Grover 226
algorithme de Shor 228
ammoniac 155
amortissement de phase 675
amplitude
 de diffusion 512, 533
 d'hélicité 372
 de la polarisation 67
 de probabilité 26, 73, 107
analyseur 67, 258
angle de Bragg 42
angle de diffusion 510
anticommutateur 563, 678
antiferromagnétisme 555
antilinéaire 706
antiunitaire 706
antisymétrisation 548, 550
anyon 549
approximation
 adiabatique 496, 506
 de Born 533, 540, 571, 607
 de Born-Oppenheimer 175, 660
 de Brillouin-Kramers-Wentzel
 (BKW) 473
 de champ moyen 571
 de Hartree 586
 de Hartree-Fock 571, 587
 de la phase stationnaire 297, 451

des ondes tournantes :
 voir séculaire
des particules indépendantes 142
dipolaire 604, 617
markovienne 678, 687
quasi-résonante : voir séculaire
séculaire 161, 427, 445, 618, 629,
 688
semi-classique 167, 451, 481, 574,
 587, 602

atome 4

à deux niveaux 128, 166, 626
de Bohr 35
de Rydberg 643
d'hydrogène 35, 360
habillé 428, 646
muonique 642

axe de quantification du moment
 angulaire 340

B

bandes interdites 317
barrière centrifuge 357
barrière de potentiel 33, 309, 482, 484
basculement de phase 210
base
 de calcul 223
 orthonormée 48, 242
 standard (du moment angulaire)
 342
bases complémentaires 76, 99
bases incompatibles 76, 88
benzène 142
bit quantique : voir qubit
boson 549, 552
 de Higgs 9
 de jauge 431, 442
 W et Z 7, 442

bra 52, 299

Breit-Wigner 539, 718

butadiène 173

C

calcul quantique 222, 444

capture radiative 647

cas pur 107, 182

centre de masse 283

champ

de jauge 442

de Schrödinger 561, 578

électromagnétique quantifié 425,
609

scalaire 348

chat de Schrödinger 214, 677

chemin brownien 460

chemins indiscernables 27, 625

chromodynamique 9, 441

clé publique 78

clé secrète 78

coefficient

de Clebsch-Gordan 377

de diffusion 457, 637, 693

de réflexion 332, 484

de transmission 332, 484

de viscosité 634

cohérence 185, 212, 615, 628, 670

d'ordre un 621

d'ordre deux 622, 625

spatiale 172

temporelle (ou longitudinale) 172,
238

commutateur 56

composantes 48, 244

sphériques 353, 379, 606

standard 380

composition des moments angulaires
375

condensation de Bose-Einstein 572

conditions aux limites périodiques 322,
412

conditions de continuité 305, 309

conjugué hermitien 50, 247

connexion 494

constante

de Boltzmann 11

de couplage 8

de Fermi 543, 713

de gravitation 10

de Rydberg 36

de structure fine 37

contextualité 114, 207, 238

contextuel 208

contrefactuel 206

convergence en norme (ou forte) 243,
253

convergence faible 243, 253

corps noir 14, 40

corrélations quantiques 202, 205

couche complète 658

couplage

de Russell-Saunders 659

$j - j$ 659

minimal 431

spin-orbite 377, 659, 667

courant

de particules 429

de probabilité 301, 321, 334

électromagnétique 429

covariance 275

cryptographie quantique 79

cycles de fluorescence 633

D

décohérence 209, 616, 676, 699

décomposition spectrale 55, 251

décroissance exponentielle 329, 715

dégénérescence de Kramers 711

densité

de niveaux 323, 334

de probabilité 301

d'états 323

déphasage 516

déplacement chimique 154

déplacement Lamb 418, 598, 681, 690

dérivée covariante 430, 442

désaccord 149, 426, 626

désintégration 371

désintégration radiative 364

détection homodyne 421, 440

déterminant de Slater 551, 566

deutérium 5, 665

deutéron 6, 384, 526, 538, 647, 666

développement

asymptotique 592

- en ondes partielles 515
- perturbatif 590
- diffraction 20
 - des neutrons 21, 41
- diffusion
 - cohérente 45, 542
 - élastique 518, 527
 - incohérente 45, 542
 - inélastique 528
- dimension d'un espace de Hilbert 242
- dimension d'un groupe 261
- dispersion 27, 115
- distribution de Wigner 487, 488, 504, 703
- distribution quantique de clé (QKD) 79
- domaine (d'un opérateur) 246
- droite des noyaux 39, 661

