
Notes de cours sur la Mécanique quantique

Université Joseph Fourier, Grenoble ;

Master Physique M1

(version : 11 novembre 2015)

Frédéric Faure

<http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure>

Table des matières

0.0.1	Introduction	9
0.1	Rappels de mécanique classique	11
I	Les fondements	17
1	Une particule quantique sans spin, à 1 dimension (I)	19
1.1	Espace des états : les fonctions d'ondes	19
1.1.1	Espace vectoriel des fonctions d'ondes	19
1.1.2	Exemples importants	20
1.1.3	Le produit scalaire	23
1.1.4	Vecteur dual, espace dual	25
1.2	Opérateurs différentiels $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$	26
1.2.1	Définitions	26
1.2.2	Opérateurs linéaires	27
1.2.3	Opérateurs adjoints et autoadjoints	28
1.3	Évolution d'un état quantique	30
1.3.1	L'équation d'évolution	30
1.3.2	Exemples d'évolutions d'ondes (images et films)	31
1.4	Bases, et changement de bases	41
1.4.1	Base orthonormée	41
1.4.2	Relation de fermeture	43
1.4.3	Expression d'un opérateur dans une base	44
1.4.4	Changement de base (*)	45
1.5	Spectre d'opérateurs	45
1.5.1	Définition et propriétés générales	45
1.5.2	Spectre de l'opérateur \hat{x} , "base de position"	48
1.5.3	Spectre de l'opérateur \hat{p} , "base d'impulsion"	51
1.5.4	Spectre de l'opérateur \hat{H} , base des états stationnaires	53
1.6	Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure	57
1.6.1	Opération idéale de mesure d'un système quantique	57
1.6.2	Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique	64
1.6.3	Valeurs moyenne et variance de l'observable	66
1.6.4	Relation d'incertitude et relations de commutation	70

1.7	Résumé du chapitre 1	72
1.7.1	Fonction d'onde	72
1.7.2	Evolution d'un état quantique $\psi_t(x)$	75
1.7.3	Signification probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x)$	79
1.8	Conseils de Lecture	85
2	Une particule quantique sans spin à 1 dimension (II)	87
2.1	Interprétation des opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ comme générateurs	87
2.1.1	\hat{H} génère les translations dans le temps	87
2.1.2	Groupe des translations des états quantiques en espace	92
2.1.3	Groupe des translations en impulsion (*)	94
2.1.4	Générateurs en mécanique classique (*)	95
2.1.5	Représentation de Heisenberg (*)	96
2.2	Le potentiel harmonique ; Spectre de \hat{H} et évolution	98
2.2.1	Importance du potentiel Harmonique en physique	98
2.2.2	Résolution algébrique du spectre	102
2.2.3	Application : Modèle d'Einstein (1907) sur la capacité calorifique des matériaux	110
2.2.4	Application : les modes quantiques du champ électromagnétique dans le vide.	112
2.2.5	Un effet surprenant du "vide quantique" de photons : la force de Casimir (1948)	118
2.2.6	(*) Les états cohérents et leur évolution par l'oscillateur harmonique	120
2.3	Correspondances classique-quantique à l'aide du paquet d'onde Gaussien	130
2.3.1	Comptage semi-classique du nombre d'états. La loi de Weyl.	130
2.3.2	Applications	133
2.3.3	(*) Règle de quantification semi-classique de Bohr-Sommerfeld	136
2.3.4	(*) Représentation quantique dans l'espace de phase	139
2.4	Conseils de Lecture	143
3	Une particule à 3 dimensions sans spin	145
3.1	Une particule à 3 dimensions sans spin	145
3.1.1	Espace des états \mathcal{H}	145
3.1.2	L'espace \mathcal{H} comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$	146
3.1.3	(*) L'oscillateur Harmonique à 2 dimensions	149
3.2	Particule chargée dans un champ électromagnétique	149
3.2.1	Dynamique classique et invariance de Jauge	150
3.2.2	Équation de Schrödinger et invariance de Jauge Quantique	153
3.2.3	Effet Aharonov-Bohm	155
3.2.4	Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (*)	157
3.2.5	Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique	168

3.3	(*) Niveaux de Landau et spectre fractal de Hofstadter	169
3.4	Conseils de Lecture	171
4	Particule de spin 1/2	173
4.1	L'espace des états de spin	173
4.2	Rotation de 2π et 4π d'un spin	176
4.3	Générateurs des rotations et matrices de rotation	177
4.4	(*) Représentation de l'état de spin sur la sphère de Bloch	181
4.5	Groupe $SU(2)$ de rotation du spin, et relations de commutation	184
4.5.1	Non commutativité du groupe et relations de commutation	184
4.5.2	Rotation autour d'un axe \vec{u} quelconque	187
4.5.3	(*) Algèbre de Lie des rotations	188
4.5.4	(*) Groupe de Lie des rotations	188
4.5.5	(*) Représentation des opérateurs de rotation dans une base : groupe des matrices $SU(2)$	189
4.6	(*) Espace quantique total d'une particule à 3 dimensions avec spin 1/2 . .	190
4.6.1	Remarques	190
4.6.2	Une base de \mathcal{H}_{tot} et champ spinoriels	190
4.7	Autres degrés de liberté internes	191
4.8	Mesure de spin, application récente : la Cryptographie quantique	192
4.8.1	Cryptographie classique symétrique à clef secrète	192
4.8.2	Le protocole B.B.84 pour partager une clef secrète	193
4.9	Interaction du spin avec le champ électromagnétique	195
4.9.1	Cas de l'électron	195
4.9.2	Autres particules de spin 1/2	196
4.9.3	Évolution du spin seul, précession de Larmor	197
4.9.4	Résonance Magnétique Nucléaire (R.M.N.) et Imagerie Magnétique Résonante (I.R.M.)	199
4.10	Conseils de Lecture	202
5	Plusieurs particules	203
5.1	Plusieurs particules discernables	203
5.1.1	Pour deux particules	203
5.1.2	Opérateurs de \mathcal{H}_{total}	204
5.1.3	Pour N particules	204
5.2	Non localité de la mécanique quantique, le paradoxe E.P.R.	205
5.2.1	États enchevêtrés : états surprenants de l'espace total	205
5.2.2	Description quantique orthodoxe	205
5.2.3	Objection de Einstein-Podolsky-Rosen (E.P.R.) sur la non localité (1935)	208
5.2.4	Théories locales à variable cachées et inégalités de Bell (1964) . . .	209
5.2.5	Violation de l'inégalité par la mécanique quantique (1976)	210
5.2.6	Egalité de G.H.Z. (1989)	212

5.3	Plusieurs particules identiques	217
5.3.1	Deux particules identiques	217
5.3.2	Plusieurs particules identiques	220
5.4	Aperçu sur les particules élémentaires et forces élémentaires (*)	224
5.4.1	Liste des particules élémentaires	224
5.4.2	Les particules composées	226
II Outils et méthodes		229
6	Symétries et règles de conservation	231
6.1	Propriétés et méthodes de base	231
6.1.1	Spectre commun de deux opérateurs qui commutent	231
6.1.2	Application : recherche du spectre de \hat{H}	232
6.1.3	Loi de conservation et groupe de symétrie dynamique	233
6.1.4	Impulsion totale et conservation	236
6.2	Groupe de symétrie dynamique commutatif : électron dans un potentiel périodique cristallin, spectre en bandes.	238
6.2.1	Explication qualitative de la formation de bandes	239
6.2.2	Ondes de Bloch	240
6.3	Groupe non commutatif : les rotations et le moment angulaire	246
6.3.1	Générateurs du groupe de rotation dans $\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$	247
6.3.2	Moment angulaire total et conservation	251
6.3.3	Espace de représentation réductible et irréductible d'un groupe	253
6.3.4	Espace de représentation irréductible d'un groupe commutatif	254
6.3.5	Espaces de représentation irréductibles des groupes de rotation SU(2) et SO(3)	254
6.3.6	Application : calcul du spectre du rotateur rigide	260
6.4	Importance des représentations irréductibles en physique	264
6.4.1	Propriétés fondamentales : le Lemme de Schur et le théorème de Wigner	266
6.4.2	Exemple : Spectre de l'atome d'hydrogène	269
6.5	Composition des moments angulaires	274
6.5.1	Particule composée de deux particules de spin 1/2	274
6.5.2	Résultat général sur la composition de deux moments cinétiques	279
6.5.3	Application : symétrie d'isospin, et sections efficaces de réactions hadroniques	282
6.5.4	Règles de sélection et théorème de Wigner-Eckardt	284
6.6	Symétries fondamentales en physique	286
7	Introduction à la théorie de la diffusion	289
7.1	Introduction	289
7.2	Amplitude de diffusion $f(k, \theta, \varphi)$	291
7.3	Approximation de Born	300

7.4	Opérateur de diffusion, la matrice \hat{S}	303
7.5	Théorie des ondes partielles pour les potentiels centraux	304
8	Méthodes d'approximation ; résolution approchée	309
8.1	Théorie des perturbations stationnaires	309
8.1.1	Cas de niveaux non dégénérés	311
8.1.2	Exemple : vibration anharmonique d'un atome	313
8.1.3	Cas de niveaux dégénérés	315
8.2	Théorie des perturbations dépendant du temps	317
8.2.1	Rappels sur l'approximation dipolaire électrique	317
8.2.2	Effet d'une onde cohérente ; transitions dans le spectre discret . . .	320
8.2.3	Effet d'une onde incohérente	326
8.2.4	Transition vers les continuum ; La photo-ionisation ; Effet photoélec- trique	328
8.3	Méthodes variationnelles	332
8.3.1	Méthode variationnelle pour problèmes stationnaires	332
III	Mécanique quantique avancée	337
9	Statistiques quantiques et décohérence	339
9.1	Description d'un ensemble statistique d'états quantiques par un opérateur densité	339
9.1.1	Définition de l'opérateur densité	339
9.1.2	Formulation du postulat de la mesure avec la matrice densité	344
9.1.3	Opérateur densité pour un système à deux états	344
9.1.4	Equation d'évolution	345
9.1.5	Entropie de l'ensemble statistique	346
9.2	Opérateur densité partielle pour un système composé	354
9.2.1	Rappels sur les systèmes composés	354
9.2.2	Décomposition de Schmidt	358
9.2.3	Un modèle simple de décohérence	359
A	Formules	361
A.1	Analyse et intégrales	361
A.1.1	Intégrales Gaussiennes	361
A.1.2	Transformée de Fourier	362
A.2	Algèbre	363
A.2.1	Séries	363
A.2.2	Diagonalisation d'une matrice 2×2	363
A.2.3	Relations de commutation	363
A.2.4	Algèbre des matrices de Pauli	364
A.2.5	Relations sur les matrices	364

A.2.6	Inverse d'une matrice 2×2	364
A.2.7	Relations de commutations	365
A.3	Calcul différentiel dans \mathbb{R}^3	365
A.3.1	Rappels sur le calcul différentiel vectoriel.	365
A.3.2	En coordonnées sphériques :	366
A.3.3	Relations	367
B	Solutions des exercices	369
B.1	Chapitre 1	369
B.2	Chapitre 2	370
B.3	Chapitre 3	380
B.4	Chapitre 4	382
B.5	Chapitre 7	384

Avertissement

Ces notes sont encore provisoires. Certains passages n'ont pas encore été relus correctement.

Les marques @@ signifie qu'il faut compléter ou revoir le passage.

Le signe (*), signifie que le passage peut être sauté en première lecture, et sera probablement sauté lors de l'exposé.

Merci de me communiquer toute remarque ou correction (d'orthographe, d'expression, ou sur le contenu physique ou mathématique). Les remarques d'ordre pédagogique seront particulièrement les bienvenues : commentaires sur la progression pédagogique, sur les passages plus ou moins faciles à assimiler, et plus ou moins appréciés.

Ces notes ont été rédigées en utilisant le logiciel libre et gratuit **LyX** sous **Linux**. Pour les graphiques, nous avons utilisé **xfig** ou **inkscape**. Pour les calculs numériques, nous avons utilisé entre autres la librairie graphique C++ **root**. Pour certains calculs symboliques, nous avons utilisé **xcas** (logiciel libre et gratuit).

0.0.1 Introduction

0.0.1.1 But et objets de la mécanique quantique :

Le rôle de la théorie quantique est de décrire le comportement et donner les lois d'évolution des constituants microscopiques de la matière. Plus précisément, les phénomènes quantiques (que sont essentiellement des "phénomènes d'interférences" présentés plus loin) se manifestent pour des objets de petite taille Δx et/ou de petites impulsions Δp telles que

$$\Delta x \Delta p \simeq h$$

avec la **constante de Planck** :¹

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

on utilise aussi la constante appelée "h barre" :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

La théorie quantique est donc essentielle en physique des particules, nucléaire, physique atomique, moléculaire et physique du solide. Par ailleurs, comme les phénomènes macroscopiques résultent du comportement collectifs des objets microscopiques, la théorie quantique a des conséquences indirectes mais essentielles à l'échelle macroscopique.

Ordres de grandeurs (tiré du cours de l'X sur le Web) :

1. Remarque sur les dimensions : d'après les relations, $p = m \frac{dx}{dt}$ et $E = \frac{p^2}{2m}$, on a $p dx = \dots = 2E dt$ et on déduit que $[x] [p]$ et $[E] [t]$ ont les même dimensions.

Système	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Ouverture a (m)	$p.a/h$
Homme passant une porte	70	1	1	10^{34}
Globule rouge dans capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{11}
Electron à travers une fente	$9 \cdot 10^{-31}$	700	10^{-6}	1

0.0.1.2 Différences et relations entre mécanique classique et mécanique quantique

- Le changement radical entre la mécanique quantique et la mécanique classique est essentiellement que en mécanique classique une particule est un **objet ponctuel** décrit par un point (\vec{x}, \vec{p}) dans l'espace des phases (position - vitesse), alors que en mécanique quantique, une particule est un **objet étendu**, décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$. Une conséquence est la possibilité d'interférences. Le rôle de la mécanique est de donner les lois qui gouvernent l'évolution de ces objets. Ce sont les **équations de Hamilton** (ou Newton) dans le cas classique et l'**équation de Schrödinger** dans le cas quantique.
- La théorie quantique est valable pour des constituants élémentaires ou pour une assemblée de quelques constituants (atomes molécules) tant qu'il sont parfaitement "isolés" de leur environnement. Ici le mot "**isolé**" signifie précisément que le système étudié ne modifie pas son environnement au sens où il ne change pas l'état quantique de l'environnement de façon "significative". Voir discussion précise à la section 1.6.1 page 57. On ne peut pas parler de la fonction d'onde d'une balle ou même d'une poussière qui sont des objets non isolés. En principe une théorie complète devrait pouvoir décrire toutes les échelles de la nature. A l'heure actuelle on ne sait pas rendre compatible de façon totalement satisfaisante, la théorie quantique avec l'aspect "classique" de la nature à l'échelle macroscopique. Cela est discuté depuis longtemps, voir le paradoxe du chat de Schrödinger. Voir par exemple [Cla88],[Har02],[DEC⁺96] pour les développements récents à ce sujet.
- Si le système étudié n'est pas isolé et influence un système extérieur, il est nécessaire d'inclure ce système extérieur dans la description quantique. Cette affirmation sera justifiée page 168. Sinon, on peut se contenter d'une description classique du système extérieur.

0.0.1.3 Place de la théorie quantique en physique :

On oppose :

théorie Classique et théorie Quantique.

Théorie non relativiste, relativiste et relativité générale (où l'énergie et la matière influencent la courbure de l'espace temps) ;

Cela donne le tableau suivant :

(A droite et en dessous, se trouve chaque fois une théorie supposée plus générale que la précédente.)

Mécanique :	Classique	Quantique
Non relativiste	Mécanique de Newton (1687)	Mécanique quantique(1925)
Relativiste	Relativité restreinte (1905) Equations de Maxwell (1865)	Théorie Quantique des champs (≥ 1930)
Relativité Générale	Relativité générale (1916)	... ?théorie des cordes ?...

0.0.1.4 Autres remarques

- Esprit du cours : introduction à la mécanique quantique ; présentation à travers des exemples physiques autant que possible. Les notions mathématiques ne sont introduites que lorsque elles sont jugées nécessaires.

0.0.1.5 Prérequis supposés

- En mathématiques : notion d'espace vectoriel, de transformée de Fourier.
- En physique : mécanique analytique, Hamiltonienne. Voir [Fau10c] ou Section 0.1.
- En mécanique quantique : problèmes 1D stationnaire,...

0.0.1.6 Références conseillées :

on insiste sur l'importance de travailler le cours avec des livres.

Livres en français : Cohen [CBF], Feynmann[Fey63], Messiah [Mes64], Basvedant [Bas86].

Livres en anglais :

- Bransden[BC89], et plus difficiles : Sakurai[J.J85], Ballentine[L.E90].

Aspects mathématiques :

- Gustavson [SI00], et plus avancés : [Tay96a], [RS72].

0.1 Rappels de mécanique classique

La théorie de la mécanique quantique a été découverte par Heisenberg, Schrödinger et d'autres au début du XXème siècle. Elle décrit la matière par des "ondes de matière" qui évoluent selon l'équation de Schrödinger. Ces ondes ont une signification probabiliste en physique. Avant, les constituants de la matière étaient décrit par les équations de la "mécanique classique" (Newton 1686, Hamilton 1833) qui sont des lois déterministes pour les trajectoires des particules. Nous rappelons quelques aspects de la mécanique classique dans cette Section. A la Section 1 suivante on expliquera le passage entre les descriptions classique

et quantique en terme de paquet d'onde, assimilable à une particule et avec le "principe de correspondance" (qui se formalise avec le théorème d'Egorov).

On appelle **mécanique classique**, les lois fondamentales de la physique en générale antérieures à la mécanique quantique mais plus précisément les lois « non quantiques ». On discutera de cette distinction précisément plus loin. En mécanique classique il y a :

- Les loi de Newton et de Hamilton : elles définissent les équations du mouvement pour les éléments de matière ou particules élémentaires soumises à différentes forces.
- Les lois de Maxwell : elles décrivent l'évolution des champs électromagnétiques et les forces qu'ils exercent sur la matière chargée.

Ensuite, avec la physique statistique (qui contient la thermodynamique), à partir de ces lois fondamentales, on peut décrire les « milieux continus » comme les gaz, les fluides, les matériaux, les plasmas etc..

La théorie de la relativité d'Einstein (relativité restreinte en 1906 puis relativité générale 1916) est considérée aussi comme une théorie de la mécanique classique (car non quantique). Elle propose un nouveau cadre théorique plus géométrique dans l'espace-temps pour formuler les équations de mouvement de la matière et des champs électromagnétiques.

0.1.0.7 Équations de mouvement :

Notons $x(t) \in \mathbb{R}^d$ la **position d'une particule** à l'instant $t \in \mathbb{R}$. (il est habituel de considérer les dimensions d'espaces $d = 1, 2, 3$). La fonction $t \in \mathbb{R} \rightarrow x(t) \in \mathbb{R}^d$ s'appelle la **trajectoire de la particule**.

Définition 0.1.1. « Loi de Newton 1687 ». La trajectoire d'une particule de masse $m > 0$ et soumise à une **force** $F(x, t) \in \mathbb{R}^d$ est déterminée par l'équation différentielle ordinaire :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x, t) \quad (0.1.1)$$

avec la donnée des conditions initiales de position $x(0)$, et vitesse $\frac{dx}{dt}(0)$.

Il est préférable de transformer l'équation du deuxième ordre en équation du premier ordre. Avec l'hypothèse de force potentielle, cela donne les équations de Hamilton :

Définition 0.1.2. On supposera que $F(x, t)$ est une **force potentielle** c'est à dire qu'elle peut s'écrire sous la forme particulière² :

$$F = - \left(\frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_d} \right) =: - \frac{\partial V}{\partial x} \quad (0.1.2)$$

2. Localement il est nécessaire et suffisant que $\text{rot}(F) = 0$

avec une fonction $V(x, t) \in \mathbb{R}$ appelée **énergie potentielle**. Posons l'**impulsion** :

$$p := m \frac{dx}{dt} \in \mathbb{R}^d \quad (0.1.3)$$

et introduisons la fonction réelle suivante, appelée **Hamiltonien** (ou énergie totale)

$$H(x, p, t) := \frac{1}{2m} |p|^2 + V(x, t) \in \mathbb{R} \quad (0.1.4)$$

(Le premier terme $\frac{1}{2m} |p|^2 = \frac{1}{2} m \left| \frac{dx}{dt} \right|^2$ s'appelle l'**énergie cinétique**).

Proposition 0.1.3. « *Équations de Hamilton 1833* » Les équations de Newton (0.1.1) peuvent s'écrire sous la forme :

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (0.1.5)$$

déterminant un champ de vecteur $\mathcal{V} := \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial x} \right)$ sur l'**espace des phases** $(x, p) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ (figure 0.1.1).

Démonstration. On calcule

$$\frac{\partial H}{\partial p} \stackrel{(0.1.4)}{=} \frac{1}{m} p \stackrel{(0.1.3)}{=} \frac{dx}{dt}$$

et

$$-\frac{\partial H}{\partial x} \stackrel{(0.1.4)}{=} -\frac{\partial V}{\partial x} \stackrel{(0.1.2)}{=} F \stackrel{(0.1.1)}{=} m \frac{d^2x}{dt^2} \stackrel{(0.1.3)}{=} \frac{dp}{dt}$$

□

Remarque 0.1.4. L'aspect antisymétrique assez particulier des équations de Hamilton (0.1.5) laisse déjà entrevoir d'une certaine façon la mécanique quantique ondulatoire. En 1833 Hamilton a utilisé au départ ces équations pour exprimer l'optique géométrique des rayons qui n'est qu'une approximation de l'optique ondulatoire [GS90]. Nous verrons de façon analogue que la mécanique classique est une approximation de la mécanique quantique ondulatoire.