E

- écho de spin 235
- effet
 - Aharonov-Bohm 472, 498, 507
 - Casimir 418, 443
 - de mémoire 678
 - photoélectrique 17, 607
 - tunnel 33, 484, 536
 - Zeeman 598
- électrodynamique quantique 129, 598
- électron 4
 - de valence 658
- électron π 139
- électron σ 139
- élément de matrice réduit 379, 381
- émission spontanée 167, 211, 610, 698
- émission stimulée (ou induite) 161, 606
- énergie
 - cinétique 277, 279, 356, 472, 568
 - de délocalisation 142
 - de dissociation 5, 661
 - de liaison 5
 - de point zéro 397, 410, 443
 - de recul 610, 614, 634
 - d'ionisation 5
 - du vide 416
 - potentielle 32, 278, 298
- ensemble complet d'opérateurs
 - compatibles 57, 113

- entropie de von Neumann
 - (ou statistique) 189, 197, 669
- équation
 - de Chapman-Kolmogorov 458, 501
 - de continuité 300, 321, 407, 432
 - de Dirac 418, 431, 595
 - de Gross-Pitaevskii 576
 - de Lindbald 680
 - de Schrödinger dépendant
 - du temps 299
 - de Schrödinger indépendante
 - du temps 299, 321
 - de Schrödinger non-linéaire 576
 - intégrale de la diffusion 533
 - pilote (ou maîtresse) 677, 687, 690, 695
 - radiale 515
- équations
 - de Bloch 670
 - de Bloch optiques 629
 - de Liouville 490
 - de Maxwell 11, 407
 - du mouvement 568
- espace
 - complet 242
 - de Fock 564
 - de Hilbert 48, 241
 - de Hilbert projectif 107, 493
 - de phase 322, 487
 - des états 47, 75, 106
 - des états de polarisation 69
- étalement du paquet d'ondes 298, 330
- état
 - classique 579
 - cohérent 400, 401, 419, 436
 - comprimé 420
 - de Bell 198
 - de diffusion 32, 309
 - de Fock 419, 563
 - de Hardy 201
 - de phase 406
 - du champ électromagnétique 418
 - du vide 410, 564
 - GHZ 210, 237
 - intriqué 179, 181
 - lié 32, 306, 308, 479, 521
 - non polarisé 215

pointeur 215, 683, 697
 propre 87
 pur 182, 184, 490
 semi-classique : voir cohérent
 singulet 374, 525, 553, 602, 652
 stationnaire 96, 121
 triplet 374, 525, 553, 602
 virtuel (ou anti-lié) 522
 éthylène 139
 évolution
 hamiltonienne (ou unitaire) 118,
 196, 628
 irréversible 118
 réversible 117
 excitation élémentaire 581
 expérience
 à choix retardé 32
 de Hanbury Brown et Twiss 623
 de Stern et Gerlach 84, 334

F

facteur
 de Landé 599
 de phase 107, 260
 de phase topologique 472
 gyromagnétique 82, 279, 388
 faisceau 509
 fermion 549, 552
 ferromagnétique 555
 fidélité 221
 filtre de Stern-Gerlach 86
 fluctuations quantiques 415, 418, 443,
 579
 fluctuations thermiques 415
 flux 510
 fonction d'onde 141, 287, 290, 295
 en représentation p 293
 en représentation x 293
 macroscopique 576
 radiale 356
 fonction
 d'autocorrélation 684
 de Bessel sphérique 516
 de Green 454, 500, 502, 532
 de partition 462
 spectrale 125, 693
 fonctionnelle génératrice 465, 466, 500
 force

 à courte portée 9
 à longue portée 8
 classique 404, 437
 de van der Waals 9, 639
 d'échange 554
 dissipative 632
 réactive 632, 646
 formaldéhyde 173
 formule de Trotter 460, 498
 formules de raccordement 477, 479,
 504
 fréquence
 de Bohr 35
 de Larmor 82, 147, 432
 de nutation 148
 de Rabi 148, 161, 445, 627, 670
 de Rabi du vide 428
 de résonance 160, 626
 négative 618
 positive 618
 fullérene 2, 24, 615