0.1.0.8 Exemples

Il faut savoir que pour les problèmes à un degré de liberté, $d = 1$ (donc l'espace des phases est $(x, p) \in \mathbb{R}^2$ de dimension 2), et $H(x, p)$ indépendant de t , alors les équations du mouvement sont solubles. En dimension plus grande elles ne le sont pas en général, sauf exceptions comme le problème à deux corps qui est soluble car il se ramène en fait à un problème à un degré de liberté. Plus généralement ces problèmes solubles sont appelés **systèmes intégrables** [Arn76]. L'étude du chaos déterministe est consacrée au contraire à l'étude des problèmes parmi les « plus simples » qui ne sont pas solubles.

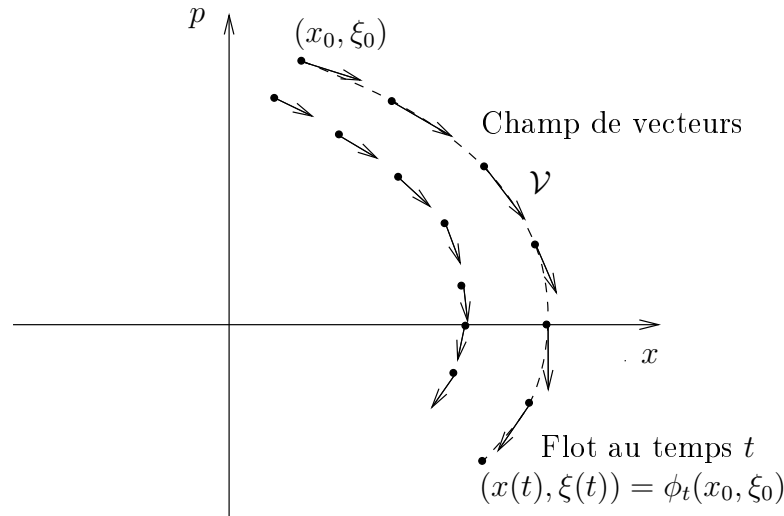


FIGURE 0.1.1 – Champ de vecteurs de Hamilton \mathcal{V} et flot Hamiltonien ϕ_t dans l'espace des phases.

Exemple 0.1.5. « Le problème à deux corps » C'est un système intégrable d'importance historique car c'est par lui que Newton a écrit (0.1.1) en 1687. A l'échelle du système solaire, on peut considérer la Terre comme un point de masse $m = 6.10^{24}$ kg à la position $x \in \mathbb{R}^3$ soumise à la force d'attraction gravitationnelle de la part du soleil (situé en $x = 0$) :

$$F(x) = -C \frac{u}{|x|^2}$$

avec $u = \frac{x}{|x|}$ vecteur unitaire et $C = \mathcal{G} \cdot m \cdot m_S$ avec la masse du soleil $m_S = 2.10^{30}$ kg et la constante de gravitation universelle $\mathcal{G} = 6,67.10^{-11}$ N.m².kg⁻². Cette force dérive de l'énergie potentielle

$$V(x) = -C \frac{1}{|x|}. \quad (0.1.6)$$

L'équation du mouvement obtenue est $\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m}F(x) = -\mathcal{G} \cdot m_S \frac{u}{|x|^2}$. Remarquer que curieusement la masse de la Terre n'y intervient pas. Cela signifie que par exemple une poussière (ayant une autre masse) qui serait à la place de la Terre (même position et même vitesse) aurait la même trajectoire autour du Soleil. Cette remarque appelée « **principe d'équivalence** » a conduit Einstein à la théorie de la relativité où la gravitation n'est plus une force mais découle de la géométrie de l'espace temps.

De façon analogue mais à une toute autre échelle, dans un atome d'hydrogène, un électron de masse $m = 9,31.10^{-31}$ kg est soumis à la « force de Coulomb » de la part du proton

$$F(x) = -C' \frac{u}{|x|^2}, \quad V(x) = -C' \frac{1}{|x|}$$

avec $C' = k_C q \cdot q$ où $q = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{C}$ est la charge élémentaire de l'électron et du proton et $k_C = 9 \cdot 10^9 \text{Nm}^2 \text{C}^{-2}$ est la constante de Coulomb.

Dans ces deux problèmes, grâce à la forme particulière de $V(x)$, on peut résoudre exactement les équations du mouvement et obtenir que les trajectoires de la planète (respect. de l'électron) sont des ellipses (ou paraboles ou hyperboles selon la condition initiale) [Arn76].

Exemple 0.1.6. « Puits de potentiel, oscillateur Harmonique ». A une dimension $d = 1$ on s'intéresse à une particule près d'un minimum local de l'énergie potentielle $V(x)$ que l'on suppose en $x = 0$ avec $V(0) = 0$. Par développement de Taylor, on écrit :

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 + O(x^3)$$

avec $k = \frac{d^2 V}{dx^2}(0) > 0$. En ne gardant que ce premier terme (comme première approximation) le Hamiltonien s'écrit :

$$H(x, p) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} k x^2 \quad (0.1.7)$$

et s'appelle le modèle de l'**oscillateur harmonique**. Les trajectoires sont des ellipses dans l'espace des phases³, voir figure 0.1.2.

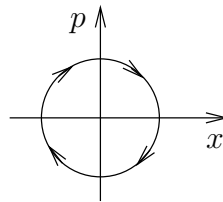


FIGURE 0.1.2 – Une trajectoire de l'oscillateur harmonique dans l'espace des phases. La position $x(t)$ et la vitesse $v(t) = \frac{1}{m} p(t)$ oscillent en quadrature.

3. Avec le changement de variables $X := \sqrt{\frac{k}{2}} x, Y := \frac{p}{\sqrt{2m}}$ et posant $\omega := \sqrt{\frac{k}{m}}, Z = X + iY$, (0.1.5) donne l'équation de mouvement $\frac{dZ}{dt} = -i\omega Z$ qui donne le mouvement de rotation $Z(t) = Z(0) e^{-i\omega t}$.

Première partie

Les fondements

Chapitre 1

Une particule quantique sans spin, à 1 dimension (I)

Dans ce chapitre il y a beaucoup de rappels du cours de licence, mais avec une présentation aussi un peu plus formelle. Nous allons étudier une particule quantique se déplaçant à une dimension x . Il s'agit d'une particule sans degré de liberté interne (sans spin).

Pour fixer les idées, il peut s'agir d'un atome vibrant au coeur d'un matériau ou dans une molécule, soumis aux forces des atomes voisins. Il peut aussi s'agir d'un électron libre se déplaçant dans un fil conducteur (en oubliant le spin).

Dans les premières sections on suppose que la particule quantique est **isolée de son environnement**. Précisément cela signifie que son mouvement n'influence pas le reste de la nature (les particules environnantes). Par contre on accepte que **son environnement exerce sur elle une certaine force** F décrite par une fonction énergie potentielle $V(x)$, d'après la relation $F(x) = -dV/dx$. (La force pouvant même dépendre du temps, mais nous la supposons indépendante du temps dans ce chapitre).

Avec ces hypothèses, la théorie quantique nous permet de décrire l'état dynamique de la particule par une fonction d'onde. Bien sûr pour être valables en pratique, ces hypothèses nécessitent des approximations. Il est important de noter que le terme "**particule**" sera employé mais que c'est un terme trompeur, puisqu'**il faut imaginer une onde qui est un objet étendu et non ponctuel**.

1.1 Espace des états : les fonctions d'ondes

1.1.1 Espace vectoriel des fonctions d'ondes

Une **fonction d'onde** permet de décrire l'état spatial d'une particule. C'est une fonction à valeurs complexes. Si l'espace est à une dimension (paramétré par la position $x \in \mathbb{R}$), une fonction d'onde est :

$$\psi : x \in \mathbb{R} \rightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}$$

L'ensemble des fonctions d'ondes noté \mathcal{H} forme un **espace vectoriel complexe** car si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$, alors la somme et le produit par une constante complexe appartiennent aussi à cet ensemble¹ :

si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$ alors :

$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H} \quad (1.1.1)$$

$$\phi = \lambda\psi_1 \in \mathcal{H} \quad (1.1.2)$$

Mais il s'agit d'un espace vectoriel **de dimension infinie** (voir plus loin); cela est lié au fait que une fonction ψ est déterminée par les valeurs de $\psi(x)$ prises en une infinité de valeurs de x différentes.

Dans la **notation de Dirac** on convient de représenter une fonction d'onde ψ par le symbole $|\psi\rangle$ et appelé **ket**. Ainsi on écrira pour eq.(1.1.1)

$$|\varphi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle,$$

$$|\phi\rangle = \lambda|\psi_1\rangle.$$

Il n'y a rien de nouveau dans cette notation, sauf peut être l'image que l'on se fait d'une fonction d'onde. L'image traditionnelle est une fonction $x \rightarrow \psi(x)$ représentée par son graphe. Dans la notation de Dirac, on imagine plutôt un point de l'espace vectoriel \mathcal{H} , (qui est l'extrémité d'une flèche). Cette image vectorielle suggérée par Dirac (et les mathématiciens) a des avantages certains, mais notre imagination ne permet pas de dépasser la dimension trois, alors que \mathcal{H} est de dimension infinie ! Voir figure (1.1.1).

1.1.2 Exemples importants

Voici deux exemples importants de fonctions d'ondes à une dimension. On se contente de donner ici leur expression et représentation. Leur interprétation physique et mathématique sera donnée plus loin.

1. En mathématiques, un **groupe** est un ensemble G munit d'une loi interne notée $.$: $(G, G) \rightarrow G$ qui est associative, c'est à dire $\forall a, b, c, a.(b.c) = (a.b).c$ telle qu'il y ait un élément appelé identité, noté 1 , vérifiant : $1.g = g.1 = g, \forall g \in G$, et tel que tout élément $g \in G$ ait un inverse noté g^{-1} , c'est à dire : $\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G, g.g^{-1} = g^{-1}.g = 1$.

Un groupe est dit **commutatif** si $\forall g, h \in G, g.h = h.g$. Dans ce cas il est habituel de noter la loi interne par le signe $+$ ($g.h = g + h$).

Un **espace vectoriel complexe** E est un ensemble munit d'une loi interne notée $+$, telle que $(E, +)$ est un groupe commutatif, et munit d'une loi externe notée $.$: $(\mathbb{C}, E) \rightarrow E$ qui est distributive par rapport à la loi $+$: $\lambda.(v + w) = \lambda.v + \lambda.w$.

On parle d'**espace vectoriel réel** si la loi externe est : $(\mathbb{R}, E) \rightarrow E$.

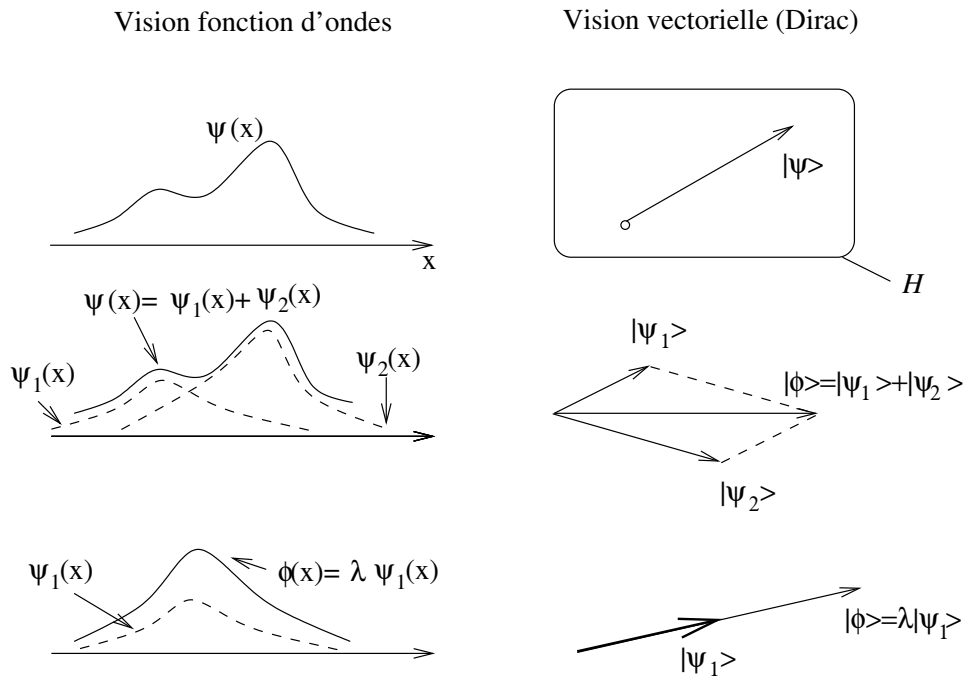


FIGURE 1.1.1 – Cette figure illustre l’aspect vectoriel de l’espace des fonctions d’ondes.

1.1.2.1 Les ondes planes

L’onde plane d’impulsion $p \in \mathbb{R}$ est :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \quad (1.1.3)$$

$$|p\rangle : \text{notation de Dirac} \quad (1.1.4)$$

Remarque : l’intérêt du préfacteur sera montré plus loin, avec la relation de fermeture, cf eq(1.5.9).

1.1.2.2 Paquet d’onde Gaussien

Le **paquet d’onde Gaussien** de position moyenne $x_0 \in \mathbb{R}$, d’impulsion moyenne $p_0 \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma \in \mathbb{R}$ est :

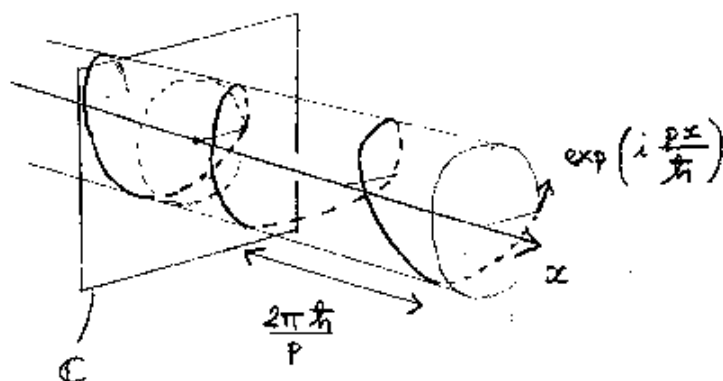


FIGURE 1.1.2 – Onde plane, avec $p > 0$, voir (1.1.3).

$$\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i \frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.1.5)$$

$$|x_0, p_0, \sigma\rangle : \text{notation de Dirac} \quad (1.1.6)$$

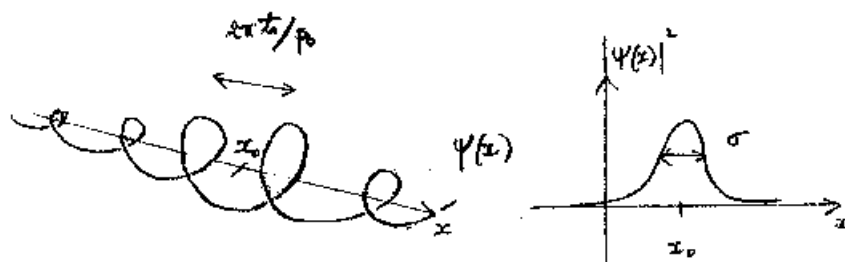


FIGURE 1.1.3 – Paquet d'onde Gaussien, voir (1.1.6).

Remarques :

- la valeur du préfacteur sera justifiée plus loin, pour des raisons de normalisation, voir exercice 1.1.2.
- Lorsque la largeur $\sigma \rightarrow \infty$, le paquet d'onde Gaussien tend vers une onde plane d'impulsion p_0 (à condition de modifier aussi le préfacteur).

1.1.3 Le produit scalaire

Afin de pouvoir distinguer de manière quantitative deux fonctions d'ondes différentes, on introduit le produit scalaire.

Le **produit scalaire Hermitien** de deux fonctions d'ondes $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est le nombre complexe noté $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ défini par² :

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx \quad (1.1.7)$$

où $\overline{\psi_1(x)}$ est le nombre complexe conjugué de $\psi_1(x)$. (Une difficulté mathématique apparaît : on doit se restreindre aux fonctions pour lesquelles l'intégrale a un sens, i.e. n'est pas divergente. Cela définit l'espace de Hilbert, voir plus loin.)

La notation de Dirac $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ pour le produit scalaire fait clairement intervenir les deux vecteurs $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, mais aussi la notation $\langle\psi_1|$ qui correspond au fait que l'on a pris le conjugué de la fonction $\psi_1(x)$.

Comme en géométrie Euclidienne, on peut interpréter le produit scalaire $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ comme la composante du vecteur $|\psi_2\rangle$ projetée orthogonalement sur le vecteur $|\psi_1\rangle$. Voir la figure 1.1.4. Intuitivement $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ renseigne donc si la fonction $\psi_2(x)$ est plus ou moins "composée" de la fonction $\psi_1(x)$.

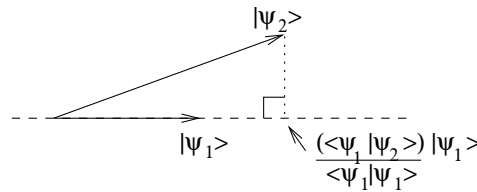


FIGURE 1.1.4 – Schéma du produit scalaire de deux fonctions d'ondes.

Les deux fonctions sont **orthogonales** si $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$.

Comme en géométrie Euclidienne, $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$ définit la **norme** au carré de la fonction ψ . En terme de fonction, cela donne³

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx > 0$$

2. Par définition, un **produit scalaire Hermitien** $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ sur un espace vectoriel \mathcal{H} doit vérifier les propriétés suivantes :

1. $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \overline{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}$ (complexe conjugué).
2. $\langle\psi_1|\lambda\psi + \mu\varphi\rangle = \lambda\langle\psi_1|\psi\rangle + \mu\langle\psi_1|\varphi\rangle$: linéarité à droite
3. $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ avec égalité si et seulement si $|\psi\rangle = 0$.

On déduit de (1) et (2) l'antilinéarité à gauche : $\langle\lambda\psi + \mu\varphi|\phi\rangle = \bar{\lambda}\langle\psi|\phi\rangle + \bar{\mu}\langle\varphi|\phi\rangle$. Dans le cas présent, ces trois propriétés sont vérifiées ci-dessous.

3. Comme $\|\psi\|^2 \in \mathbb{R}$, cette équation montre que $|\psi(x)|^2 dx$ n'a pas d'unité, et donc que en dimension 1, $\psi(x)$ a l'unité de " $1/\sqrt{\text{longueur}}$ ".

et donc la norme carré $\|\psi\|^2$ est la surface sous la courbe positive $|\psi(x)|^2$.

On dit qu'un vecteur est **normalisé** si $\|\psi\| = 1$, c.a.d. $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Cela signifie en terme vectoriel que le vecteur est de longueur 1. En terme de fonction cela signifie que la surface sous la courbe $|\psi(x)|^2$ est égale à 1.

(Cette notion sera essentielle page 63 pour interpréter $|\psi(x)|^2$ comme une densité de probabilité de présence lors de la détection de la particule, voir eq(1.6.3)).⁴

Il faut remarquer qu'il y a des fonctions dont la norme est infinie. Par exemple pour une onde plane, $\langle\psi_p|\psi_p\rangle = \int_{\mathbb{R}}(1/h)dx = \infty$ d'après (2.2.22). L'espace des fonctions pour lesquelles la norme est finie sera noté \mathcal{H} dans la suite et appelé l'**espace de Hilbert**⁵ des fonctions d'ondes (appelé aussi l'espace des fonctions de carré sommable). D'un point de vue physique cette restriction sera importante pour parler de la probabilité de présence de la particule lors de sa détection, et d'un point de vue mathématique, c'est aussi important car l'espace de Hilbert aussi noté :

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$$

possède des propriétés très intéressantes, notamment vis à vis de la transformée de Fourier, voir [RS72, CB73], et se prête bien à la théorie spectrale.

Exercice 1.1.1. Montrer que l'espace des fonctions de carré sommable est un espace vectoriel. (il faut vérifier les relations (1.1.1)).

Exercice 1.1.2. Montrer que le paquet d'onde gaussien (1.1.6) est normalisé.

Exercice 1.1.3. Calculer le produit scalaire entre deux paquet d'ondes Gaussien $|x_0, p_0, \sigma\rangle$ et $|x'_0, p'_0, \sigma\rangle$, et interpréter le résultat.

Remarques et propriétés utiles :

- On a pour $\lambda \in \mathbb{C}$,

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

$$\langle\lambda\psi_1|\psi_2\rangle = \bar{\lambda}\langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

$$\langle\psi_1 + \psi_2|\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_3\rangle + \langle\psi_2|\psi_3\rangle$$

4. En général pour un produit scalaire hermitien, on peut montrer les deux propriétés suivantes :

1. $|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle$: inégalité de Schwartz
2. $\|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\|$: inégalité triangulaire

Ces deux égalité sont vérifiées si et seulement si les deux vecteurs sont colinéaires (i.e. $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$)

5. Une définition précise de cet espace est

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) := \overline{\{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})\}}$$

où $C_0^\infty(\mathbb{R}) := \{\varphi \in C^\infty, \exists R > 0, \forall |x| > R, \varphi(x) = 0\}$ est l'ensemble des fonctions infiniment dérivables à support compact (i.e. nulle en dehors d'un intervalle) et qui sont donc de carré sommable et $\overline{\{\cdot\}}$ signifie la fermeture ou complétion pour la norme $\|\varphi\| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}$ (i.e. on considère toutes les limites possibles des suites de Cauchy, Voir [RS72] page 39).