G

gaz de Fermi 559
 gaz rare 658
 générateur infinitésimal 252
 des rotations 262, 267, 339, 349
 des transformations de Galilée 262,
 275
 des translations 262, 291, 436
 des translations de temps 121, 262
 gluon 7, 9, 442
 granulation 679
 graviton 7, 10
 groupe
 connexe 261, 269
 continu 261
 de jauge 441
 discret 261
 de Lie 261
 des rotations $SO(3)$ 261
 $SU(2)$ 268, 281

H

halogène 658
 hamiltonien 96, 116
 de Jaynes-Cummings 427, 646

harmoniques sphériques 350, 515
 hélicité 69, 366
 hélium 5, 572, 651
 hiérarchie BBGKY 586

I

impulsion 255, 262
 de Fermi 559
 π 150
 $\pi/2$ 150
 indice de Maslov 481
 indiscernable 546, 554
 inégalité
 de Bell 200, 204
 de Heisenberg 27, 40, 115, 271, 294,
 329, 331, 403, 420
 de Heisenberg temporelle 98, 122
 de Schwartz 49
 information quantique 219
 intégrale d'échange 655
 intégrale de chemin (ou fonctionnelle)
 459, 463
 intégrale gaussienne 62, 466
 interactions
 électrofaibles 8, 441
 électromagnétiques 8
 faibles 9, 273, 543
 fortes 9
 gravitationnelles 9
 interférences 20, 472, 621, 645
 avec des neutrons 21
 avec des atomes froids 23
 avec des molécules 24, 615
 interféromètre à neutrons 43, 101, 446
 interféromètre de Mach-Zehnder 30
 invariance de jauge 468
 inversion de population 154, 162, 171
 ion moléculaire H_2^+ 175
 ions piégés 444
 isométrie 51

J

jauge de Coulomb (ou de
 rayonnement) 411, 602
 jauge de Lorentz 417

K

ket 52

L

lagrangien 284, 463, 467
 lame biréfringente 67
 lame séparatrice 24, 30, 422
 largeur de bande 620
 largeur de raie 123, 613, 718
 laser 163, 170
 lepton 7
 liaison σ 139
 ligne de Stokes 477, 483
 liouvillien 680
 localité 199
 loi
 de Boltzmann 10
 de Coulomb 8
 de conservation 262
 de dispersion 581
 de Lorentz 10
 de Malus 67
 de Planck 17, 168
 de Poisson 401, 438
 longueur
 de corrélation 462, 500
 de diffusion 519
 de diffusion singulet 526, 541
 de diffusion triplet 526, 541
 d'onde Compton 37
 d'onde de de Broglie 20
 d'onde thermique 572

M

magnéton de Bohr 600
 magnéton de Bohr nucléaire 600, 665
 magnon 233
 maille d'un cristal 42
 maser 163
 masse effective 319
 masse réduite 39, 283, 393
 matrice 49
 densité : voir statistique
 de passage 312, 316, 333, 712
 de Pauli 91, 427
 de rotation (ou de Wigner) 344

de transition (T) 369
 normale 62
 positive 63
 S 313, 518, 712
 statistique 190, 585
 strictement positive 63
 mécanique ondulatoire 287, 398
 mélange 182, 183
 impropre 195, 213, 217, 697
 propre 195, 217
 mélasse optique 634
 méson π 126, 386, 556, 582
 méson K 136
 mesure 110, 212
 de Bell 230
 de von Neumann 213, 335
 de Wiener 462
 idéale 110, 335
 méthode de Wigner-Weisskopf 614, 702, 715
 méthode variationnelle 131, 576, 563, 653
 microréversibilité 709
 microscope à effet tunnel 486
 modèle
 de Caldeira-Leggett 695
 en couches de l'atome 656
 en couches du noyau 666
 planétaire de l'atome 34
 standard 9, 431
 molécule 4
 diatomique 39, 333, 350, 393, 554, 660
 moment
 angulaire 255, 262, 339
 angulaire orbital 349, 383
 conjugué 130, 284, 416
 de Fermi 560
 dipolaire électrique 158, 173, 426, 605, 712
 dipolaire magnétique 82, 388, 665
 magnétique anormal 419
 mouvement brownien 691
 muon 8, 642

N

neutrino 5, 133, 542
 neutron 4, 542, 712

froid 20
 thermique 20
 niveau
 de Fermi 559
 de Landau 433
 d'énergie 32, 481
 de rotation 352, 554
 de rotation-vibration 664
 de vibration 397, 664
 quantifié 307
 Zeeman 96, 147
 noeud 307, 358
 nombre
 de Kraus 675
 de masse 4
 de niveaux 128, 139
 magique 666
 quantique magnétique 340
 quantique principal 342
 quantique radial 359
 nombre d'occupation 562, 573, 684
 norme d'un vecteur 49, 242
 norme d'un opérateur 246
 notation de Dirac 52
 noyau atomique 4
 noyau de mémoire 678
 nucléon 5
 numéro atomique 4

O

observable : voir propriété physique
 onde
 de spin 233
 entrante 313
 sortante 313
 partielle 357
 sphérique entrante 513
 sphérique sortante 513
 opérateur
 antilinéaire 706
 antiunitaire 259, 706
 auto-adjoint 50, 248
 borné 246
 compatible 57, 77, 113
 complètement positif 674
 d'annihilation (ou de destruction)
 394, 563
 de champ 418, 564

- de création 394
 - densité : voir statistique
 - de déplacement 403, 422, 437
 - de phase 406, 438
 - de quadrature 420, 424
 - de rotation 267, 343
 - de saut quantique 680
 - de translation 270
 - d'évolution 119, 425, 628
 - hermitien 50, 248
 - hermitien conjugué 50, 247
 - identité 50
 - impulsion 129, 247, 319
 - incompatible 77
 - linéaire 49
 - moment dipolaire électrique 605
 - nombre de particules 395, 565
 - non borné 246
 - positif 63
 - position 129, 247, 287, 319
 - scalaire 267
 - statistique 182, 183, 487, 627
 - statistique réduit 186, 627
 - tensoriel irréductible 381, 390
 - unitaire 50, 252
 - vectorel 268
 - vitesse 276, 431
 - opération de symétrie 257, 441
 - orbitale moléculaire 140
 - ordre à longue distance 3
 - ordre normal 620
 - oscillateur
 - harmonique 393, 465, 501
 - harmonique amorti 681, 689
 - harmonique forcé 417, 437
 - oscillations
 - de Rabi 150
 - de Rabi du vide 429
 - neutrino 135
- P**
- paquet d'ondes 294, 533
 - gaussien 330, 490, 696
 - paramagnétique 555
 - paramètre
 - de Lamb-Dicke 445
 - de saturation 630
 - d'impact 511
 - parité 272, 308, 354, 531, 554, 583
 - d'une particule 369
 - impaire 274, 583
 - paire 274
 - particule de matière 7
 - particule relative 283, 393
 - pas du réseau 3
 - permutation 550, 562
 - perturbation
 - dégénérée 561, 562
 - dépendant du temps 326
 - non dégénérée 561
 - indépendante du temps 560
 - phase de Berry (ou géométrique) 493, 497
 - phonon 37, 581
 - photodétecteur 24, 617
 - photon 7, 17
 - pic de Gamow 537
 - piège magnéto-optique 638
 - poids de Boltzmann 10, 462
 - point de rebroussement 32, 474, 479
 - point de vue
 - actif 257
 - de Heisenberg 127, 410
 - de l'interaction (ou de Dirac) 127, 445, 427, 684
 - de Schrödinger 126, 409
 - passif 256
 - polarisation
 - circulaire 69, 412
 - circulaire droite 69
 - circulaire gauche 69
 - de la lumière 66
 - elliptique 66, 98
 - d'un photon 72, 366
 - linéaire 65, 75, 412
 - polarisé 191
 - polariseur 66, 257
 - polariseur (λ, μ) 70
 - polynôme de Hermite 399
 - polynôme de Legendre 353, 515
 - population 185, 212, 627, 646
 - porte
 - cNOT 224, 446
 - cZ 446
 - de Hadamard 224
 - logique quantique 224