Démonstration. $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx = \overline{\int \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} dx} = \overline{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}$. etc...

□

- D'autres espace de Hilbert que l'on rencontre souvent pour décrire une particule à une dimension sont

- Pour décrire une particule confinée dans le segment $x \in [0, L]$, c'est l'espace des fonctions de carré sommable $\psi(x)$, s'annulant en dehors du segment, et noté :

$$\mathcal{H} = L^2([0, L])$$

- Pour décrire une particule confinée sur un cercle S^1 (par exemple un électron dans un petit fil conducteur circulaire, appelé **fil quantique**), c'est l'espace des fonctions de carré sommable périodiques $\psi(\theta)$, où θ est la position angulaire sur la fil circulaire, et noté :

$$\mathcal{H} = L^2(S^1)$$

- Il est parfois utile de considérer d'autres produits scalaires que (1.1.7) (et d'autres normes associées). C'est ainsi que l'on définit les **espaces de Sobolev** par exemple [Tay96a].

1.1.4 Vecteur dual, espace dual

Mathématiquement, on peut interpréter le produit scalaire autrement : pour $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vecteur fixé, l'opération noté $\langle \phi |$ (en notation de Dirac) :

$$\langle \phi | : \begin{cases} \mathcal{H} & \longrightarrow \mathbb{C} \\ |\psi\rangle & \longrightarrow \langle \phi | \psi \rangle \end{cases}$$

est une application qui à un vecteur quelconque $|\psi\rangle$ lui associe un nombre complexe (le résultat du produit scalaire avec $|\phi\rangle$). Cette opération est linéaire car $\langle \phi | \lambda\psi_1 + \mu\psi_2 \rangle = \lambda\langle \phi | \psi_1 \rangle + \mu\langle \phi | \psi_2 \rangle$. On dit alors que $\langle \phi |$ est une **forme linéaire** sur \mathcal{H} , ou aussi appelé un **vecteur dual**. L'espace des vecteurs duaux (formes linéaires sur \mathcal{H}) est noté \mathcal{H}^* , et appelé **espace dual**. Le vecteur dual $\langle \phi |$ est aussi appelé **bra** (dans la littérature physique).

On vient de voir que à partir d'un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, on peut construire un vecteur dual noté $\langle \phi | \in \mathcal{H}^*$, grâce au produit scalaire. Inversement, un théorème important (le Lemme de Riesz, voir [RS72] page 43) montre que tout vecteur dual s'obtient de cette façon. On a donc **l'isomorphisme de Riesz** :

$$|\phi\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow \langle \phi | \in \mathcal{H}^*$$

définit à partir du produit scalaire.

Il est important de noter que

$$\begin{aligned} \text{si } |\phi\rangle &= \lambda|\psi_1\rangle + \mu|\psi_2\rangle, \\ \text{alors } \langle \phi | &= \bar{\lambda}\langle \psi_1 | + \bar{\mu}\langle \psi_2 | \end{aligned}$$

Si la notion de vecteur dual vous paraît trop abstraite, il suffit de retenir qu'un vecteur dual $\langle \phi |$ sert à effectuer le produit scalaire $\langle \phi | \psi \rangle$ avec un autre vecteur.

1.2 Opérateurs différentiels \hat{x} , \hat{p} , \hat{H}

1.2.1 Définitions

Un **opérateur** transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur). C'est donc une opération dans l'espace des fonctions d'ondes \mathcal{H} . Voici la définition des trois opérateurs \hat{x} , \hat{p} , \hat{H} d'après leur action sur des fonctions. On donnera plus loin leur interprétation physique et mathématique, ce qui justifiera leur définition.

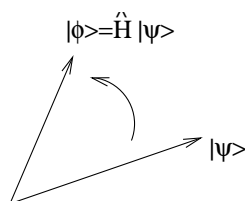


FIGURE 1.2.1 – Schéma d'un opérateur qui transforme les vecteurs.

Opérateur de position \hat{x} :

$$|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = x\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (1.2.1)$$

Opérateur d'impulsion \hat{p} :

$$|\phi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (1.2.2)$$

Opérateur Hamiltonien (ou énergie) \hat{H} :

$$|\phi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \text{ défini par } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

donc $\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (1.2.3)$

On dit que ce sont des **opérateurs différentiels** car ils sont définis à partir de l'opération de dérivation et de multiplication par la fonction x .

Exemples (*) : Supposons (sans se soucier des unités) que $\psi(x) = \exp(-x^2)$.

Si $|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$ alors $\phi(x) = x \exp(-x^2)$.

Si $|\phi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle$ alors $\phi(x) = -i\hbar 2x \exp(-x^2)$.

Si $|\phi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ et $V(x) = gx^4$, alors $\phi(x) = (gx^2 - 4\hbar^2/(2m)) x^2 \exp(-x^2)$.

1.2.2 Opérateurs linéaires

On dit que $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont des opérateurs linéaires d'après la définition suivante.

Définition 1.2.1. Un opérateur \hat{T} est un **opérateur linéaire** si

$$\begin{aligned} \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}, \\ \text{alors } \hat{T}(\lambda|\psi_1\rangle) = \lambda(\hat{T}|\psi_1\rangle) \\ \text{et } \hat{T}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{T}|\psi_1\rangle + \hat{T}|\psi_2\rangle \end{aligned}$$

Propriétés et remarques (*)

- On convient souvent de mettre un "chapeau" sur le symbole d'un opérateur. Parfois, on omettra cette convention lorsque ce sera clair.
- L'ensemble des opérateurs linéaires sur \mathcal{H} forme un espace vectoriel, noté $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. (à vérifier. On peut aussi associer le **produit scalaire de Hilbert-Schmidt** comme $\langle \hat{T}_1 | \hat{T}_2 \rangle := \text{Tr}(\hat{T}_1^+ \hat{T}_2)$ lorsqu'il est défini).
- Si \hat{T}_1, \hat{T}_2 sont deux opérateurs linéaires, alors $\hat{T}_1 \hat{T}_2$ (la composition) est aussi linéaire.
- $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont des opérateurs linéaires.
- L'opération qui transforme un vecteur en lui-même (c.a.d. opération qui ne fait rien) est une opération linéaire, appelée **l'opérateur identité** :

$$\hat{I} : |\phi\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow |\phi\rangle \in \mathcal{H}.$$

- Cette propriété de linéarité est très "contraignante" pour la transformation \hat{T} , car pour connaître son action sur n'importe quel vecteur, il suffit de connaître son action sur une base. (voir page 41).
- Remarquons que $\psi(x) = \frac{1}{1+x} \in L^2(\mathbb{R})$, car $\langle \psi | \psi \rangle < \infty$. Mais si $|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$, on a $\phi(x) = \frac{x}{1+x} \notin L^2(\mathbb{R})$ car $\langle \phi | \phi \rangle = \infty$. On dit que ϕ n'appartient pas au **domaine de définition** de l'opérateur \hat{x} . La notion de domaine de définition est essentielle pour faire la théorie mathématique correcte des opérateurs linéaires non bornés. (Voir [RS72] chapitre VIII).

1.2.3 Opérateurs adjoints et autoadjoints

Dans la suite, on utilise la notation :

$$|\hat{T}\psi\rangle = \hat{T}|\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Définition 1.2.2. Si $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est un opérateur linéaire, l'**opérateur adjoint** de \hat{T} est l'opérateur linéaire, noté \hat{T}^+ , vérifiant :

$$\langle \phi | \hat{T}^+ \psi \rangle = \langle \hat{T} \phi | \psi \rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Propriétés et remarques

- la relation ci-dessus définit bien l'opérateur adjoint et de façon unique (on ignore ici les questions de domaine, voir [RS72] page 252).
- On a

$$\left(\hat{T}^+\right)^+ = \hat{T}$$

preuve : $\langle \phi | \hat{T}^{++} \psi \rangle = \langle \hat{T}^+ \phi | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \hat{T}^+ \phi \rangle} = \overline{\langle \hat{T} \psi | \phi \rangle} = \langle \phi | \hat{T} \psi \rangle$

- On a

$$\begin{aligned} \left(\hat{T}_1 \hat{T}_2\right)^+ &= \hat{T}_2^+ \hat{T}_1^+ \\ \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_2\right)^+ &= \hat{T}_1^+ + \hat{T}_2^+ \\ \left(\hat{T}^n\right)^+ &= \left(\hat{T}^+\right)^n \quad : \text{pour } n \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

preuve : $\langle \phi | \left(\hat{T}_1 \hat{T}_2\right)^+ \psi \rangle = \langle \hat{T}_1 \hat{T}_2 \phi | \psi \rangle = \langle \hat{T}_2 \phi | \hat{T}_1^+ \psi \rangle = \langle \phi | \hat{T}_2^+ \hat{T}_1^+ \psi \rangle.$

Notation de Dirac : Pour un opérateur linéaire, on note $\langle \phi | \hat{T} | \psi \rangle$ pour signifier :

$$\langle \phi | \hat{T} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{T} \psi \rangle = \langle \hat{T}^+ \phi | \psi \rangle$$

Définition 1.2.3. L'opérateur linéaire \hat{T} est **autoadjoint** ou **hermitique** si $\hat{T} = \hat{T}^+$ c'est à dire si

$$\langle \phi | \hat{T} \psi \rangle = \langle \hat{T} \phi | \psi \rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle.$$

Proposition 1.2.4. \hat{x} , \hat{p} , \hat{H} sont des opérateurs autoadjoints.

Une conséquence de cette propriété est donné plus loin. Voir (1.3.2) page 30.

preuve (TD) : pour tout vecteur $\phi, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$,

$$\langle \phi | x^+ \psi \rangle = \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x \bar{\phi} \psi dx = \int_{\mathbb{R}} \bar{\phi} x \psi dx = \langle \phi | \hat{x} \psi \rangle$$

Idem pour $V(\hat{x})$.

Et

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{p}^+ \psi \rangle &= \langle \hat{p} \phi | \psi \rangle = \int -i\hbar \overline{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \psi dx \\ &= i\hbar \int \frac{d\bar{\phi}}{dx} \psi dx = -i\hbar \int \bar{\phi} \frac{d\psi}{dx} dx = \langle \phi | \hat{p} \psi \rangle \end{aligned}$$

où on a utilisé la formule d'intégration par partie

$$[\bar{\phi}\psi]_{-\infty}^{+\infty} = \int \frac{d\bar{\phi}}{dx} \psi dx + \int \bar{\phi} \frac{d\psi}{dx} dx$$

et le fait que $[\bar{\phi}\psi]_{-\infty}^{+\infty} = 0$. Finalement,

$$\hat{H}^+ = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right)^+ = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \hat{H}.$$

Exercice 1.2.5. On considère les opérateurs A_i ($i = 1, \dots, 6$) sont définis comme suit sur l'espace des fonctions à une variable $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} (A_1\psi)(x) &= (\psi(x))^2 & ; & & (A_4\psi)(x) &= x^2\psi(x) \\ (A_2\psi)(x) &= \frac{d\psi(x)}{dx} & ; & & (A_5\psi)(x) &= \sin(\psi(x)) \\ (A_3\psi)(x) &= \int_a^x \psi(x') dx' & ; & & (A_6\psi)(x) &= \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \end{aligned}$$

1. Lesquels sont des opérateurs linéaires ?
2. Parmi les opérateurs linéaires, lesquels sont autoadjoints ?

1.3 Évolution d'un état quantique

1.3.1 L'équation d'évolution

L'équation de Schrödinger spécifie comment l'onde quantique $\psi(x, t)$ de la particule évolue au cours du temps. En notation de Dirac, cette équation donne la loi d'évolution du vecteur $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} :

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.1)$$

c'est à dire que en notation de fonctions d'ondes d'après 1.2.3 page 26 :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad : \forall x, t$$

Remarques

- Remarquer que l'on utilise la dérivée "droite" d/dt si il y a une seule variable, ici t pour le vecteur $|\psi(t)\rangle$, et que l'on utilise la dérivée partielle $\partial/\partial t$ si il y a plusieurs variables, ici (x, t) pour la fonction $\psi(x, t)$.
- L'équation de Schrödinger donne précisément la modification instantanée de l'onde à un instant précis. Cette modification dépend de la masse de la particule et aussi des forces qu'elle subit à travers la fonction potentiel $V(x)$. Pour cette raison on dit que l'opérateur Hamiltonien \hat{H} est le **générateur de l'évolution temporelle**. L'équivalent de cette équation d'évolution en mécanique classique est l'équation de Newton, ou plus précisément les équations de Hamilton du mouvement.
- C'est **une équation linéaire**, et donc si l'on connaît l'évolution de $|\psi_1(t)\rangle$ et de $|\psi_2(t)\rangle$, alors la somme $|\phi(0)\rangle = |\psi_1(0)\rangle + |\psi_2(0)\rangle$ évolue comme la somme des évolutions : $|\phi(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + |\psi_2(t)\rangle$. C'est une propriété très forte, importante pour la suite qui s'appelle aussi **le principe de superposition**. De même le produit $|\phi_2(0)\rangle = \lambda|\psi(0)\rangle$ évolue comme $|\phi_2(t)\rangle = \lambda|\psi(t)\rangle$. Pour cela on peut dire que $\lambda|\psi(t)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$ ont le "même comportement". (En termes mathématiques, l'évolution est définie sur l'espace projectif $\mathbb{P}(\mathcal{H})$. Voir cours de Master 2 [Fau10a] à ce sujet).
- D'après l'équation de Schrödinger, **la fonction d'onde conserve sa norme au cours du temps** :

$$\|\psi\|^2(t) = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \text{const} \quad (1.3.2)$$

preuve :

$$\begin{aligned} d(\langle \psi | \psi \rangle) / dt &= \langle d\psi / dt | \psi \rangle + \langle \psi | d\psi / dt \rangle = \langle -i\hat{H}\psi / \hbar | \psi \rangle + \langle \psi | -i\hat{H}\psi / \hbar \rangle \\ &= (i/\hbar) \left(\langle \psi | \hat{H}^+ \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \right) = 0 \end{aligned}$$

car \hat{H} est autoadjoint. Cela montre l'importance du fait que $\hat{H}^+ = \hat{H}$. \square

Exercice 1. montrer de même que le produit scalaire est conservé $\langle \psi(t) | \phi(t) \rangle = cste$.

1.3.2 Exemples d'évolutions d'ondes (images et films)

Cette section se trouve sur la page Web : http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement/meca_q/animations/, où l'on peut voir des animations, en plus du texte reproduit ci-après.

1.3.2.1 Présentation générale

Hormis quelques cas particuliers, il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger. Pour des problèmes simples avec peu de degrés de liberté, il est possible de la résoudre numériquement (i.e. avec un ordinateur). Dans cette section, nous présentons des solutions obtenues en résolvant numériquement cette équation.

- pour différentes conditions initiales (des paquets d'ondes gaussiens, ou des ondes stationnaires),
- pour différentes forces externes (choix du potentiel de la forme $V(x) = 0, V(x) = x^2, V(x) = x^2 + \lambda x^4, V(x) = -x^2 + \lambda x^4$),
- et comparaison avec l'évolution d'une particule (ou nuage de particules) classique soumise aux mêmes forces, évoluant avec l'équation de Newton.
- Il y aura des commentaires sur l'étalement de la fonction d'onde due à la **dispersion**, et sur **l'effet tunnel**.
- Et des commentaires sur la nécessité de voir **la mécanique quantique dans l'espace des phases**.

Modèle étudié : La dynamique est spécifiée par son Hamiltonien (l'énergie de la particule), qui est de la forme :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

où m est la masse de la particule, et $V(x)$ est le potentiel qu'elle subit. (La force est $F(x) = -dV/dx$).

L'état quantique initial est un paquet d'onde Gaussien de largeur L . L'évolution de la particule classique est obtenue en résolvant numériquement les équations de mouvement de Newton (ou Hamilton). L'évolution de la fonction d'onde quantique est obtenue en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger. Dans la suite les paramètres suivants sont choisis :

$$\begin{aligned} m = 1 & & : & \text{masse} \\ \hbar = 1 & & : & \text{constante de Planck} \\ \sigma = 1 & : & & \text{Largeur du paquet d'onde Gaussien} \end{aligned}$$

1.3.2.2 Définition de la représentation de Husimi dans l'espace de phase

Nous utilisons une représentation d'un état quantique dans l'espace de phase : **la représentation de Husimi**. Cette représentation sera étudiée page 141. Pour le moment nous donnons sa définition qui est intuitive et naturelle :

C'est la fonction :

$$Hus_{\psi}(x, p) = |\langle x, p | \psi \rangle|^2$$

qui est obtenue en faisant le produit scalaire entre l'état $|\psi\rangle$ et un paquet d'onde Gaussien $|x, p\rangle$, et faisant varier (x, p) . Le paquet d'onde $|x, p\rangle$ est relativement "localisé" en position et en impulsion et donc, intuitivement, ce produit scalaire sonde la présence de l'état quantique à la position (x, p) de l'espace de phase. Autrement dit, si la fonction $Hus_{\psi}(x, p)$ est importante au point (x, p) , c'est que le produit scalaire $\langle x, p | \psi \rangle$ est important et donc que l'état quantique $|\psi\rangle$ est "fortement" composé du paquet d'onde $|x, p\rangle$.

1.3.2.3 L'oscillateur harmonique

Potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2$$

L'état classique initial est choisi en $x_0 = 8$, $p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration $\mathbf{x}(t)$ Voir figure (1.3.1).

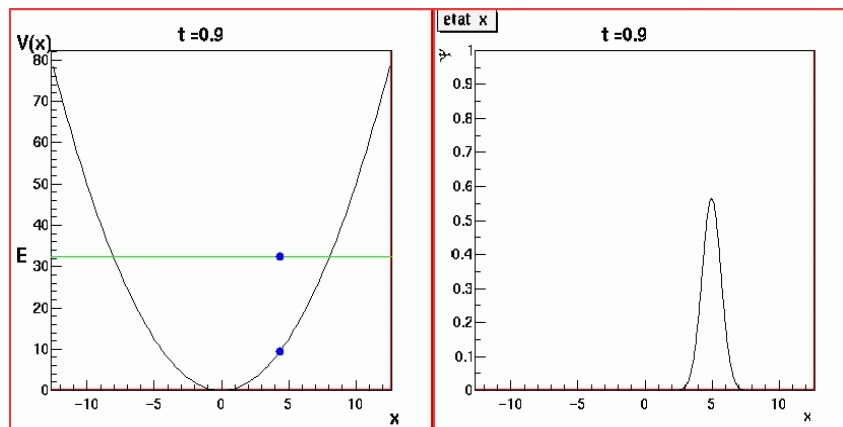


FIGURE 1.3.1 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle $V(x)$.
- Sur la figure de droite, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x, t)|^2$, qui s'interprète comme la densité de probabilité de présence de la particule.

Observations

1. Il y a une correspondance parfaite entre la position de la particule classique et celle du paquet d'onde quantique à tout instant.
2. Le paquet d'onde garde sa forme Gaussienne concentrée au cours du temps. Il n'y a pas de dispersion.

Dynamique classique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.2).

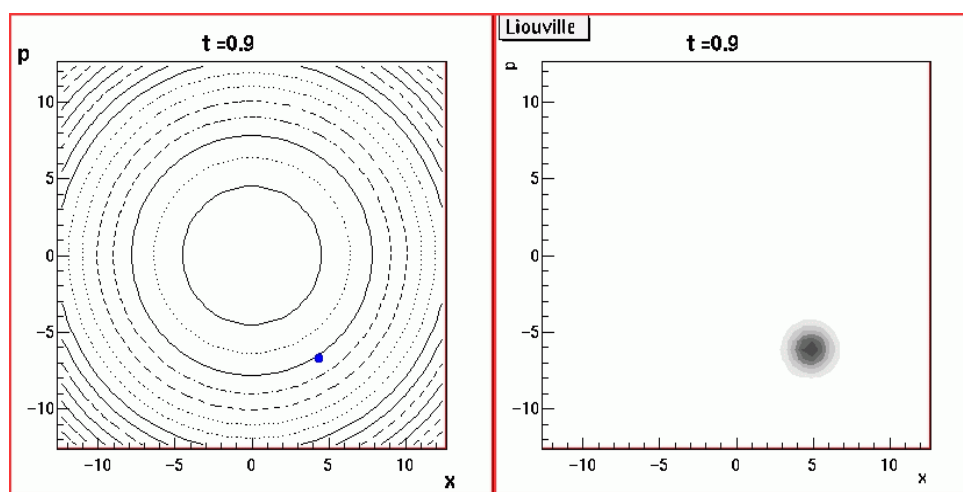


FIGURE 1.3.2 –

Commentaires

- La figure de gauche montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x, p) .
- La deuxième image montre l'évolution classique (de Liouville), non plus d'un point, mais d'une distribution $f(x, p, t)$ sur l'espace de phase, qui est choisi comme étant une fonction Gaussienne à $t = 0$. Le niveau de gris est relié à l'intensité de la fonction $f(x, p)$. Cette distribution est répartie sur plusieurs trajectoires.