- portée effective 523
 - positron 7, 232, 583
 - positronium 232, 583
 - postulat de symétrisation 551
 - potentiel 32, 298
 - central 355
 - chimique 559, 576
 - coulombien 360, 484, 540, 654
 - de Coulomb instantané 411, 439
 - de Lennard-Jones 331
 - effectif 357, 523, 656
 - optique 530
 - périodique 314
 - scalaire 410
 - spin-orbite 378, 596
 - vecteur 410, 416, 433, 467, 498, 602
 - précession de Larmor 82, 150, 493
 - précession de Thomas 596
 - première zone de Brillouin 318
 - préparation 193
 - du système 76, 109, 113, 183
 - principe
 - de correspondance 129, 279
 - de Pauli 145, 551, 658
 - de superposition 47, 67, 106
 - d'incertitude de Heisenberg 27
 - probabilité
 - conditionnelle 201, 458
 - de présence 141, 291, 321, 488
 - de survie 124, 133
 - de transition 166, 605
 - processus markovien 458
 - produit
 - ordonné dans le temps
 - (ou produit- T) 464, 499
 - scalaire 48, 242
 - tensoriel 178, 181
 - projecteur 51
 - projection 71
 - propagateur 452, 481
 - euclidien 460, 500, 504
 - de Feynman 500
 - libre 455
 - retardé 452
 - propriété physique 87, 108
 - compatible 113
 - incompatible 114
 - quantique 76
 - proton 4
 - pseudovecteur 273
 - puits
 - carré fini 308
 - carré infini 306
 - de potentiel 32, 303, 479
 - sphérique 384, 519
 - purification 194
- Q**
- qubit 223
 - cible 224
 - de contrôle 224
 - quantification
 - dans une boîte 322, 412, 569
 - des niveaux d'énergie 35
 - du champ électromagnétique 407, 426, 429
 - quark 7
 - quasi-impulsion 315
 - quasi-particule 581
- R**
- radioactivité α 484
 - radioactivité β 5
 - rayon 107, 257, 259, 705
 - de Bohr 36, 295, 360
 - classique de l'électron 13
 - extraordinaire 67
 - ordinaire 67
 - rayonnement du corps noir 14, 415
 - rayonnement gaussien 622
 - réalisme 199
 - réalisme local 200, 207
 - réduction du paquet d'ondes 112, 218
 - référentiel tournant 148, 161, 491
 - réflexion quantique 33
 - refroidissement Doppler 632
 - refroidissement laser 626
 - registre de données 225
 - registre de résultats 225
 - règle
 - de Bohr-Sommerfeld 36, 480
 - de factorisation 74
 - de Hund 659
 - de sélection 606
 - de supersélection 108

- d'or de Fermi 328, 610
 - relation
 - d'anticommutation canonique (RAC) 563
 - de commutation canonique (RCC) 129, 130, 247, 253, 270, 272, 578
 - de commutation du champ électromagnétique 416, 440
 - de commutation du moment angulaire 267, 339
 - de fermeture 53, 251, 289, 320, 672
 - d'Einstein 638
 - de Planck-Einstein 19, 121
 - d'unitarité 531
 - renormalisation 9, 37, 417
 - renversement du temps 274, 311, 531, 708
 - représentation
 - de Kraus 672
 - des relations de commutation 271
 - de Wigner (voir distribution de)
 - irréductible 272, 347
 - projective 260
 - spinorielle 261
 - vectorielle 261
 - répulsion (ou non-croisement)
 - des niveaux 159, 660, 665
 - réseau réciproque 42
 - résolvante 60, 250, 455
 - résonance 150, 152, 166, 426, 539, 604
 - magnétique nucléaire (RMN) 147, 152
 - rotateur sphérique 351, 664
 - rydberg 36, 360
- S**
- saut quantique 673
 - section efficace
 - cohérente 540
 - de Rutherford 540
 - différentielle 510, 557
 - élastique 528
 - incohérente 540
 - inélastique 529
 - totale 511, 529, 557
 - semi-groupe dynamique 681
 - sensibilité d'un détecteur 619
 - séparabilité (d'un espace) 243, 472
 - simplement connexe 269
 - source 465, 466
 - classique 417, 437
 - de particules 303
 - du champ électromagnétique 11, 407, 438
 - sous-espace d'une valeur propre 54
 - spectre 249
 - continu 250, 288
 - de rotation 554
 - de niveaux 36
 - discret 250
 - sphère
 - de Fermi 560
 - de Poincaré-Bloch 94, 191, 494
 - dure 512, 521
 - spin 7, 81
 - statistique 549
 - de Bose, ou de Bose-Einstein 549
 - de Fermi, ou de Fermi-Dirac 549
 - de Maxwell-Boltzmann 573
 - structure fine 595, 659
 - structure hyperfine 595, 600, 665
 - superfluidité 582
 - superopérateur 672
 - superposition
 - cohérente 111, 192, 676
 - incohérente 192, 676
 - surface de Fermi 560
 - symétrie 255
 - de jauge 441
 - interne 441
 - symétrisation 548, 550
 - système
 - à deux niveaux 147
 - à nombre de niveaux fini 139
 - complet d'opérateurs (ou de propriétés physiques) compatibles 113
 - intégrable 481
 - quantique fermé 116, 197
 - quantique ouvert 628, 669
- T**
- téléportation quantique 228
 - température
 - critique 574

- de Curie 555
 - de Néel 555
 - de recul 635
 - Doppler 637
 - temps
 - de décohérence 210, 676, 696, 701
 - de relaxation 677, 690
 - de relaxation longitudinale T_1 154, 670
 - de relaxation transverse T_2 154, 234, 670
 - imaginaire (ou euclidien) 457, 462
 - terme
 - d'échange 571
 - de Darwin 642
 - de relaxation 670
 - diamagnétique 604, 644
 - direct 571
 - test 76, 107
 - idéal 110
 - maximal 113
 - théorème
 - adiabatique 493, 494
 - d'addition des harmoniques sphériques 354
 - de Bloch 315
 - de Feynman-Hellmann 131
 - d'Ehrenfest 122, 263
 - de Gleason 189
 - de Kochen-Specker 208
 - de nonclonage quantique 219
 - de purification de Schmidt 187
 - de représentation de Kraus 674
 - de Stone 252
 - de von Neumann 272, 435
 - de Wigner 259, 314, 706
 - de Wigner-Eckart 381, 391
 - GHJW 195
 - optique 530
 - spin-statistique 552
 - théorie
 - de Fermi 544
 - de jauge abélienne 441
 - de jauge non abélienne 431, 441
 - des perturbations dégénérée 561, 562
 - des perturbations dépendant du temps 326
 - des perturbations non dégénérée 561, 652
 - électrofaible 544
 - quantique relativiste 552, 598
 - trace 53, 60
 - partielle 186, 669
 - transfert d'impulsion 533
 - transformation
 - canonique 580, 584
 - de Bogoliubov 580
 - de Galilée 275
 - de jauge 411, 467
 - de jauge globale 430
 - de jauge locale 277, 291, 430
 - transition
 - dipolaire 366
 - dipolaire électrique 167, 369
 - dipolaire magnétique 369
 - radiative 364
 - transport parallèle 484
 - transposition 550
- V**
- valeur
 - moyenne 88
 - moyenne d'une propriété physique 109, 183
 - propre 53
 - propre dégénérée 54
 - variable cachée 73, 199
 - vecteur
 - axial 273
 - de Bloch 94, 191, 627, 670
 - de Jones 71
 - de Poynting 165, 603
 - d'état 106
 - polaire 272
 - propre 53
 - vie moyenne 36, 123, 613, 718



Physique statistique hors d'équilibre

Processus irréversibles linéaires

Noëlle Pottier

Le champ de la physique statistique hors d'équilibre est extrêmement vaste, et met en oeuvre des échelles très éloignées, depuis le nanomonde jusqu'aux structures cosmologiques. L'une des difficultés de la physique statistique de ces systèmes réside dans le fait que l'on ne dispose pas d'approche unifiée. L'ambition de ce livre est de dégager, à propos des systèmes physiques divers, quelques idées centrales communes aux différentes approches utilisées.