Observations

1. La période de chaque trajectoire est $T = 2\pi = 6.28$.
2. La distribution de Liouville reste Gaussienne au cours du temps, car les trajectoires ont toutes la même période $T = 2\pi$. Cela explique pourquoi il n'y a pas de dispersion avec l'Oscillateur Harmonique.

Dynamique quantique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.3).

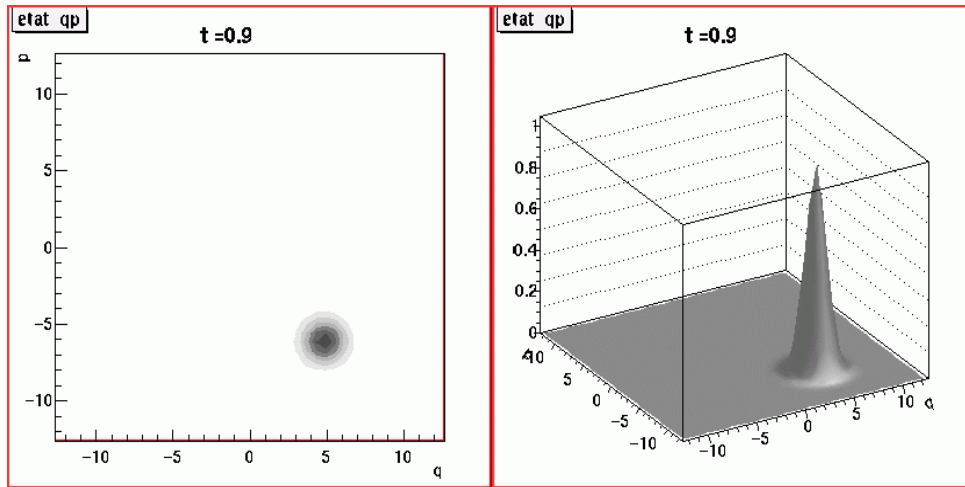


FIGURE 1.3.3 –

Commentaires Il s'agit de la représentation de Husimi de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$. La deuxième image montre cette distribution $Hus_{\psi(t)}(x, p, t)$ en trois dimensions ; la première image montre cette même distribution en niveaux de gris.

Observations Il est remarquable d'observer que à chaque instant la distribution quantique $Hus_{\psi(t)}(x, p, t)$ coïncide avec l'évolution classique de Liouville de la même distribution initiale. Cela est propre à l'oscillateur Harmonique, et est encore relié au fait qu'il n'y a pas de dispersion.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulières, appelée ondes stationnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 33, d'énergie $E = 32,5$. Voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.4.

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E .
2. Dans l'espace de phase, l'onde stationnaire est concentrée sur la trajectoire classique d'énergie E . C'est clairement une distribution invariante lors de l'évolution.
3. A x donné, les oscillations de la fonction d'onde $|\psi(x)|^2$ se comprennent à partir de la distribution dans l'espace de phase, comme résultant d'une interférence (superposition) entre la partie d'impulsion positive $p > 0$ de la forme $\exp(ipx)$, et la partie $p < 0$ de la forme $\exp(-ipx)$, donnant au total des oscillations de la forme $\cos(px)$.

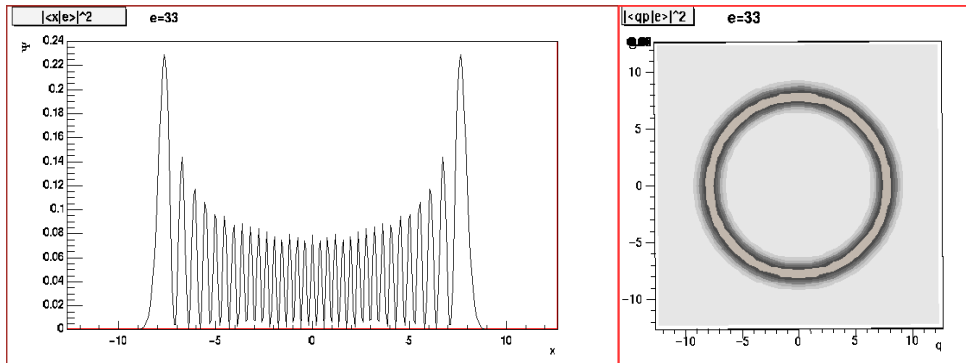


FIGURE 1.3.4 –

1.3.2.4 L'oscillateur Anharmonique

Potentiel :

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0.02x^4$$

L'état classique initial est en $x_0 = 6, p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration $x(t)$ Voir figure (1.3.5).

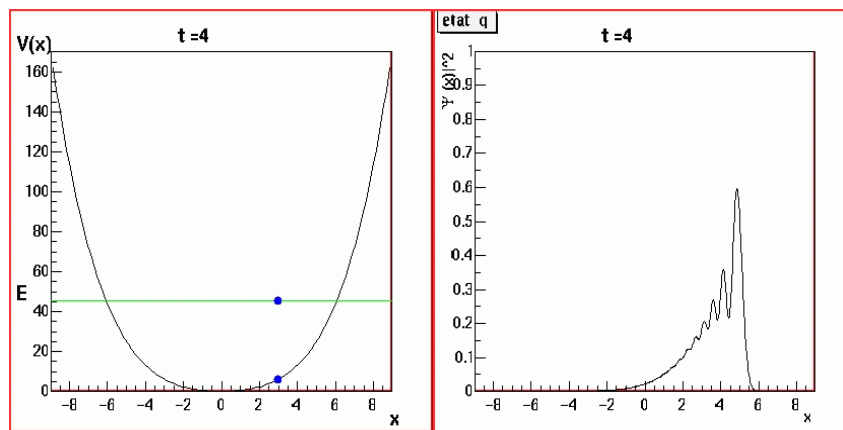


FIGURE 1.3.5 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle $V(x)$.
- Sur la figure de droite, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x,t)|^2$, qui s'interprète comme la densité de probabilité de présence de la particule.

Observations

1. Pour les temps courts, $t < 6$, le paquet d'onde reste concentré, et sa position correspond bien à la position de la particule classique. Cependant, il y a des phénomènes d'interférences lorsque le paquet d'onde rebondit sur les bords du potentiel (oscillations de petites longueurs d'onde).
2. Pour les temps plus longs ($t > 6$), le paquet d'onde se disperse, et s'étale sur toute la largeur permise classiquement.

Dynamique classique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.6).

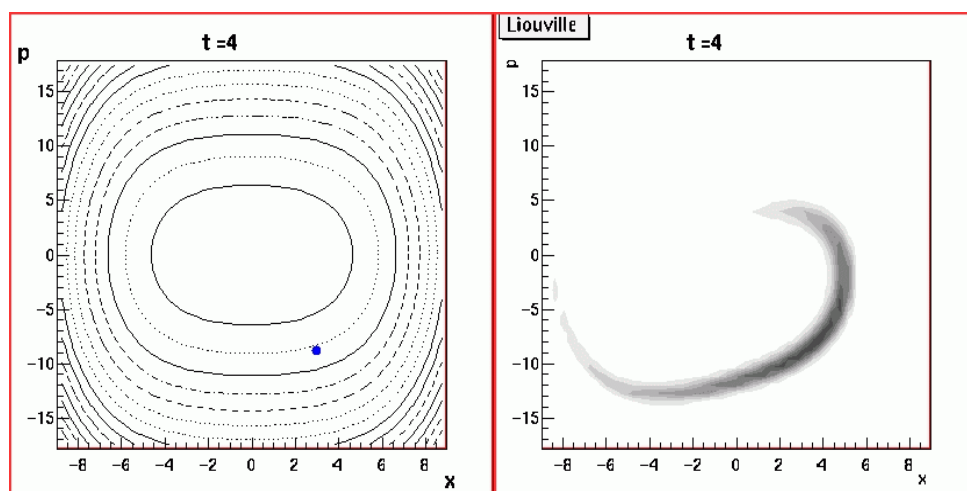


FIGURE 1.3.6 –

Commentaires

- La figure de gauche montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x, p) .
- La deuxième image montre l'évolution classique (de Liouville), non plus d'un point, mais d'une distribution $f(x, p, t)$ sur l'espace de phase, qui est choisi comme étant une fonction Gaussienne à $t=0$. Le niveau de gris est relié à l'intensité de la fonction $f(x, p)$. Cette distribution est répartie sur plusieurs trajectoires.

Observations

1. Contrairement au cas de l'oscillateur harmonique, ici les trajectoires d'énergie différentes ont des périodes différentes. La période diminue avec l'énergie.
2. Cela explique le comportement de la distribution de Liouville dans l'espace de phase : la partie extérieure de la distribution qui a une énergie plus élevée, tourne plus vite que la partie intérieure, et il résulte que la distribution s'étale, et s'enroule. On dit qu'il y a de la dispersion classique.

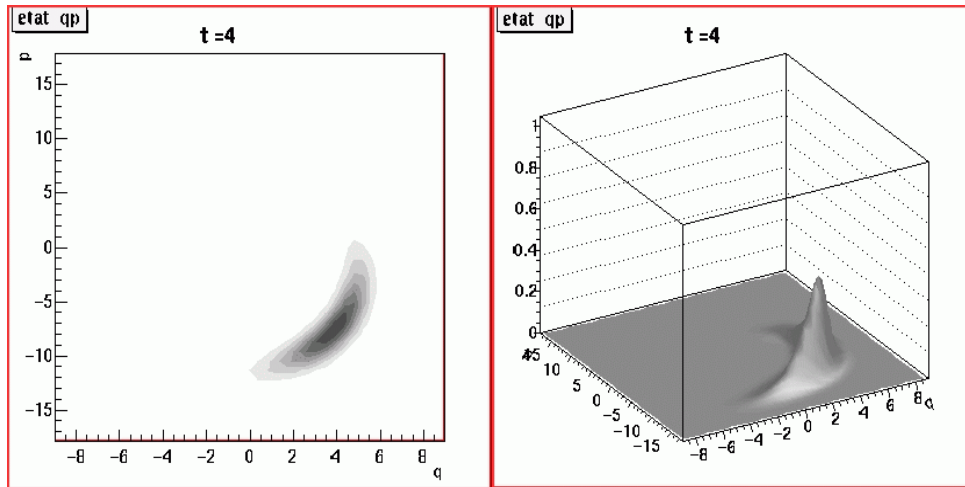


FIGURE 1.3.7 –

Dynamique quantique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.7).

Commentaires Il s'agit de la représentation de Husimi (voir définition ci-dessus) de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de phase. La deuxième image montre cette distribution $Hus(x, p, t)$ en trois dimensions ; la première image montre cette même distribution en niveaux de gris.

Observations

1. Pour les temps courts, $t < 6$, la distribution reste localisée.
2. Pour les temps intermédiaires, $6 < t < 18$, la distribution s'étale peu à peu, et s'enroule jusqu'à atteindre une circonférence. Ensuite la partie rapide (la tête) rejoint la queue et interfèrent.
3. Pour les temps longs, $t > 20$, la distribution est répartie sur toute la trajectoire, et parfois des petits paquets apparaissent, à cause de phénomènes d'interférences.
4. Il est intéressant de comparer l'évolution de la distribution de Husimi avec celle de Liouville. Les deux évolutions sont similaires jusqu'à ce que les phénomènes d'interférences quantiques apparaissent pour $t > 20$.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulières, appelée ondes stationnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 31, d'énergie E : Et voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.8.

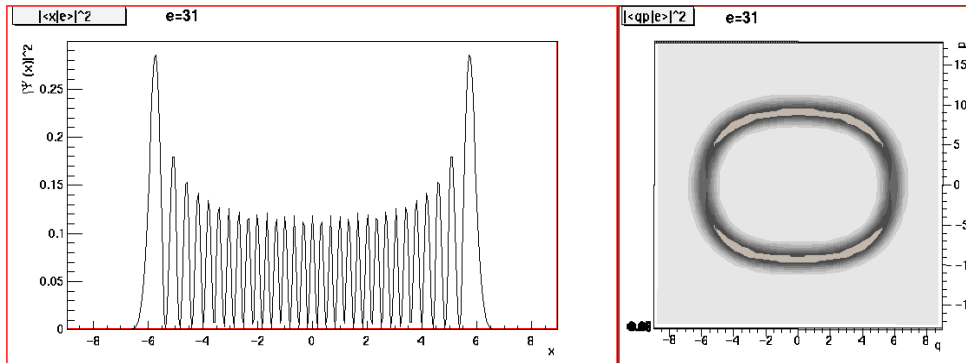


FIGURE 1.3.8 –

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E .
2. Dans l'espace de phase, l'onde stationnaire est concentrée sur la trajectoire classique d'énergie E . C'est clairement une distribution invariante lors de l'évolution.
3. Sur les oscillations de $|\psi(x)|^2$, même remarque que ci-dessus. Voir 1.3.2.3.

1.3.2.5 Le double puits de potentiel

Potentiel :

$$V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + 0.005x^4$$

L'état classique initial est en $x_0 = 3$, $p_0 = 0$.

Dynamique dans l'espace de configuration $x(t)$ Voir figure (1.3.9).

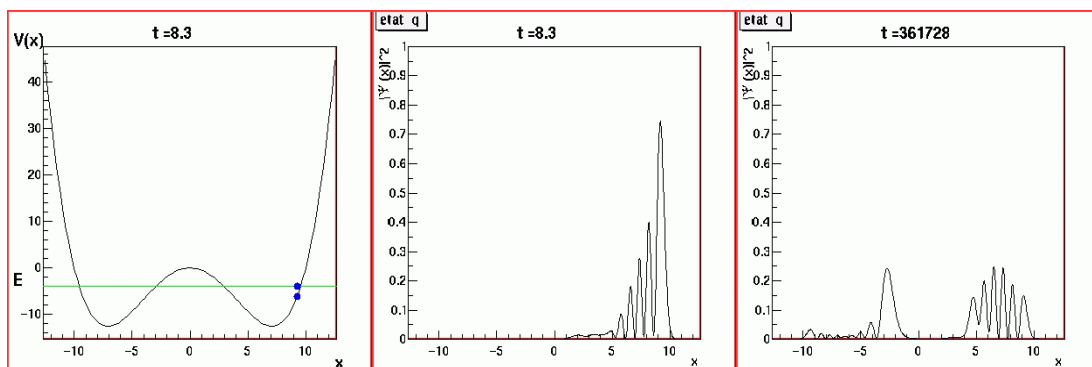


FIGURE 1.3.9 –

Commentaires

- Le point bleu de la figure de gauche montre la position $x(t)$ de la particule classique. On a représenté la valeur E de l'énergie totale et la fonction énergie potentielle $V(x)$.
- Sur les deux autres figures, on a représenté le module carré de la fonction d'onde quantique : $|\psi(x,t)|^2$, qui s'interprète comme la probabilité de présence de la particule. La deuxième figure montre une évolution régulière en temps, $t = 0$ à 10. La troisième figure montre une évolution en temps, $t = 0$ à 10^7 sur une échelle logarithmique.

Observations

1. Pour les temps courts, le paquet d'onde évolue dans le puits de droite, comme dans le modèle de l'oscillateur anharmonique.
2. Pour les temps plus longs ($t > 500$), le paquet apparaît dans le puits de gauche. Ce puits de gauche serait permis classiquement, mais la barrière de potentiel empêche la particule classique d'y aller. Pour des temps très longs ($t > 10^6$), l'onde quantique est répartie équitablement dans les deux puits, et fluctue. Ce passage dans le puits de gauche interdit classiquement, s'appelle l'effet tunnel.

Dynamique classique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.10).

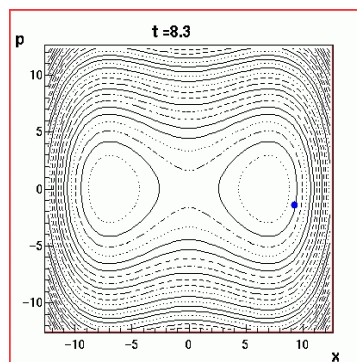


FIGURE 1.3.10 –

Commentaires Cette figure montre les trajectoires classiques dans l'espace de phase (x,p) .

Dynamique quantique dans l'espace de phase $x(t)$, $p(t)$ Voir figure (1.3.11).

Commentaires

- Il s'agit de la représentation de Husimi de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$. L'intensité de cette distribution $Hus(x,p,t)$ est représentée en niveaux de gris. La première figure

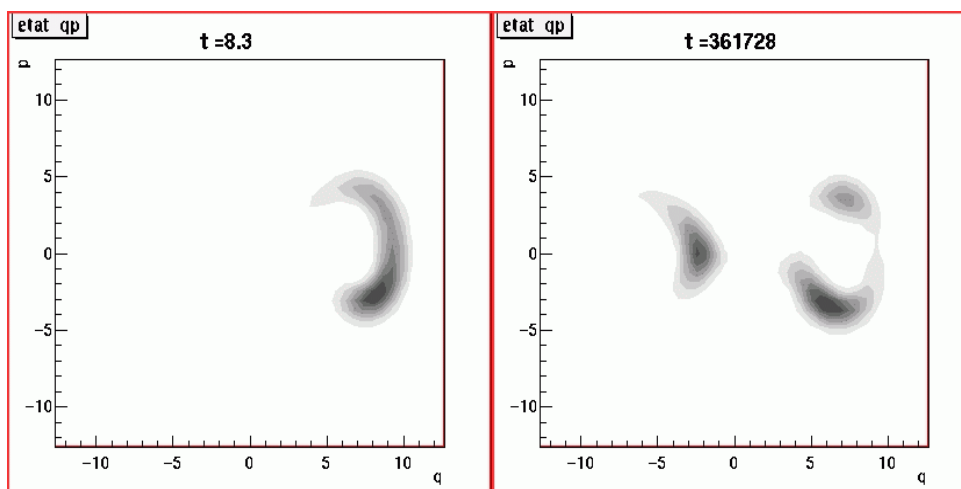


FIGURE 1.3.11 –

montre une évolution régulière en temps, $t=0$ à 10. La deuxième figure montre une évolution en temps, $t=0$ à 10^7 sur une échelle logarithmique.

Observations Mêmes observations de l'effet tunnel que ci-dessus.

Etat stationnaire Les états quantiques ci-dessus ne sont pas stationnaires, car leur forme évolue au cours du temps. Pour une forme du potentiel donnée, il y a des fonctions d'ondes quantique particulières, appelée ondes stationnaires, dont la forme reste invariante. Chaque onde stationnaire a une énergie précise.

Voici ici l'onde stationnaire numéro 7, d'énergie E : Et voici le même état quantique, en représentation de Husimi dans l'espace de phase :

Voir figure 1.3.12.

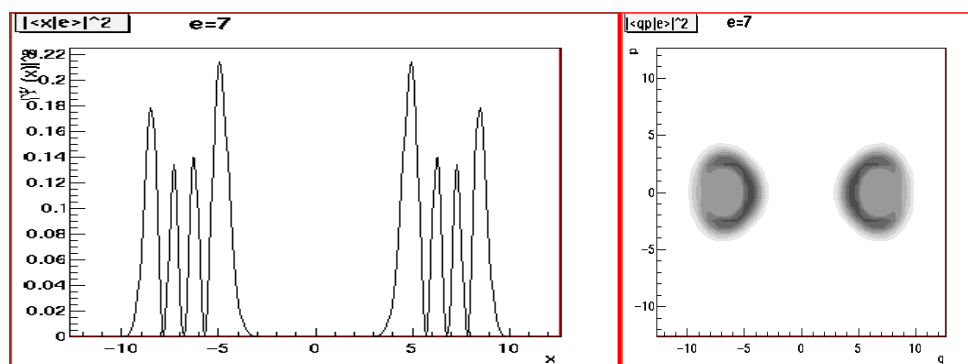


FIGURE 1.3.12 –

Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie E , dans les deux puits.
2. La barrière de potentiel n'est pas un obstacle. Cela correspond à l'effet tunnel ci-dessus.
3. La forme de l'onde stationnaire est symétrique, et possède donc la même symétrie que le potentiel $V(x)$.

1.4 Bases, et changement de bases

Pour continuer cet exposé de la mécanique quantique, il nous faut maintenant développer quelques aspects mathématiques reliés à cet espace \mathcal{H} des fonctions d'ondes.

1.4.1 Base orthonormée

Définition 1.4.1. Une suite de vecteurs $|V_i\rangle \in \mathcal{H}$, $i = 1, 2, \dots$ forme une **base orthonormée** (b.o.n.) de l'espace \mathcal{H} , si

$$\langle V_i | V_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (\delta_{i,j} = 1 \text{ si } i = j, \quad \delta_{i,j} = 0 \text{ sinon})$$

et si tout $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ se décompose sous la forme :

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1,2,\dots} \phi_i |V_i\rangle, \quad (1.4.1)$$

$$\text{avec } \phi_i \in \mathbb{C} : \text{composantes} \quad (1.4.2)$$

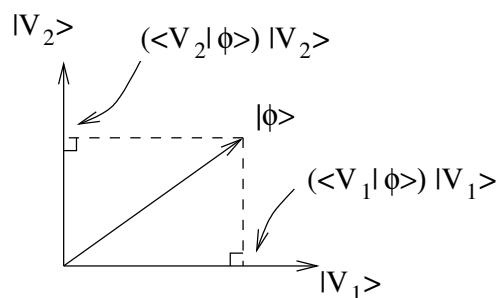
Si la suite de vecteurs $|V_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, \infty$ est infinie, on dit que l'espace \mathcal{H} est de **dimension infinie**. Sinon, si $i = 1, 2, \dots, N$, on dit que \mathcal{H} est de **dimension finie** N .

Remarques et propriétés :

- On verra ci-dessous que l'espace des fonctions d'ondes $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ est de dimension infinie. Dans le chapitre suivant, on étudiera l'espace de Hilbert du spin 1/2 qui est de dimension finie $N = 2$.
- Les composantes $\phi_i \in \mathbb{C}$ du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $|V_i\rangle$ sont obtenues par le produit scalaire :

$$\phi_i = \langle V_i | \phi \rangle \quad (1.4.3)$$

en effet : $\langle V_i | \phi \rangle = \sum_j \phi_j \langle V_i | V_j \rangle = \sum_j \phi_j \delta_{i,j} = \phi_i$. Voir figure 1.4.1.

FIGURE 1.4.1 – Schéma de la décomposition du vecteur $|\psi\rangle$ dans la base $|V_1\rangle, |V_2\rangle$.

- On a alors

$$\langle \phi | \phi \rangle = \sum_i |\phi_i|^2$$

et donc forcément $\phi_i \rightarrow 0$, pour $i \rightarrow \infty$.

preuve : On a $\langle \phi | \phi \rangle = (\sum_i \bar{\phi}_i \langle V_i |) (\sum_j \phi_j |V_j\rangle) = \sum_{i,j} \bar{\phi}_i \phi_j \langle V_i | V_j \rangle = \sum_i \bar{\phi}_i \phi_i$.

- (*) Par rapport à la base $|V_i\rangle$ choisie, on représente le vecteur $|\phi\rangle$ par le tableau de composantes complexes, ou **vecteur colonne** :

$$|\phi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

mais attention, si on choisit une autre base, le même vecteur aura d'autres composantes, et sera représenté par un autre tableau.

- (*) Pour des calculs avec un ordinateur, on représente le vecteur $|\phi\rangle$ par un tableau (vecteur colonne), que l'on tronque en ne gardant qu'un nombre fini N (mais très grand) de composantes. La propriété $\phi_i \rightarrow 0$, pour $i \rightarrow \infty$ mentionnée plus haut garanti que la précision peut être suffisante si N est assez grand.
- (*) Il y a un théorème sur l'existence de b.o.n. dans un espace de Hilbert, voir [RS72] page 44.

1.4.1.1 Exemple d'une particule sur un cercle

Pour décrire une particule confinée sur un cercle S^1 (par exemple un électron dans un petit fil conducteur circulaire, appelé **fil quantique**), l'espace de Hilbert est l'espace des fonctions de carré sommable périodiques :

$$\mathcal{H} = L^2(S^1)$$

Si le fil est de circonférence L , et si x est la position le long du fil, c'est l'espace des fonctions vérifiant :

$$\phi(x + L) = \phi(x)$$

Propriété Les fonctions

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right), \quad k \in \mathbb{Z} \quad (1.4.4)$$

forment une b.o.n. de l'espace $\mathcal{H} = L^2(S^1)$.

preuve (TD) : on vérifie d'abord l'orthonormalité : $\langle V_k | V_l \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \exp(i(l-k)\frac{2\pi x}{L}) dx$. Si $k \neq l$, $\langle V_k | V_l \rangle = \frac{1}{i(l-k)2\pi} [\exp(i(l-k)\frac{2\pi x}{L})]_0^L = 0$. Si $k = l$, $\langle V_k | V_l \rangle = 1$. Ensuite le **théorème des séries de Fourier**, dit que toute fonction périodique $\phi(x)$ de carré sommable, peut se décomposer sous la forme :

$$\phi(x) = \sum \frac{\phi_i}{\sqrt{L}} \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right).$$

Pour cette raison, on dit aussi que $|V_k\rangle$ est la **base de Fourier** de $\mathcal{H} = L^2(S^1)$. \square

Exercice 2. Donner une autre b.o.n. possible pour $\mathcal{H} = L^2(S^1)$?

1.4.2 Relation de fermeture

D'après eq.(1.4.1) et eq.(1.4.3) ci-dessus, on a :

$$|\phi\rangle = \sum_i (\langle V_i | \phi \rangle) |V_i\rangle$$

que l'on écrit de la façon suivante (en écrivant le nombre complexe $\langle V_i | \phi \rangle$ à droite du vecteur $|V_i\rangle$) :

$$|\phi\rangle = \sum_i |V_i\rangle \langle V_i | \phi \rangle = \left(\sum_i |V_i\rangle \langle V_i| \right) |\phi\rangle$$

ainsi la somme

$$\sum_i |V_i\rangle \langle V_i| = \hat{I} \quad (1.4.5)$$

laisse le vecteur $|\phi\rangle$ inchangé, et peut donc être considérée comme l'opérateur identité. Cette expression donnant l'opérateur identité à partir des vecteurs d'une base o.n. s'appelle la **relation de fermeture** ; elle est extrêmement pratique.

Remarques (*)

La notation $Id = \sum_i |V_i\rangle\langle V_i|$ peut se comprendre de façon précise avec la notion de vecteur dual $\langle V_i|$. En effet un terme de la somme $\hat{P}_i = |V_i\rangle\langle V_i|$ correspond à un opérateur qui transforme le vecteur $|\phi\rangle$ en $\hat{P}_i|\phi\rangle = |V_i\rangle\langle V_i|\phi\rangle = (\langle V_i|\phi\rangle)|V_i\rangle$ c'est à dire en sa projection orthogonale sur le vecteur de base $|V_i\rangle$, voir figure 1.4.1. On la relation

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i$$

qui traduit en général que \hat{P}_i est un **projecteur**, et

$$\hat{P}_i^+ = \hat{P}_i$$

précisant que c'est un **projecteur orthogonal**. L'opérateur identité est alors $\hat{I} = \sum_i \hat{P}_i$.

1.4.3 Expression d'un opérateur dans une base

Plus généralement, pour un opérateur \hat{O} , on lui associe ses **éléments de matrice** dans une base o.n. ($|V_i\rangle$) :

$$O_{i,j} = \langle V_i|\hat{O}|V_j\rangle$$

Les coefficients $O_{i,j}$, $i, j = 1, 2, \dots$ forment une matrice de taille infinie.

Si $|\phi\rangle = \hat{O}|\psi\rangle$, alors les composantes ϕ_i de $|\phi\rangle$ s'obtiennent à partir des composantes ψ_j de $|\psi\rangle$ par la multiplication du vecteur par la matrice

$$\phi_i = \sum_j O_{i,j}\psi_j$$

En effet, à l'aide de la relation de fermeture, on a :

$$\langle V_i|\phi\rangle = \langle V_i|\hat{O}Id|\psi\rangle = \langle V_i|\hat{O}\sum_j |V_j\rangle\langle V_j|\psi\rangle = \sum_j \langle V_i|\hat{O}|V_j\rangle\langle V_j|\psi\rangle$$

Ainsi, étant donné une base o.n., il y a une correspondance parfaite entre les vecteurs, et les tableaux colonne d'une part, et les opérateurs et les matrices d'autre part.

Proposition 1.4.2. *Par rapport à la base o.n. $|V_i\rangle_i$, tout opérateur \hat{O} peut s'écrire :*

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{i,j}|V_i\rangle\langle V_j|$$

avec $O_{i,j} = \langle V_i|\hat{O}|V_j\rangle$.

Démonstration. On écrit $\hat{O} = \hat{I}\hat{O}\hat{I}$, on utilise la relation de fermeture (1.4.5) et on développe. □

1.4.4 Changement de base (*)

Si $|V_i\rangle, i = 1, 2 \dots$ et $|W_i\rangle, i = 1, 2 \dots$ sont deux bases o.n. différentes du même espace \mathcal{H} , et si $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ est un vecteur, ses composantes $\phi_i = \langle V_i | \phi \rangle$ (respect. $\tilde{\phi}_i = \langle W_i | \phi \rangle$) dans chacune des bases sont reliées par :

$$\phi_i = \langle V_i | Id | \phi \rangle = \sum_j \langle V_i | W_j \rangle \langle W_j | \phi \rangle = \sum_j \langle V_i | W_j \rangle \tilde{\phi}_j$$

On a utilisé pour cela la relation de fermeture, et $Q_{i,j} = \langle V_i | W_j \rangle$ s'interprète comme les éléments de matrice de la "matrice de changement de base", qui est une matrice unitaire.

- Exercice 3.*
1. montrer que la matrice dans une b.o.n. de l'opérateur adjoint \hat{O}^+ est la transposé-conjuguée de la matrice de l'opérateur \hat{O} . (On note $O^+ = \overline{O}^t$)
 2. Montrer que la matrice dans une b.o.n. d'un opérateur unitaire est une matrice unitaire.
 3. Montrer inversement qu'un opérateur unitaire \hat{Q} correspond à un changement de base o.n., par $|W_i\rangle = \hat{Q}|V_i\rangle, \quad i = 1, 2 \dots$

1.5 Spectre d'opérateurs

1.5.1 Définition et propriétés générales

Dans cette section nous continuons de développer des aspects mathématiques liés aux opérateurs linéaires, qui seront indispensables pour la suite.

Définition 1.5.1. pour un opérateur linéaire \hat{T} donné, on dit que la fonction $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ est un **vecteur propre** de l'opérateur \hat{T} , et que $\lambda \in \mathbb{C}$ est sa **valeur propre** associée, si :

$$\hat{T}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$$

L'ensemble des vecteurs propres et valeurs propres de \hat{T} forment le **spectre** de l'opérateur \hat{T} .

Exercice Trouver le spectre (valeur propres et vecteurs propres) des matrices $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. Dessiner les axes propres dans le plan \mathbb{R}^2 , et interpréter la particularité des solutions obtenues (angles entre les axes propres, et produit des valeurs propres). Aide : utiliser le résultat en annexe sur le spectre d'une matrice 2×2 .

Proposition 1.5.2. :

1. Si \hat{T} est un opérateur autoadjoint, (i.e. $\hat{T}^+ = \hat{T}$), alors la valeur propre λ est réelle. ($\lambda \in \mathbb{R}$).
2. Si \hat{T} est un opérateur autoadjoint et si $\hat{T}|\phi_1\rangle = \lambda_1|\phi_1\rangle$, et $\hat{T}|\phi_2\rangle = \lambda_2|\phi_2\rangle$, avec $\lambda_1 \neq \lambda_2$, alors

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0 \quad (1.5.1)$$

c.a.d. que : les vecteurs propres de deux valeurs propres différentes sont orthogonaux.

Démonstration. 1) On écrit

$$\begin{aligned} \bar{\lambda} \langle \phi | \phi \rangle &= \langle \lambda \phi | \phi \rangle = \langle \hat{T} \phi | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{T}^+ \phi \rangle = \langle \phi | \hat{T} \phi \rangle = \lambda \langle \phi | \phi \rangle \end{aligned}$$

donc $\lambda = \bar{\lambda}$.

2) On a

$$\langle \phi_2 | \hat{T} \phi_1 \rangle = \lambda_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = \lambda_2 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle$$

donc $(\lambda_1 - \lambda_2) \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$ avec $(\lambda_1 - \lambda_2) \neq 0$, donc $\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$. □

Remarques

- si $|\phi\rangle$ est un vecteur propre de \hat{T} de valeur propre λ alors $|\phi'\rangle = \mu|\phi\rangle$, (avec $\mu \in \mathbb{C}$ quelconque) est aussi vecteur propre avec la même valeur propre (car $\hat{T}|\phi'\rangle = \hat{T}(\mu|\phi\rangle) = \mu\hat{T}|\phi\rangle = \mu\lambda|\phi\rangle = \lambda|\phi'\rangle$).

En particulier on peut toujours choisir un vecteur propre $|\phi'\rangle$ normalisé (c.a.d. de norme un : $\langle \phi' | \phi' \rangle = 1$). Il suffit de prendre :

$$|\phi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \phi | \phi \rangle}} |\phi\rangle$$

C'est le procédé de **normalisation** d'un vecteur.

- Un opérateur peut avoir beaucoup de vecteurs propres et valeurs propres différentes ; mais ce ne sont que des vecteurs très particuliers, car la somme de deux vecteurs propres n'est pas un vecteur propre : $\hat{T}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = \lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle$, sauf si $\lambda_1 = \lambda_2$.
- Il apparaîtra parfois (et souvent pour des raisons de symétrie), que plusieurs vecteurs propres $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ aient la même valeur propre λ :

$$\hat{T}\phi_i = \lambda\phi_i, \quad i = 1 \dots N$$

Notons $\mathcal{H}_\lambda = \mathbf{Vect}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)$ l'espace vectoriel engendré par ces vecteurs, cad contenant toutes les combinaisons linéaires, et $\dim \mathcal{H}_\lambda = N$. Si $\psi \in \mathcal{H}_\lambda$, cad si $|\psi\rangle = \psi_1|\phi_1\rangle + \dots + \psi_N|\phi_N\rangle$ avec $\psi_i \in \mathbb{C}$, alors $\hat{T}|\psi\rangle = \sum_i \psi_i \hat{T}|\phi_i\rangle = \sum_i \psi_i \lambda |\phi_i\rangle = \lambda |\psi\rangle$ donc ψ est aussi vecteur propre. Autrement dit tous les vecteurs de \mathcal{H}_λ sont vecteurs propres de même valeur propre λ . On dit que \mathcal{H}_λ est l'**espace propre** associé à la valeur propre λ . On dit que $N = \dim \mathcal{H}_\lambda$ est la **multiplicité** ou la **dégénérescence** de la valeur propre λ . Si $N = 1$, on dit que λ est une **valeur propre simple**. Dans le cas des opérateurs autoadjoints ou unitaire, l'opérateur

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda := \sum_{i=1}^N \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} \quad (1.5.2)$$

est une expression utile du projecteur orthogonal sur l'espace propre \mathcal{H}_λ . (en effet, il vérifie⁶ $\hat{\mathcal{P}}_\lambda^2 = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$, $\hat{\mathcal{P}}_\lambda^+ = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$ et $\psi \in \mathcal{H}_\lambda \Leftrightarrow \hat{\mathcal{P}}_\lambda \psi = \psi$). Si les vecteurs propres sont normalisés, $\|\phi_{i,\lambda}\| = \langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle = 1$, l'expression se simplifie :

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda := \sum_{i=1}^N |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|$$

La relation de fermeture sur \mathcal{H} s'écrit⁷

$$\hat{I} = \sum_\lambda \hat{\mathcal{P}}_\lambda = \sum_\lambda \left(\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}| \right)$$

et si l'on suppose de plus que les vecteurs propres de l'opérateur \hat{T} forment une base de l'espace de Hilbert alors

$$\hat{T} = \sum_\lambda \lambda \hat{\mathcal{P}}_\lambda = \sum_\lambda \lambda \left(\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}| \right)$$

- Si on note $(\lambda_i)_i$, $i = 1, 2, \dots$ la suite des valeurs propres, avec la possibilité de dégénérescences (cad $\lambda_i = \lambda_j$) alors l'écriture ci-dessus devient simplement :

$$\hat{T} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (1.5.3)$$

6.

Démonstration. On a $\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle = \delta_{i,j} \langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle$ donc d'après (1.5.2)

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda^2 = \sum_{i,j} \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} \frac{\langle\phi_{j,\lambda}|}{\langle\phi_{j,\lambda}|\phi_{j,\lambda}\rangle} = \sum_{i=1}^N \frac{|\phi_{i,\lambda}\rangle\langle\phi_{i,\lambda}|}{\langle\phi_{i,\lambda}|\phi_{i,\lambda}\rangle} = \hat{\mathcal{P}}_\lambda$$

□

7. Pour des opérateurs non autoadjoints et plus précisément non normaux, des relations analogues existent en dimension finie, mais il peut y avoir de grosses difficultés en dimension infinie.

et on a la relation de fermeture

$$\hat{I} = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \tag{1.5.4}$$

Dans la base des vecteurs propres $|\phi_i\rangle$, l'opérateur \hat{T} est représenté par une matrice qui est diagonale (avec $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sur la diagonale). En effet $T_{i,j} = \langle\phi_i|\hat{T}\phi_j\rangle = \lambda_j\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \lambda_j\delta_{i,j}$.

Le spectre d'un opérateur autoadjoint n'est pas toujours constitué de valeurs propres discrètes. Il peut y avoir du spectre continu comme le montre l'exemple suivant des opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$. Dans tous les cas, on peut cependant considérer que les vecteurs propres forment une "base" et écrire des relations de fermeture comme (1.5.3) et (1.5.4).

1.5.2 Spectre de l'opérateur \hat{x} , "base de position"

Une fonction propre de l'opérateur de position \hat{x} serait une fonction *de norme finie et non nulle* $\phi(x)$ telle que $\hat{x}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$. Cela donne $x\phi(x) = \lambda\phi(x), \forall x$, soit $(x - \lambda)\phi(x) = 0, \forall x$ donc $\phi(x) = 0$ si $x \neq \lambda$. La fonction recherchée $\phi(x)$ est donc nulle partout sauf peut être au point $x = \lambda$. Sa norme est donc nulle.

Conclusion : l'opérateur \hat{x} n'admet pas de vecteur propre dans l'espace \mathcal{H} (ni de valeurs propres).

Cependant on peut quand même résoudre partiellement ce problème, par un processus de limite de la façon suivante :

Pour une valeur de $x \in \mathbb{R}$ donnée, et $\varepsilon \in \mathbb{R}$ donné petit, considérons la fonction notée $|x_\varepsilon\rangle$ (ou $x_\varepsilon(x')$) définie par $x_\varepsilon(x') = 1/\varepsilon$ si $x' \in [x, x + \varepsilon]$, et $x_\varepsilon(x') = 0$ sinon. Voir figure (1.5.1).

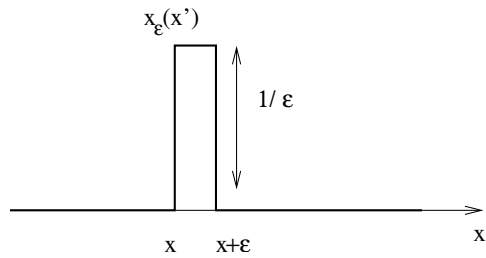


FIGURE 1.5.1 – Fonction $x_\varepsilon(x')$ aussi notée $|x_\varepsilon\rangle$, convergeant vers la distribution de Dirac $|x_\varepsilon\rangle \rightarrow |x\rangle$ pour $\varepsilon \rightarrow 0$.

On a alors

$$\langle x_\varepsilon|\phi\rangle = \int x_\varepsilon(x')\phi(x') dx' = \int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon}\phi(x')dx' \rightarrow \phi(x) \int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon}dx' = \phi(x), \quad \text{pour } \varepsilon \rightarrow 0 \tag{1.5.5}$$

Comme la limite $\langle x_\varepsilon | \phi \rangle \rightarrow \phi(x)$ pour $\varepsilon \rightarrow 0$, existe pour toute fonction continue $\phi \in C(\mathbb{R})$, on déduit que $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle x_\varepsilon |$ est un vecteur dual bien défini noté :

$$\langle x | = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle x_\varepsilon |$$

et on a donc la relation importante (qui définit $\langle x |$) :

$$\boxed{\langle x | \phi \rangle = \phi(x), \quad \forall \phi} \quad (1.5.6)$$

Et par définition de l'opérateur \hat{x} , voir eq.(1.2.1), on a : $(\hat{x}\phi)(x) = x\phi(x)$ que l'on peut écrire :

$$\boxed{\langle x | \hat{x} | \phi \rangle = x \langle x | \phi \rangle}$$

(valable pour tout $|\phi \rangle$), donc :

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{x} &= x \langle x | \\ \hat{x} | x \rangle &= x | x \rangle \end{aligned}$$

La dernière équation montre ce que l'on recherchait :

$|x \rangle$ est vecteur propre de l'opérateur \hat{x} avec la valeur propre x .

En conclusion, le spectre de l'opérateur \hat{x} est constitué par les valeurs propres $x \in \mathbb{R}$, et les états $|x \rangle$ associés. On dit que \hat{x} a un **spectre continu**. (car toutes les valeurs de x sont permises, formant un ensemble continu). Il n'y a pas de contradiction avec la remarque faite plus haut, car $|x \rangle \notin \mathcal{H}$ (En effet $\| |x_\varepsilon \rangle \| = \int_x^{x+\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon^2} dx' = \frac{1}{\varepsilon} \rightarrow \infty$ pour $\varepsilon \rightarrow 0$).