• 2007 • 978-2-86883-934-3 • 544 pages • 49 €



Transitions de phase et groupe de renormalisation

Jean Zinn-Justin

Le but de cet ouvrage est de familiariser le lecteur avec un concept, le groupe de renormalisation, concept qui permet d'expliquer les propriétés universelles de quantité de systèmes physique.

• 2005 • 2-86883-790-5 • 512 pages • 45 €



Les surfaces solides: concepts et méthodes

Stéphane Andrieu et Pierre Müller

Le livre présente une large vision de la physique des surfaces solides, depuis les concepts thermodynamiques de base, jusqu'à la surface "échange" entre cristal et environnement. Des exercices de difficultés variables complètent le cours. Cet ouvrage est destiné aux étudiants de Maîtrise, de 3^e cycle de physique ou de chimie de la matière condensée, et aux ingénieurs.

• 2005 • 2-86883-773-5 • 536 pages • 49 €



Einstein aujourd'hui

Alain Aspect, François Bouchet, Éric Brunet, Claude Cohen-Tannoudji, Jean Dalibard, Thibault Damour, Olivier Darrigol, Bernard Derrida, Philippe Grangier, Franck Laloë et Jean-Paul Pocholle

Ce livre a pour objectif de montrer combien les idées d'Einstein continuent à inspirer la science de ce début du XXI^e siècle. Il contient sept contributions : une introduction historique et six articles retraçant les travaux les plus importants d'Einstein et leur impact sur la physique d'aujourd'hui. Ce livre s'inscrit dans le cadre de l'année 2005, année mondiale de la physique.

• 2005 • 2-86883-790-5 • 512 pages • 45 €



Physique des solitons

Michel Peyrard et Thiery Dauxois

Dans cet ouvrage, les fondements de la physique des solitons sont introduits à partir d'exemples de la physique macroscopique. Les principales méthodes théoriques sont ensuite abordées, avant la présentation détaillée de nombreuses applications consacrées à des problèmes microscopiques de la physique des solides ou des macromolécules biologiques.

• 2004 • 2-86883-732-8 • 426 pages • 42 €



Physique mésoscopique des électrons et des photons

Eric Akkermans et Gilles Montambaux

Cet ouvrage propose une présentation générale du problème de la propagation des ondes dans les milieux aléatoires, en considérant les phénomènes physiques pour lesquels les effets d'interférences quantiques jouent un rôle essentiel. Il représente une solide introduction à la physique mésoscopique.

• 2004 • 2-86883-712-3 • 644 pages • 52 €

Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction

Jean Zinn-Justin

• 2003 • 2-86883-660-7 • 316 pages • 48 €

Lasers - Interaction lumière-atomes

Bernard Cagnac et Jean-Pierre Faroux

• 2002 • 2-86883-528-7 • 528 pages • 53 €

Hydrodynamique physique - Nouvelle édition, revue et augmentée

Étienne Guyon, Jean-Pierre Hulin et Luc Petit

• 2001 • 2-86883-502-3 • 640 pages • 54 €

Théorie des formes de croissance - Digitations, dendrites et flammes

Pierre Pelcé

• 2000 • 2-86883-477-9 • 394 pages • 39 €

Magnétisme et supraconductivité

Laurent-Patrick Lévy

• 1997 • 2-86883-380-2 • 480 pages • 49 €

Processus d'interaction entre photons et atomes

Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc et Gilbert Grynberg

• 1996 • 2-86883-358-6 • 648 pages • 59 €

Analyse continue par ondelettes

Bruno Torrèsani

• 1995 • 2-86883-377-2 • 256 pages • 30 €

Physique des plasmas (Vol. I et Vol. II)

Jean-Loup Delcroix et Abraham Bers

Vol. I : • 1994 • 2-86883-368-3 • 416 pages • 39 €

Vol. II : • 1994 • 2-86883-369-1 • 532 pages • 49 €

Des phénomènes critiques aux champs de jauge

Une introduction aux méthodes et aux applications de la théorie quantique des champs

Michel Le Bellac

• 1988 • 2-86883-359-4 • 640 pages • 59 €

Photons et atomes - Introduction à l'électrodynamique quantique

Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc et Gilbert Grynberg

• 1987 • 2-86883-535-X • 492 pages • 46 €