Remarques

- Du point de vue physique, si une particule est dans l'état $|x \rangle$, cela signifie que l'onde de la particule est "très localisée" au point x . Précisément, l'onde a une certaine largeur ε (comme la fonction $|x_\varepsilon \rangle$) mais que l'on considère comme très petite (négligeable) ; et bien sûr on espère que la valeur précise de la largeur ε , ainsi que la forme précise de l'onde à petite échelle n'importe pas. Au lieu de la fonction x_ε définie plus haut, on aurait pu prendre n'importe quelle forme se concentrant pour $\varepsilon \rightarrow 0$, et vérifiant eq.(49).
- D'un point de vue mathématique, pour $\varepsilon \rightarrow 0$, la valeur des fonctions $x_\varepsilon(x)$ diverge, donc la limite $|x \rangle$ n'est pas une fonction, c'est à dire $|x \rangle \notin \mathcal{H}$. En physique, on appelle néanmoins cette limite la "**fonction de Dirac**" (introduite par Dirac pour les besoins de la mécanique quantique et avant lui par Heaviside à la fin du XIX ème siècle). Elle est aussi notée $\delta(x' - x)$ (abusivement puisque ce n'est pas une fonction), et la relation fondamentale (1.5.6) s'écrit :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}} \delta(x' - x) \phi(x') dx' = \phi(x)} \quad (1.5.7)$$

- C'est le mathématicien Laurent Schwartz en 1950 [Sch66] qui a donné un sens rigoureux à cette notion, en observant que la relation eq.(1.5.6), montre que $\langle x |$ est une

forme linéaire qui à la fonction $|\phi\rangle$ associe le nombre $\phi(x)$. Il est donc correct de dire que $\langle x|$ est un vecteur dual mentionné page 25 (Habituellement noté $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$). Dans cette théorie mathématique, appelée **théorie des distributions**, $\langle x|$ est appelée la **distribution de Dirac** en x . (Le point de vue physique et mathématique sont donc assez semblables, ce qui est “raisonnable”). La théorie des distributions est fondamentale pour l'étude des équations aux dérivées partielles de la physique. Voir [Tay96a].

- Le fait que \hat{x} a un spectre continu est étroitement relié au fait que les vecteurs propres associés ne sont pas des vecteurs de \mathcal{H} .

Exercice 1.5.3. Pour $\varepsilon > 0$, on considère la fonction suivante appelée **Lorentzienne** de largeur ε :

$$L_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (\varepsilon > 0)$$

Tracer l'allure de $L_\varepsilon(x)$. Montrer que la suite de fonctions L_ε ne converge pas vers une fonction pour $\varepsilon \rightarrow 0$, mais qu'elle converge au sens des distributions vers la distribution de Dirac $\delta(x)$. Pour cela il faut montrer d'après la définition (1.5.5) ou (1.5.7) que pour toute fonction $\phi(x)$ (qui tend assez vite vers 0 pour $x \rightarrow \pm\infty$):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle L_\varepsilon | \phi \rangle = \phi(0)$$

Montrer de même:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} e^{-|x|/\varepsilon} & ; & & \delta(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\varepsilon^2} \\ \delta(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{x} & ; & & \delta(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\varepsilon)}{x^2} \end{aligned}$$

1.5.2.1 Relation de fermeture en position

En utilisant (1.5.6) on a :

$$\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \quad \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx = \int \langle \psi_1 | x \rangle \langle x | \psi_2 \rangle dx$$

donc

$$\hat{I} = \int |x\rangle \langle x| dx$$

qui est la relation de fermeture dans la base position.

Abusivement, on dira que $|x\rangle$, $x \in \mathbb{R}$ forme une base de l'espace \mathcal{H} dite **base de position**, pour la **représentation en position**. (Attention, ce n'est une base au sens précis du terme, car $|x\rangle \notin \mathcal{H}$).

Ainsi la relation eq.(1.5.6) s'interprète par analogie avec eq.(1.4.3) en disant que :

$\phi(x)$ est la composante du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $(|x\rangle)_x$.

De même on a d'une part $\langle x|\phi\rangle = \int \langle x|x'\rangle \langle x'|\phi\rangle dx'$ et eq.(1.5.7) : $\phi(x) = \int \delta(x' - x)\phi(x')dx'$. Donc par identification :

$$\boxed{\langle x|x'\rangle = \delta(x' - x)}$$

Exercice 4. montrer que l'on peut écrire :

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |x\rangle \langle x| dx$$

qui est analogue à (1.5.3) page 47.

Exercice 1.5.4. Si \hat{A} est un opérateur, montrer qu'il est caractérisé par la connaissance de "ses éléments de matrices dans la base position"

$$A(x', x) := \langle x'|\hat{A}|x\rangle$$

appelée **noyau de Schwartz**. Si ϕ est un vecteur, montrer que

$$(\hat{A}\phi)(x') = \langle x'|\hat{A}\phi\rangle = \int \langle x'|\hat{A}|x\rangle \langle x|\phi\rangle dx$$

1.5.3 Spectre de l'opérateur \hat{p} , "base d'impulsion"

On cherche une fonction $\phi_p(x)$ vecteur propre de l'opérateur \hat{p} (qui sera aussi noté $|p\rangle = |\phi_p\rangle$ pour simplifier), et de valeur propre associée $p \in \mathbb{R}$. C'est à dire tels que :

$$\hat{p}|\phi_p\rangle = p|\phi_p\rangle$$

avec $\phi_p(x) = \langle x|\phi_p\rangle = \langle x|p\rangle$. D'après (1.2.2), cela donne

$$-i\hbar d\phi_p(x)/dx = p\phi_p(x)$$

soit $\phi(x) = C \cdot \exp(ipx/\hbar)$. La constante C est arbitraire (cf remarque page 46). On choisit $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ de façon à pouvoir écrire simplement la relation de fermeture ci-dessous, eq.(1.5.9).

Le spectre de \hat{p} est donc constitué par les valeurs propres $p \in \mathbb{R}$ avec vecteur propre associé noté $|p\rangle$ donné par la fonction appelée **onde plane** (on utilise dorénavant la relation (1.5.6)) :

$$\phi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

On remarque que le spectre de \hat{p} est continu, et que les fonctions ϕ_p ont une norme infinie (car $\langle p|p\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{(2\pi\hbar)} dx = \infty$). Tout comme les états $|x\rangle$, les fonctions propres ϕ_p ne sont donc pas des vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

1.5.3.1 Transformée de Fourier, et relation de fermeture en impulsion

Utilisons ($|p\rangle, p \in \mathbb{R}$) comme une base de \mathcal{H} (Comme expliqué plus haut, il est abusif d'appeler cela une base,). Les composantes d'un vecteur $|\phi\rangle$ dans cette base sont donc $\langle p|\phi\rangle$, et on a

$$\langle p|\phi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\phi\rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-i\frac{px}{\hbar}} \phi(x) dx = \tilde{\phi}(p) \quad (1.5.8)$$

montrant que les composantes $\langle p|\phi\rangle$ sont la fonction **transformée de Fourier** $\tilde{\phi}(p)$ de la fonction d'onde $\phi(x)$ (avec le coefficient \hbar en plus qui est juste un facteur d'échelle, par rapport à la définition mathématique de la transformée de Fourier, voir Annexe). On dit aussi que la base $|p\rangle$ est **la base de Fourier**, et que $\tilde{\phi}(p)$ est la **représentation en impulsion**.

La relation de Fourier inverse (voir Annexe) :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\phi}(p) dp$$

s'écrit en notation de Dirac :

$$\langle x|\phi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\phi\rangle dp$$

et montre donc que l'on a la relation de fermeture dans la base d'impulsion :

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| dp \quad (1.5.9)$$

Remarques :

- Sans le choix $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ de la constante ci-dessus, cette relation de fermeture aurait eu un facteur supplémentaire.

1.5.3.2 Applications de la relation de fermeture

d'une part

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|x\rangle \langle x|\phi\rangle dx = \int |\phi(x)|^2 dx$$

d'autre part :

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|p\rangle \langle p|\phi\rangle dp = \int |\tilde{\phi}(p)|^2 dp$$

donc $\langle \phi | \phi \rangle = \int |\tilde{\phi}(p)|^2 dp = \int |\phi(x)|^2 dx$ qui est la **relation de Parseval**.

On a $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ avec $p \in \mathbb{R}$, donc pour tout $\phi \in \mathcal{H}$

$$\langle p | \hat{p} | \phi \rangle = p \langle p | \phi \rangle \quad (1.5.10)$$

donc :

$$\left(\hat{p} \tilde{\phi} \right) (p) = p \tilde{\phi}(p)$$

ainsi l'opérateur \hat{p} agit comme une dérivation dans la base de position (voir définition (1.2.2)), et comme une multiplication dans la base d'impulsion.

Exercice 5. Calculer et représenter la fonction d'onde du paquet d'onde Gaussien en représentation impulsion : $\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p) = \langle p | x_0, p_0, \sigma \rangle$.

Exercice : montrer que l'on peut écrire

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p), \quad \hat{p} = \int p (|p\rangle \langle p|) dp.$$

Solution : d'après (1.5.9) on a $\langle p' | \phi \rangle = \int \langle p' | p \rangle \langle p | \phi \rangle dp$ montrant que $\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p)$ d'après la définition (1.5.7) de la distribution de Dirac (ici en variable p). On a

$$\langle p' | \left(\int p (|p\rangle \langle p|) dp \right) | \phi \rangle = \int p \langle p' | p \rangle \langle p | \phi \rangle dp = \int p \delta(p' - p) \langle p | \phi \rangle dp = p' \langle p' | \phi \rangle = \langle p' | \hat{p} | \phi \rangle$$

d'après (1.5.10). Donc $\hat{p} = \int p (|p\rangle \langle p|) dp$.

Exercice Écrire l'équation d'évolution de Schrödinger en représentation d'impulsion, pour la fonction $\tilde{\phi}(p, t)$.

1.5.4 Spectre de l'opérateur \hat{H} , base des états stationnaires

L'expression exacte de l'opérateur $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ dépend du potentiel $V(x)$ considéré.

Supposons qu'une onde $|\phi_E\rangle \in \mathcal{H}$ (non nulle) vérifie l'équation appelée **équation de Schrödinger stationnaire** :

$$\hat{H} |\phi_E\rangle = E |\phi_E\rangle \quad (1.5.11)$$

La valeur propre $E \in \mathbb{R}$ est appelée **énergie de** $|\phi_E\rangle$ (car E comme le Hamiltonien \hat{H} a la dimension d'une énergie).

Sauf dans des cas particuliers (dus à des symétries), il est impossible de trouver analytiquement l'expression des fonctions propres $\phi_E(x)$ et des valeurs propres E . On doit utiliser des méthodes d'approximation décrites dans le chapitre 8.

Ces cas particuliers à une dimension sont par exemple :

- $V(x) = 0$: potentiel nul, c.a.d. pas de force extérieure, donc **particule libre**.
- $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$: **potentiel quadratique**, c.a.d. force $F(x) = -dV/dx = -kx$ linéaire (dite **Harmonique**).
- Plus généralement $V(x) = ax^2 + bx + c$ par morceaux. Le cas de potentiels constants par morceaux est très étudié en licence.

1.5.4.1 Interprétation physique : onde stationnaire

Si à $t = 0$, $|\phi(0)\rangle = |\phi_E\rangle$ vérifie (1.5.11) alors au cours du temps, l'onde $|\phi(t)\rangle$ évolue d'après (1.3.1) comme :

$$\frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)|\phi(t)\rangle = -i\frac{E}{\hbar}|\phi(t)\rangle$$

dont la solution est explicitement :

$$|\phi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)|\phi(0)\rangle \quad (1.5.12)$$

c'est à dire

$$\phi(x, t) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\phi(x, 0).$$

Autrement dit, l'enveloppe de l'onde ne change pas (i.e $|\phi(x, t)|$ est constant au cours du temps), seule sa phase complexe change à vitesse constante (dépendant de E). On dit alors que $|\phi(t)\rangle$ est une **onde stationnaire** ou un **état stationnaire**. Remarques :

- c'est l'analogie des ondes stationnaires sur une corde vibrante qui pulsent d'après l'équation d'évolution des ondes $\partial_t^2\phi - c^2\partial_x^2\phi = 0$.
- Il est important de savoir que les ondes stationnaires (vecteurs propres de \hat{H}) sont des solutions particulières. En générale pour une condition initiale quelconque $\phi(x, 0)$ l'onde évolue, se déforme et n'est pas stationnaire. Voir exemples ci-dessous. Les ondes stationnaires sont néanmoins importantes pour trois raisons au moins :
 1. Au niveau mathématique, les vecteurs propres de \hat{H} forment une base de l'espace total \mathcal{H} .
 2. A température (presque) nulle, un système non isolé se met dans son état de plus basse énergie, qui est l'onde stationnaire de plus basse énergie. A température plus élevée, on montre en physique statistique (loi de Boltzmann) que le système est dans une répartition statistique d'ondes stationnaires de différentes énergies. L'état stationnaire de plus basse énergie s'appelle l'**état fondamental**.
 3. Dans les expériences de spectroscopies (Expérience assez standard pour sonder la matière par le rayonnement), on impose une force stationnaire au système (par exemple une onde monochromatique laser sur une molécule), la faisant transiter vers un état d'énergie spécifique.

- (*) Pour l'opérateur de Schrödinger $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, les vecteurs propres peuvent être choisis comme étant des fonctions $\phi(x)$ réelles (et non complexes), car l'équation différentielle est une équation réelle. **Exercice** : à montrer.

1.5.4.2 Exemple d'une particule libre sur l'axe x

Si $V(x) = 0$ pour tous $x \in \mathbb{R}$, c'est à dire $\hat{H} = \frac{p^2}{2m}$, alors les fonctions propres sont les ondes planes $|\phi_E\rangle = |p\rangle$, car $\hat{H}|\phi_E\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$ et donc $E = \frac{p^2}{2m} \geq 0$ est l'énergie cinétique.

Remarques

- Le spectre est continu car toutes les valeurs de $E \geq 0$ sont permises. Cela est relié au fait que à toute énergie $E \geq 0$, la particule peut partir à l'infini. Voir plus loin un critère plus précis, figure 1.5.2.
- Pour une valeur donnée de E , il y a deux fonctions propres différentes associées : $|p\rangle, |-p\rangle$, avec $p = \sqrt{2mE}$. On dit que la valeur propre E est **dégénérée**, avec une **multiplicité** deux.
- (*) La relation de fermeture dans la base d'énergie s'écrit pour la particule libre

$$I = \int_{\mathbb{R}} dp |p\rangle \langle p|$$

- Physiquement $|p\rangle$ correspond à une onde d'énergie E se déplaçant vers la droite, et $|-p\rangle$ vers la gauche.

1.5.4.3 Exemple d'une particule libre sur un cercle

L'espace des fonctions périodiques est $\mathcal{H} = L^2(S^1)$ déjà décrit page 42. Pour une particule libre $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$. Pour une fonction de base $V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik\frac{2\pi x}{L})$, voir eq.(1.4.4), on a :

$$\langle x|\hat{p}|V_k\rangle = -i\hbar \frac{dV_k}{dx}(x) = \frac{k2\pi\hbar}{L} V_k(x) = p_k \langle x|V_k\rangle$$

donc les valeurs propres de l'impulsion sont discrètes

$$p_k = \frac{k2\pi\hbar}{L}, \quad k \in \mathbb{Z}$$

et aussi pour l'énergie $\hat{H}|V_k\rangle = E_k|V_k\rangle$ avec :

$$E_k = \frac{p_k^2}{2m}, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Le spectre d'énergie est à nouveau de multiplicité deux (sauf si $k = 0$), mais cette fois ci le spectre d'énergie est discret. On verra que cela est lié au fait que la particule est confinée sur un cercle. La relation de fermeture en énergie s'écrit :

$$I = \sum_{k \in \mathbb{Z}} |V_k\rangle \langle V_k|$$

1.5.4.4 Remarques

Spectre discret ou continu ? En général ($V(x)$ quelconque) le spectre de \hat{H} peut avoir une partie discrète (i.e des valeurs propres associée à des fonctions d'ondes normalisées) et une partie continue. C'est le cas dans l'exemple important d'un puits de potentiel, voir figure 1.5.2. Cela sera justifié plus loin.

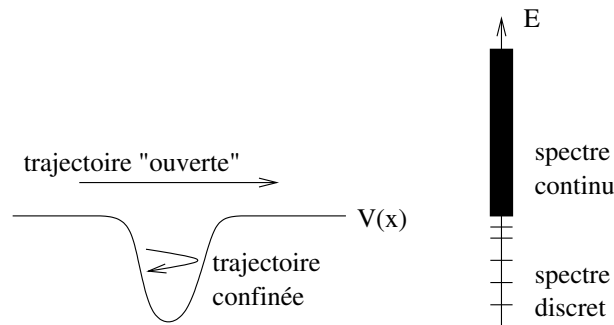


FIGURE 1.5.2 – Schéma d'un Spectre discret et continu en relation avec la nature des trajectoires classiques confinée ou ouvertes (partant à l'infini).

Il y a des exemples moins intuitifs, par exemple celui d'un potentiel $V(x)$ "aléatoire", mais borné ($0 < V(x) < V$), décrivant un électron dans un conducteur contenant des impuretés par exemple. On montre alors que le spectre est constitué de valeurs propres ("spectre ponctuel") discret pour toute valeur d'énergie (même au dessus du potentiel $E > V$) et que toutes les fonctions d'ondes d'énergie sont localisées (norme finie), alors qu'une particule classique d'énergie $E > V$ peut s'échapper à l'infini. C'est le phénomène de **localisation forte de Anderson**.

Relation de fermeture (*) A partir de l'ensemble des vecteurs propres de \hat{H} , on peut écrire la relation de fermeture. Supposons que chaque vecteur propre est indicé par i . Alors

$$I = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

Dans cette notation un peu vague, il faut comprendre que l'indice i peut être continu si le spectre est continu, et alors \sum est une intégrale. Dans ce cas la relation de fermeture s'écrit :

$$\hat{I} = \int dn |E_n\rangle\langle E_n| = \int \left(\frac{dn}{dE}\right) dE |E_n\rangle\langle E_n| = \int |E_n\rangle\langle E_n| \rho(E) dE$$

où $\rho(E) = \frac{dn}{dE}$ est la densité d'état.

, et que deux indices i différents peuvent correspondre à une même énergie $E = E_i = E_{i'}$ si il y a dégénérescence.

On a de même

$$\hat{H} = \sum_i E_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

Exercice : Utilisation pour l'évolution d'un état quelconque (TD) : Exprimer $|\phi(t)\rangle$ à partir de $\langle \phi_i | \phi(0) \rangle$ où $|\phi_i\rangle$ sont les vecteurs propres de \hat{H} . Cas d'une particule libre.

1.6 Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure

1.6.1 Opération idéale de mesure d'un système quantique

1.6.1.1 Limite de validité de l'équation de Schrödinger

Jusqu'à présent nous avons supposé que la "particule" (i.e. l'onde quantique) se déplaçant selon l'axe x était parfaitement isolée du reste de la nature, dans le sens où son mouvement n'influçait pas l'environnement.

Donnons dès à présent une définition d'un système quantique isolé :

Définition 1.6.1. Dans une description quantique de deux systèmes en interaction, par exemple un système 1 couplé à un système 2 (par ex. "l'environnement"), on dit que le **système 1 est isolé du système 2 (par ex. de l'environnement)** si l'évolution de l'état quantique de l'environnement $\psi_{env}(t)$ est indépendant de l'état quantique du système 1 (ici $|\psi_1(0)\rangle$ ou $|\psi'_1(0)\rangle$) pendant le processus étudié :

$$|\psi_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \rightarrow |\psi_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle, \quad |\psi'_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \rightarrow |\psi'_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle$$

(en écrivant $|\psi_1\rangle|\psi_{env}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_{env}\rangle$ on utilise ici implicitement le produit tensoriel \otimes qui sera introduit plus tard). Pour comprendre le sens de cette définition, remarquer que si le système 1 est préparé dans l'état de superposition $\psi_1''(0) = \psi_1(0) + \psi'_1(0)$ alors son évolution sera décrite par :

$$\begin{aligned} |\psi_1''(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle &= |\psi_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle + |\psi'_1(0)\rangle|\psi_{env}(0)\rangle \\ &\rightarrow |\psi_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle + |\psi'_1(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle \\ &= (|\psi_1(t)\rangle + |\psi'_1(t)\rangle)|\psi_{env}(t)\rangle \\ &= |\psi_1''(t)\rangle|\psi_{env}(t)\rangle \end{aligned}$$

cet état $|\psi_1''(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + |\psi'_1(t)\rangle$ reste donc dans une superposition (cela peut se manifester expérimentalement par des figures d'interférences etc.). Sans l'hypothèse que le système soit isolé, on n'aurait pas pu obtenir cette conclusion.

Naturellement il n'est pas toujours vrai qu'un système soit isolé :

- Si la particule influence seulement quelques autres particules autour d'elle, il faut considérer cet ensemble de particules comme un système quantique dans sa globalité, (caractériser l'espace de Hilbert correspondant) et l'équation d'évolution de Schrödinger s'applique à l'ensemble du système quantique. Ce cas sera décrit dans les chapitres suivants. Par exemple il peut s'agir d'un atome influçant les quelques

atomes voisins dans une petite molécule. Il faut alors traiter la molécule entière par la mécanique quantique.

- Dans d'autres cas la particule influence un nombre incalculable de particules autour d'elle. Nous allons considérer le cas simplifié, lorsqu'un expérimentateur observe la particule afin de connaître son état dynamique comme sa position, sa vitesse ou son énergie : forcément la particule en question influence les appareils de mesure de l'expérimentateur. Et qu'on le veuille ou non ces appareils influenceront (un tant soit peu) leur environnement, ne serait-ce que les molécules d'air, ou les photons autour d'eux.

Dans ce dernier cas, on sort du cadre de la théorie quantique décrite précédemment : *l'équation d'évolution de Schrödinger ne s'applique plus*, car la particule n'est plus isolée au sens que l'on a convenu. Ce qui se passe alors est décrit par une autre loi appelée **postulat de la mesure** énoncé ci-dessous. Ce postulat a été "découvert" seulement parce qu'il correspond parfaitement aux faits expérimentaux. (On doit dire "découvert" et non pas "inventé").

1.6.1.2 Exemple d'expérience : mesure de la position d'une particule passant par les double fentes de Young.

Afin de se fixer les idées sur un exemple concret, nous décrivons ici une expérience qui mesure la position d'un atome.

La particule est issue d'une source et passe par un dispositif de double fentes de Young (qui a pour but de créer des interférences de l'onde quantique). L'onde quantique arrive ensuite sur une rangée de détecteurs. Voir la figure 1.6.1. Une telle expérience a été réalisée, par exemple avec des atomes (néon), des électrons, et même des molécules C_{60} .

Supposons que la source soit capable de **lancer individuellement des atomes, toujours dans le même état** : un paquet d'onde réparti sur plusieurs directions. Voici la description orthodoxe de cette expérience :

- (A) Au sortir de la source, ce paquet d'onde évolue librement (1) ; puis il passe à travers les deux fentes d'Young (2) (une partie est réfléchi), et ensuite les deux parties de l'onde transmises interfèrent entre elles, créant une onde (3) au niveau des détecteurs qui possède des ondulations d'intensité $|\psi(x)|^2$. Durant toute cette période, l'onde a subi l'influence des fentes d'Young, mais elle n'a pas influencé (de façon significative) son environnement. Par conséquent, il est correct de décrire la particule par l'équation de Schrödinger et par une fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$.
- (B) En arrivant au détecteurs, la particule interagit avec eux. Il n'est plus correct de continuer à décrire la particule individuellement par l'équation de Schrödinger. De façon surprenante, un seul détecteur situé à la position x_1 détecte la particule. La valeur de x_1 sélectionnée est le fruit du hasard le plus total (Il n'y a aucun moyen de le prédire). On suppose qu'après la détection, la particule n'est pas détruite, et est à nouveau libre. Elle est alors décrite par une fonction d'onde qui est un paquet d'onde localisé en x_1 (la valeur observée). On dit qu'il y a **réduction du paquet d'onde**.

(C) La détection d'un seul atome donne une valeur x_1 de position qui est complètement aléatoire (imprévisible). Mais si l'on répète la même expérience un grand nombre de fois avec le même état initial, on détectera des atomes aux positions successives $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$, et l'on s'apercevra que l'histogramme des valeurs de x_i coïncide avec le module carré de la fonction d'onde $|\psi(x)|^2$ à l'approche des détecteurs. Cela signifie précisément, que la courbe **Nombre de réponses du détecteur(x) (renormalisée) converge vers $|\psi(x)|^2$ pour $N \rightarrow \infty$** . Ainsi, après l'envoi de N atomes, les détecteurs touchés seront répartis comme sur la figure (1.6.2).

La seule prédiction que peut faire la mécanique quantique est donc d'ordre statistique : pour $N \rightarrow \infty$, l'histogramme converge vers $|\psi(x)|^2$ prédit par la théorie. (Bien que la théorie quantique décrive la fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$ individuelle d'un atome, celle-ci n'est pas observable).

1.6.1.3 Postulat de la mesure

L'expérience que nous venons de décrire montre une application du postulat de la mesure dans le cas d'une mesure de la position de la particule. En fait, ce postulat est valide pour toutes les mesures physiques possibles. Voici sa généralisation.

Supposons que avant la mesure, la particule soit isolée de l'environnement, et décrite par l'état quantique $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$.

L'expérimentateur décide de mesurer la position, ou l'impulsion ou l'énergie de la particule, ou toute autre grandeur qui est de même associée à un opérateur **auto-adjoint** noté \hat{A} . ($\hat{A} = \hat{x}$ ou \hat{p} ou \hat{H} , ...). On appelle cet opérateur \hat{A} **l'observable**.

On note le spectre de \hat{A} par

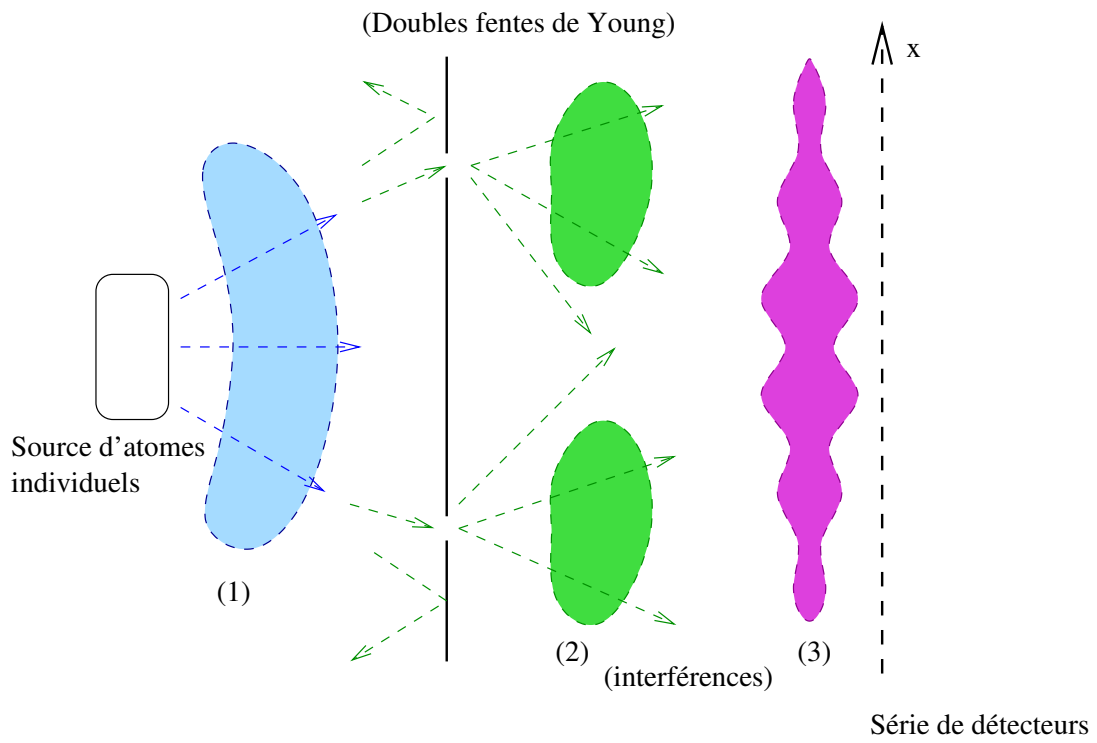
$$\hat{A}|\psi_a\rangle = A_a|\psi_a\rangle$$

où a est un indice discret ou continu et $(A_a)_a$ (nombre réel) sont les valeurs propres. D'après le postulat $(A_a)_a$ sont aussi les différents résultats possibles de la grandeur mesurée. Attention, il peut y avoir des **dégénérescences**, c'est à dire des valeurs propres identiques. $A_a = A_{a'}$ avec des indices $a \neq a'$.

À une valeur propre $A \in \mathbb{R}$ donnée, on associe **le projecteur spectral** :

$$\hat{\mathcal{P}}_A = \sum_{a \text{ tq } A_a=A} \frac{|\psi_a\rangle\langle\psi_a|}{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}$$

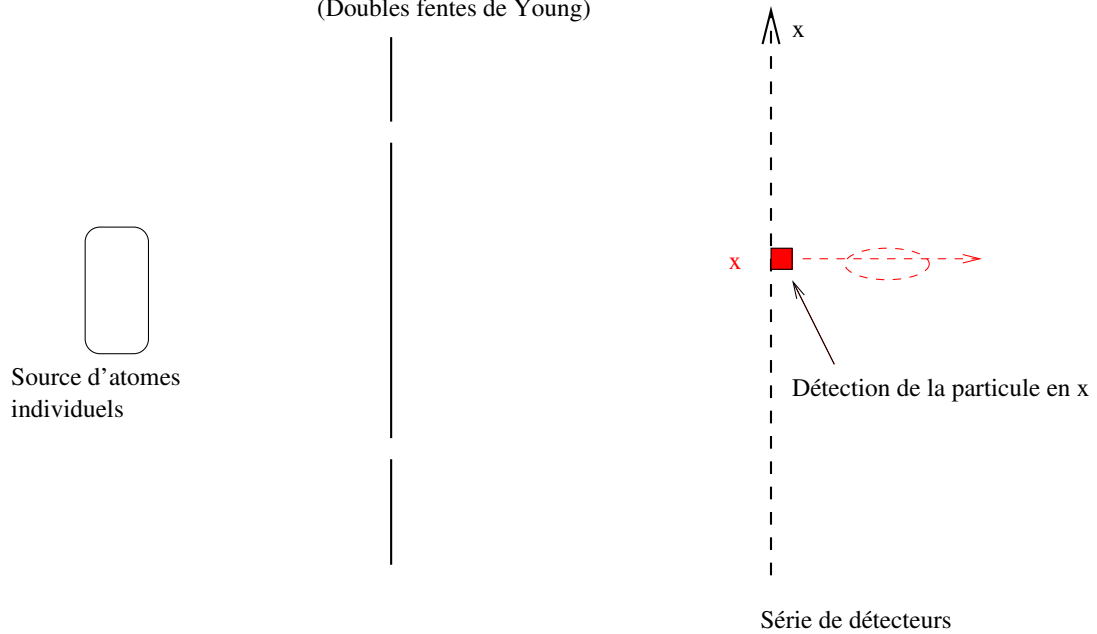
où la somme porte sur les indices a tel que $A_a = A$. projecteur orthogonal sur l'espace propre associé, voir (1.5.2) page 47.



(A) Avant la détection:

Propagation de l'onde quantique d'un atome, décrite par l'équation de Schrodinger.

(Doubles fentes de Young)



(B) après la détection:

Un détecteur aperçoit la particule à la position x (Hasard total !)

La particule est ensuite localisée en x .

FIGURE 1.6.1 – Mesure de la position d'un atome (A) et (B)

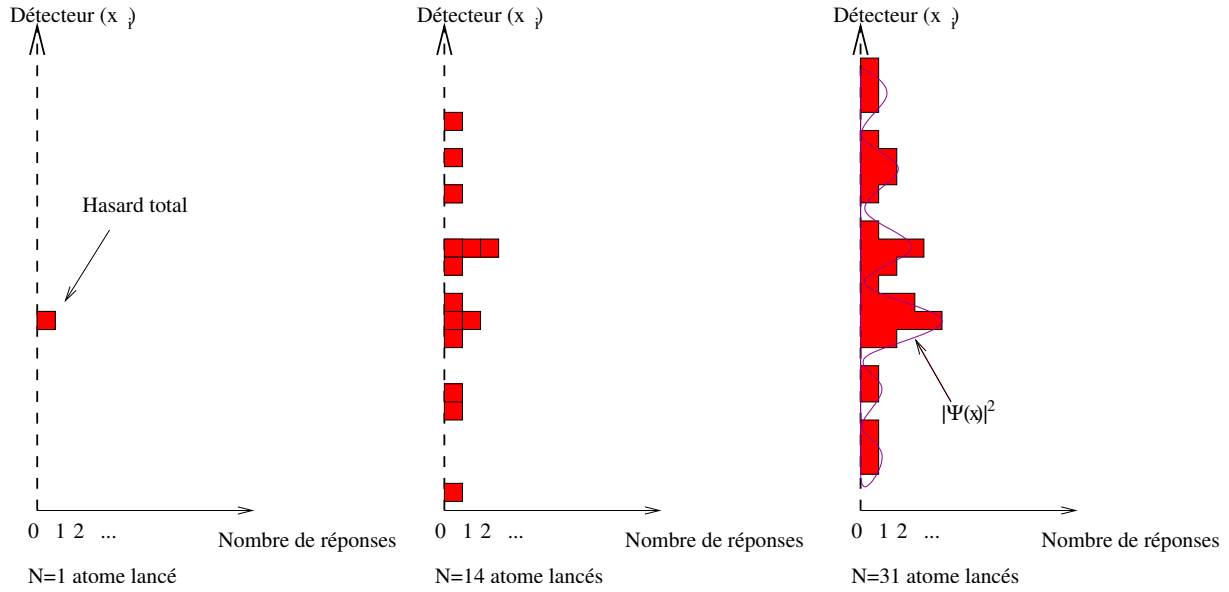


FIGURE 1.6.2 – (C) Réponses des détecteurs après l'envoi de N atomes. La seule prédiction de la mécanique quantique est pour $N \rightarrow \infty$: l'histogramme converge vers $|\psi(x)|^2$.

Alors juste après la mesure, la valeur observée sera l'une ou l'autre des valeurs propres A_a selon un hasard total. Si A_a est une valeur propre simple alors la valeur A_a est observée avec la probabilité

$$\text{Proba}(A) = \frac{|\langle \psi_a | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle \langle \psi_a | \psi_a \rangle} \quad (1.6.1)$$

et dans ce cas, juste après la mesure, la particule se trouve dans l'état

$$|\phi'\rangle = |\psi_a\rangle \frac{\langle \psi_a | \phi \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle}.$$

Plus généralement, si la valeur propre A est dégénérée alors la valeur A est observée avec la probabilité

$$\text{Proba}(A) = \frac{\|\hat{\mathcal{P}}_A \phi\|^2}{\|\phi\|^2} \quad (1.6.2)$$

et juste après la mesure, la particule se trouve dans l'état

$$|\phi'\rangle = \hat{\mathcal{P}}_A |\phi\rangle.$$

Remarque : si l'indice a est continu alors $P(A) = P_a$ est une **densité de probabilité**, c'est à dire que $P(A)dA$ est la probabilité de détecter A' avec $A' \in [A, A + dA]$.

Remarques

- Noter que dans le cas $N = 1$ (valeur propre A_a simple), les deux énoncés sont équivalents car $\hat{P}_a = \frac{1}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} |\psi_a\rangle \langle \psi_a|$ donc $\left\| \hat{P}_a \phi \right\|^2 = \left\| |\psi_a\rangle \frac{\langle \psi_a | \phi \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} \right\|^2 = \frac{|\langle \psi_a | \phi \rangle|^2}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle}$.
- Cela signifie précisément que juste après la mesure, un des évènements suivants arrive : soit l'expérimentateur observe la valeur A_1 et alors la particule est passée dans l'état $|\psi_1\rangle$, soit il observe A_2 et la particule est en $|\psi_2\rangle$, etc... on ne sait pas lequel de ces évènements se produit, seulement on sait que c'est A_1 avec la probabilité P_1 , ou A_2 avec la probabilité P_2, \dots . Que signifie précisément la notion de probabilité ? Comme expliqué ci-dessus, cela n'a de sens que si l'on répète la même opération de mesure dans des conditions strictement identiques un grand nombre N de fois. Après chaque mesure, on aura un résultat qui résulte du hasard ; on aura une série de résultats disons par exemple $A_1, A_3, A_4, A_1, A_2, A_1, \dots$. Alors la proportion de A_1 par rapport au total est P_1 , la proportion de A_2 est P_2 , etc... (autrement dit, appelons N_{A_i} le nombre de fois que le résultat A_i apparaît. alors $(N_{A_i}/N) \rightarrow P_i$ pour $N \rightarrow \infty$)
- On a $\sum_a P_a = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \sum_a \langle \phi | \psi_a \rangle \langle \psi_a | \phi \rangle = \frac{\langle \phi | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 1$, donc

$$\sum_a P_a = 1$$

ce qui est nécessaire pour parler de probabilité. De plus la valeur des probabilités est la même pour deux vecteurs proportionnels : $|\phi\rangle$ et $|\phi'\rangle = \lambda|\phi\rangle$, avec $\lambda \in \mathbb{C}$. En effet

$$P'_a = \frac{|\langle \psi_a | \lambda \phi \rangle|^2}{\langle \lambda \phi | \lambda \phi \rangle} = \frac{|\lambda|^2 |\langle \psi_a | \phi \rangle|^2}{|\lambda|^2 \langle \phi | \phi \rangle} = P_a$$

Par conséquent on dit que $|\phi\rangle$ et $|\phi'\rangle = \lambda|\phi\rangle$ correspondent au même **état physique**, puisqu'ils ont les mêmes propriétés observables. Si les états $|\phi\rangle$ et $|\psi_a\rangle$ sont normalisés, alors $\langle \phi | \phi \rangle = 1$, $\langle \psi_a | \psi_a \rangle = 1$, et l'expression (1.6.1) est légèrement simplifiée, mais ce n'est pas du tout nécessaire.

- En résumé, tant que le système est isolé, la mécanique quantique est déterministe : elle est capable de prévoir l'évolution de la fonction d'onde grâce à l'équation de Schrödinger. Mais lorsque qu'une mesure se produit, elle n'est plus capable de prévoir exactement ce qu'il va se produire. Elle permet seulement de connaître les probabilités des différentes possibilités (ce qui est déjà très fort, puisque à partir de ces probabilités et avec la théorie de la physique statistique, on obtient les lois de la thermodynamique et de la mécanique classique). Il y a donc une part de hasard inhérent à la théorie quantique, lors de la mesure.
- Ce processus de mesure ne nécessite pas la présence d'un expérimentateur. Il se produit dès que la particule quantique influence son environnement, et peut donc se produire aussi bien dans une pièce vide, que sur une île déserte, que sur Mars ou ailleurs. Ce phénomène est en fait incessant et omniprésent, c'est le contraire qui est plutôt exceptionnel : un système peut être considéré comme étant approximativement isolé que pendant un certain intervalle de temps appelé le **temps de**

décohérence τ_{decoh} . Il est intéressant d'appliquer l'équation de Schrödinger à ce système, seulement si son état quantique a le temps de changer de façon significative pendant cet intervalle. Voir le site Web <http://www.decoherence.de/>. Ou le cours en PDF de C. Cohen-T : [Cla88] ou de Serge Haroche [Har02].

Exemple de valeurs de τ_{decoh} ([DEC⁺96], p.57) :

τ_{decoh}	Grosse molécule taille $a=10^{-6}$ cm	Poussière taille $a = 10^{-3}$ cm
Effet des molécules d'air	10^{-18} s.	10^{-24} s.
Effet du "vide de labo" (10^3 part/cm ³) @@	10^{-5} s.	10^{-11} s.
Effet des photons fossiles à 300K.	10^6 s.	

Il faut comparer ces temps aux temps électroniques (période d'un électron dans un atome) $\tau_e \simeq \hbar/eV \simeq 10^{-15}$ s, ou aux temps moléculaires (période de vibration d'un atome) $\tau_{vib} \simeq \hbar/10^{-3}eV \simeq 10^{-10}$ s. Les effets de cohérence quantique "n'existent pas" si les temps de décohérence sont plus courts que ces temps caractéristiques.

- Dans la description vectorielle de la mécanique quantique que nous avons adoptée jusqu'à présent, nous avons montré que toutes les bases ortho-normées de \mathcal{H} sont "équivalentes" dans le sens où elles permettent de représenter les mêmes états quantiques et la même équation d'évolution. Ce ne sont que des représentations différentes.

Par contre le mécanisme de la mesure qui résulte de l'interaction du système quantique avec son environnement privilégie une certaine base, qui est **la base de position** en général, ou **la base d'énergie** dans les expériences de spectroscopie.

Exemple : mesure de la position Voyons comment l'énoncé général du postulat de la mesure donne l'exemple de la mesure de position d'une particule traité plus haut.

Supposons que l'état de la particule soit un paquet d'onde $|\phi\rangle$, et que l'observateur effectue une mesure de la position x . L'observable est donc l'opérateur $\hat{A} = \hat{x}$. La grandeur observée est la position x qui est une grandeur continue. On cherche l'expression de la loi de probabilité : $P(x)dx$ qui est la probabilité de détecter la particule dans l'intervalle $[x, x + dx[$. la fonction $P(x)$ s'appelle **densité de probabilité**.

La base de l'observable est la base de position $|x\rangle$, et d'après (1.6.1), on a :

$$P(x) = \frac{|\langle x|\phi\rangle|^2}{\langle \phi|\phi\rangle} = \frac{1}{\langle \phi|\phi\rangle} |\phi(x)|^2 \quad (1.6.3)$$

Dans le cas d'un paquet d'onde normalisé $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$ eq.(1.1.6), cela donne

$$P(x) = |\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)|^2 = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp(-(x - x_0)^2 / \sigma^2)$$

qui est une Gaussienne représentée sur la figure 1.1.3.

Si après une mesure, l'observateur détecte la particule dans l'intervalle $[x, x + dx[$, alors la particule se trouve dans l'état $|x\rangle$ (plus précisément $|x_\varepsilon\rangle$ avec $\varepsilon = dx$, voir fig. 1.5.1). L'onde de la particule subit un brusque changement $|\phi\rangle \rightarrow |x\rangle$, et se concentre spatialement; on dit qu'il y a **réduction du paquet d'onde**.

Mesure de l'impulsion De la même façon si l'observable est l'opérateur de position $\hat{A} = \hat{p}$, on obtient que la probabilité d'observer une impulsion comprise dans l'intervalle $[p, p + dp[$ est

$$P(p)dp = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left| \tilde{\phi}(p) \right|^2 dp$$

Dans le cas du paquet d'onde normalisé eq.(1.1.6) , cela donne

$$P(p) = \left| \tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p) \right|^2 = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

qui est une Gaussienne. Après la mesure, la fonction d'onde de la particule est une certaine onde plane $|p\rangle$.

1.6.2 Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique

1.6.2.1 Faut-il interpréter ? La description orthodoxe suffit-elle ?

Le postulat de la mesure présenté plus haut est indispensable pour donner une réalité à la théorie quantique, pour la confronter aux résultats d'expériences. **Par rapport à la confrontation avec l'expérience, la théorie quantique, avec le postulat de la mesure est parfaitement satisfaisant** : il n'y a pas de mesure qu'il les contredisent, et tous les phénomènes observables semblent entrer dans le cadre de cette théorie (bien que de nombreux phénomènes physiques, soient en pratique hors de portée d'explications simples et directes à partir des premiers principes : citons les phénomènes complexes comme la turbulence (météo) ou l'auto-organisation de la matière).

Cependant d'un point de vue théorique ou plus conceptuel, une lacune demeure : si la théorie quantique décrit tous les phénomènes physiques, elle devrait aussi décrire les phénomènes macroscopiques, les appareils de mesure, et donc l'interaction entre une particule quantique et un appareil de mesure. Autrement dit, le "postulat de la mesure" ne devrait pas être un "postulat" (c'est à dire imposé sans explications), mais il devrait pouvoir s'expliquer dans le cadre de la théorie quantique ordinaire lorsque celle-ci est appliquée à la particule et à son environnement.

1.6.2.2 Où est la Limite classique-quantique ?

(lire l'article Zurek [Zur91])

Disons tout de suite, que cela n'est pas fait, aucune expérience ne permet de montrer que la théorie quantique (comme le principe de superposition d'états) s'applique à des objets macroscopiques. Tout au plus des expériences récentes montrent des phénomènes d'interférences avec des systèmes contenant quelques dizaines de particules, donc encore

microscopique (expériences d'Aroche et al. entre photons et atomes)⁸. La raison de cette limite n'est pas que le principe de superposition cesse de s'appliquer au-delà de quelques particules, cela on ne le sait pas. La difficulté vient du fait que pour tester le principe de superposition, il faut faire des expériences de type interférences, et pour cela isoler suffisamment le système quantique de son environnement ; c'est cet isolement qui est quasiment impossible à obtenir en pratique ; c'est le phénomène de décohérence quantique.

La question suivante reste donc ouverte : la théorie quantique s'applique t-elle aux assemblées d'objets (objets macroscopiques) ou se limite t-elle à peu de particules ? Sinon quelle expérience faire pour détecter cette limite ? Quelle nouvelle théorie permettrait de dépasser cette limite ?

Remarquons que comme le prouve l'histoire des sciences, en général, une nouvelle théorie physique ne se trouve que à partir de résultats expérimentaux préalables.

1.6.2.3 Une interprétation alternative : appliquons le principe de superposition aux objets macroscopiques

Essayons cependant d'appliquer naturellement les idées de la mécanique quantique au delà de son domaine de validité prouvé, c'est à dire d'appliquer le principe de superposition aux objets macroscopiques comme les détecteurs, et tout l'environnement. Voici ce que cela donnerait dans l'exemple de la mesure de position d'une particule, figure (1.6.1) ci-dessus.

Il y a des détecteurs à chaque position (discrète) x . L'état du détecteur situé en x éteint est noté : $|D_x\rangle$. Par contre si le détecteur interagit avec la particule, il "s'allume" et passe dans l'état quantique noté $|D_x^*\rangle$. Autrement dit, l'interaction de l'onde quantique de la particule avec les détecteurs, est définie par la règle d'évolution suivante. (En notant $|x\rangle$ un état de la particule à la position x)

$$|x\rangle|D_{x'}\rangle \xrightarrow{\text{Evolution}} \begin{cases} |x\rangle|D_{x'}^*\rangle : & \text{si } x = x' \\ |x\rangle|D_{x'}\rangle : & \text{si } x \neq x' \end{cases}$$

L'état quantique de l'ensemble des détecteurs est décrit par la notation

$$|D\rangle = (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_{x_N}\rangle)$$

(on verra au chapitre suivant qu'il s'agit d'un produit tensoriel).

Avant d'interagir avec les détecteurs, la particule est dans l'état quantique $|\psi\rangle$ qui est réparti dans l'espace, et se décompose donc (principe de superposition) en paquet d'ondes localisés en x : $|\psi\rangle = \sum_x \psi(x) |x\rangle$.

8. Une remarque est nécessaire ici : les phénomènes physiques comme la super-fluidité, la supraconductivité ou la condensation de Bose-Einstein font intervenir au moins des milliers de particules et se décrivent par un état collectif. La théorie quantique permet de bien décrire cet état collectif, en terme "d'état cohérent". Pour cela on dit souvent que la matière est dans un état quantique macroscopique. Notons cependant, que l'on n'observe pas la matière dans une superposition cohérente de tels états (ou alors dans une superposition de deux ou trois de ces états, voir expériences sur les jonctions Josephson quantiques). En fait d'un point de vue théorique, ces états collectifs de la matière pour les atomes, sont des "états classiques" semblables à l'état du champ classique électromagnétique pour les photons.

En arrivant sur les détecteurs, toujours en appliquant le principe de superposition, l'interaction particule-détecteurs est décrite par (faire schéma avec deux détecteurs@@) :

$$|\psi\rangle|D\rangle = \sum_x \psi(x)|x\rangle (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_{x_N}\rangle)$$

$$\xrightarrow{\text{Evolution}} \sum_x \psi(x)|x\rangle (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_x^*\rangle \dots |D_{x_N}\rangle)$$

Ainsi le résultat de la mesure serait une superposition d'état de la forme

$$|x\rangle (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_x^*\rangle \dots |D_{x_N}\rangle)$$

. Un tel état décrit la particule localisée en $|x\rangle$, le détecteur correspondant D_x allumé et les autres éteints. C'est bien la réalité physique observée dans une expérience. Cet état quantique décrit donc la particule et son environnement. On dit que c'est une description du "monde classique". (Dans la description ci-dessus, on pourrait rajouter d'autres objets de l'environnement sans difficulté, de la même façon que l'on a traité les détecteurs).

Mais contrairement à l'explication orthodoxe (postulat de la mesure) et au bon sens de ce que l'on voit, l'état final décrit ici est une superposition de tels états de type "mondes classiques". Autrement dit tous ces états coexisteraient simultanément. Voici donc ce que donnerait une application (abusive et naïve) de la mécanique quantique à tous les objets macroscopiques de notre environnement : l'existence de mondes multiples qui coexistent et s'ignorent mutuellement. Cette interprétation de la mécanique quantique a été remarquée dès le début par les physiciens (qui imaginaient le chat de Schrödinger...), et a porté le nom de "**Many world interpretation**" après la thèse de H. Everett en 1957.

Notons cependant que cette description des choses ne donne aucune explication quand à l'origine des probabilités : d'où provient la loi (1.6.1) ? Il ne s'agit donc pas d'une interprétation complète de la mécanique quantique.

Nous en avons parlé, premièrement car cette démarche théorique qui est de décrire l'environnement par ses états quantiques est couramment utilisée, notamment dans les théories de la décohérence qui elles ont des conséquences observables.

Deuxièmement, c'est aussi pour montrer que le phénomène de la mesure quantique, et donc du sens de la mécanique quantique elle-même, est un problème difficile. Il n'y a même pas de question claire. C'est un sujet très difficile, qui préoccupe les physiciens depuis le début de la mécanique quantique, sans qu'aucun n'ait pu apporter une réponse satisfaisante à ce jour. Il faut savoir que de nombreuses tentatives d'interprétations existent, voir par exemple le livre de R.Omnès [Omn00].

1.6.3 Valeurs moyenne et variance de l'observable

Dans cette section nous étudions les relations possibles entre un opérateur autoadjoint donné \hat{A} et un état quantique donné $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$.

Cette étude a un sens physique immédiat dans le cadre du processus de mesure de l'observable \hat{A} sur l'état $|\phi\rangle$ comme expliqué plus haut, et permettra de donner les formules statistiques (moyenne et variance) de la grandeur observée.

Mais cette étude a aussi un sens si le système reste isolé de son environnement. L'interprétation de l'étude dans ce cas est d'analyser l'état $|\phi\rangle$ par rapport à la base propre de \hat{A} .

Comme ci-dessus, on note le spectre de \hat{A} par

$$\hat{A}|\psi_a\rangle = A_a|\psi_a\rangle$$

où a est un indice discret ou continu et $\langle\psi_a|\psi_a\rangle = 1$. Dans la base propre de \hat{A} , un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ quelconque se décompose :

$$|\phi\rangle = \sum_a \phi_a |\psi_a\rangle, \quad \text{avec } \phi_a = \langle\psi_a|\phi\rangle$$

et l'on pose comme ci-dessus :

$$P_a = \frac{|\langle\psi_a|\phi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle}$$

qui s'interprète comme la probabilité d'observer la valeur A_a dans le cadre d'une mesure, voir section précédente. (Dans le cadre d'un système isolé, P_a est juste un coefficient positif qui ne s'interprète pas comme une probabilité).

La liste des valeurs possibles A_a avec leur probabilité respective P_a pour différents a constitue un histogramme, et il est conventionnel de définir des grandeurs caractéristiques pour un tel histogramme (voir figure 1.6.3) :

Définition 1.6.2. La **valeur moyenne** de l'histogramme $(A_a, P_a)_a$ est

$$\langle A \rangle := \sum_a P_a A_a$$

Graphiquement, la valeur moyenne caractérise le barycentre de l'histogramme.

La **variance** de l'histogramme $(A_a, P_a)_a$ est :

$$(\Delta A)^2 := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (1.6.4)$$

$$= \sum_a P_a (A_a - \langle A \rangle)^2 \quad (1.6.5)$$

ΔA s'appelle **l'écart type** ou encore **l'incertitude** sur la valeur de A . Graphiquement, l'écart type ΔA (et la variance) caractérise la largeur de l'histogramme. Cette définition de "largeur" est naturelle car elle montre comment les valeurs A_a s'écartent du barycentre $\langle A \rangle$. On a pris la valeur moyenne des écarts au carré (au lieu des distances) pour des raisons de commodité.

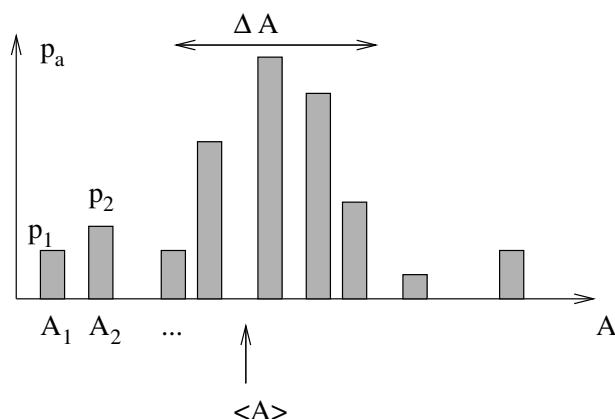


FIGURE 1.6.3 – Histogramme de valeurs A_1, A_2, \dots avec les poids respectifs P_1, P_2, \dots . Valeur moyenne $\langle A \rangle$ et écart type ΔA de l'histogramme.

Proposition 1.6.3. *on a les relations très utiles :*

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (1.6.6)$$

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \frac{\langle \phi | \hat{A}^2 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - \left(\frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right)^2 \end{aligned}$$

Ces écritures en terme de vecteur et d'opérateur, sont intéressantes car ne dépendent pas explicitement de la base.

Démonstration. On écrit

$$\begin{aligned} \frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} &= \left(\sum_a \langle \psi_a | \bar{\phi}_a \right) \hat{A} \left(\sum_{a'} \phi_{a'} | \psi_{a'} \rangle \right) / \langle \phi | \phi \rangle \\ &= \left(\sum_a A_a \bar{\phi}_a \phi_a \right) / \langle \phi | \phi \rangle = \sum_a P_a A_a \end{aligned}$$

Et

$$\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

□

Remarque (*) plus généralement, pour un histogramme ou distribution, on définit le **moment d'ordre n** par $M_n = \langle A^n \rangle$. Ici, $\langle A \rangle = M_1$, et $Var(A) = M_2 - M_1^2$.

Exercice Pour le paquet d'onde $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$ défini en (1.1.6) page 22, et les observables de position \hat{x} ou d'impulsion \hat{p} , montrer que :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int x P(x) dx = \int x |\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)|^2 dx = x_0$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int p P(p) dp = \int p |\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p)|^2 dp = p_0$$

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma$$

$$\Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{\sigma} \right)$$

Remarque : on a

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.6.7)$$

indépendant de σ .

$\langle x \rangle = x_0$ est donc la moyenne de la distribution $|\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)|^2$. Et $\Delta x = \sigma/\sqrt{2}$ est sa largeur.

$\langle p \rangle = p_0$ est donc la moyenne de la distribution $|\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p)|^2$. Et $\Delta p = (\hbar/\sigma)/\sqrt{2}$ est sa largeur.

Ce résultat est schématisé sur la figure 1.6.4.

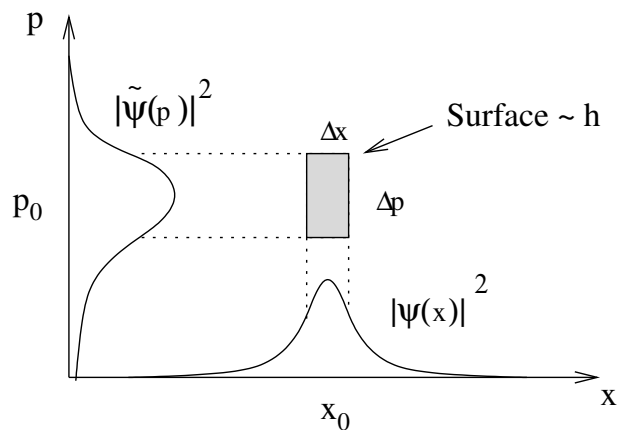


FIGURE 1.6.4 – Distribution de probabilité $|\psi(x)|^2$ et $|\tilde{\psi}(p)|^2$ pour le paquet d'onde. La relation $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ montre que le paquet d'onde “occupe” une surface $\simeq h$ dans l'espace de phase. Cela est formulé plus rigoureusement plus loin.

Exercice 1.6.4. Calculer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ et la largeur en énergie ΔE pour un paquet d'onde $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$ libre (cad avec le Hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$).

Exercice 1.6.5. (voir Cohen T. p.240)

Montrer que

$$\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

Déduire la conservation de l'énergie moyenne (et d'une manière plus directe).

Déduire le **théorème d'Erhenfest** pour $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \\ \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} &= - \left\langle \frac{dV}{dx}(\hat{x}) \right\rangle \end{aligned}$$

qui sont des relations très analogues aux équations de Hamilton classiques (dans ces dernières la deuxième relation serait plutôt $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\frac{dV}{dx}(\langle \hat{x} \rangle)$); cette différence apparemment minime est en fait cruciale et se manifeste dans les différences entre évolution quantique du paquet d'onde et l'évolution classique d'une distribution de Liouville observées numériquement au début du chapitre).

1.6.4 Relation d'incertitude et relations de commutation

Supposons maintenant la donnée d'un état quantique $|\phi\rangle$ et de deux opérateurs autoadjoints \hat{A} et \hat{B} .

Définition 1.6.6. Le **commutateur** de deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} est l'opérateur :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Proposition 1.6.7. Dans le cas des opérateurs \hat{x} et \hat{p} , on a

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I} \tag{1.6.8}$$

Démonstration. considérons une fonction $\phi(x)$ quelconque. On $(\hat{x}\hat{p}\phi)(x) = -i\hbar(x\frac{d\phi}{dx})$ et $(\hat{p}\hat{x}\phi)(x) = -i\hbar\frac{d(x\phi)}{dx} = -i\hbar\phi - i\hbar(x\frac{d\phi}{dx})$. Donc $([\hat{x}, \hat{p}]\phi)(x) = i\hbar\phi(x) = (i\hbar\hat{I})\phi(x)$. Cela étant vrai pour toute fonction ϕ , on déduit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{I}$. \square

Proposition 1.6.8. *La relation suivante montre plus généralement que pour deux opérateurs autoadjoints \hat{A}, \hat{B} , l'incertitude dans l'état $|\phi\rangle$ sont contraintes par la relation de commutation : (ref : Ballentine [L.E90] p.166)*

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|, \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.6.9)$$

Remarque : attention que bien que ce ne soit pas explicite, les expressions ΔA et $\langle \cdot \rangle$ dépendent de l'état $\phi \in \mathcal{H}$.

Démonstration. On considère un état $\phi \in \mathcal{H}$, $\|\phi\| = 1$, et pour simplifier, on suppose que $\langle \hat{A} \rangle = \langle \phi | \hat{A} \phi \rangle = 0$, et $\langle \hat{B} \rangle = 0$ (pour cela il suffit de retrancher la moyenne). Alors $\Delta A = \sqrt{\langle \phi | \hat{A}^2 \phi \rangle} = \sqrt{\langle \hat{A} \phi | \hat{A} \phi \rangle} = \|\hat{A} \phi\|$. On a

$$\begin{aligned} \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle &= i \left(\langle \phi | \hat{A} \hat{B} \phi \rangle - \langle \phi | \hat{B} \hat{A} \phi \rangle \right) = i \left(\langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle - \langle \hat{B} \phi | \hat{A} \phi \rangle \right) \\ &= i \left(\langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle - \overline{\langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle} \right) = -2\Im \left(\langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle \right) \end{aligned}$$

alors, utilisant l'inégalité de Schwartz⁹

$$\frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| = \left| \Im \left(\langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle \right) \right| \leq \left| \langle \hat{A} \phi | \hat{B} \phi \rangle \right| \leq \|\hat{A} \phi\| \|\hat{B} \phi\| = \Delta A \Delta B$$

□

Remarques :

- Dans le cas où $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, on verra (page 231) que les deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} ont des vecteurs propres en commun. Si $|\phi\rangle$ est un tel vecteur, alors $\Delta A = 0$, $\Delta B = 0$. Dans ce cas les deux termes de l'inégalité sont nuls.
- Dans le cas des opérateurs \hat{q}, \hat{p} , d'après (1.6.8), l'inégalité (1.6.9) devient l'**inégalité de Heisenberg** ou **relation d'incertitude** bien connue :

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (1.6.10)$$

Remarque que dans le cas du paquet d'onde Gaussien $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$, on a montré eq.(1.6.7), que cette inégalité est une égalité.

9. Pour deux vecteurs $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^n$ l'**inégalité de Schwartz** est $|\vec{u} \cdot \vec{v}| \leq \|\vec{u}\| \|\vec{v}\|$. De même pour deux vecteurs $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, $|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\|$.

1.7 Résumé du chapitre 1

Ce résumé sert au premier cours de Master 1, car on suppose ce premier chapitre comme étant connu, déjà étudié en L3.

Il est apparu dès le XIX^{ème} siècle que de nombreux phénomènes de la physique ne trouvaient pas d'explications avec la mécanique classique. De nouvelles idées apparaissent progressivement (« loi du corps noir » par Planck 1900, « effet photo électrique » par Einstein 1905) et en 1925 Schrödinger propose une « théorie ondulatoire » pour des « ondes de matière », que l'on appelle la **mécanique quantique**. Dans cette théorie, une particule élémentaire est modélisée par une **fonction d'onde** $\psi_t(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ qui est une fonction à valeur complexes sur l'espace $x \in \mathbb{R}^3$ qui évolue en temps $t \in \mathbb{R}$ selon l'**équation de Schrödinger**. Commençons par parler des fonctions d'ondes.

1.7.1 Fonction d'onde

On va décrire une **particule quantique** élémentaire qui se déplace à une dimension selon $x \in \mathbb{R}$.

Remarque importante :

- La “particule” peut être **soumise aux “influences extérieures”** (par exemple une force $F(x)$ associées à une énergie potentielle $V(x)$) mais on suppose que en retour, **elle n'influence pas son environnement**. Cela est le cas par exemple, d'une particule légère (un électron) et de son environnement qui serait des atomes lourds. Sinon, il est nécessaire de décrire aussi l'environnement dans le système quantique étudié.

L'état de la particule à l'instant t est décrit par une fonction appelée **fonction d'onde**

$$\psi : x \in \mathbb{R} \rightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}$$

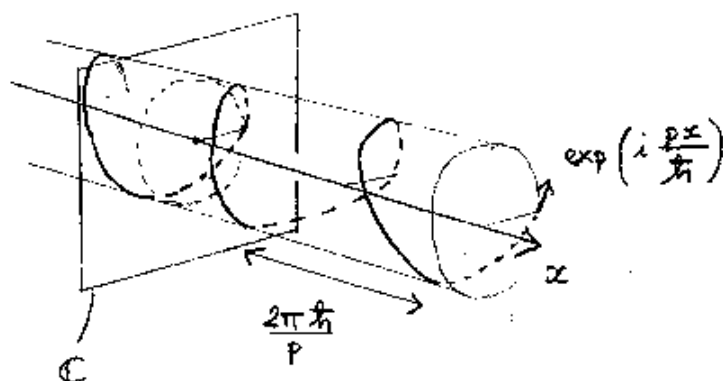
notée parfois $|\psi\rangle$ et appelé **ket** (notation de Dirac). En mathématiques, l'espace des fonctions $\psi \in C^\infty(\mathbb{R})$ est un **espace vectoriel** (on peut considérer la somme $\psi_1 + \psi_2$ et le produit externe $\lambda.\psi$ avec $\lambda \in \mathbb{C}$).

Exemple particuliers mais importants :

- Une **onde plane d'impulsion** $p \in \mathbb{R}$ est

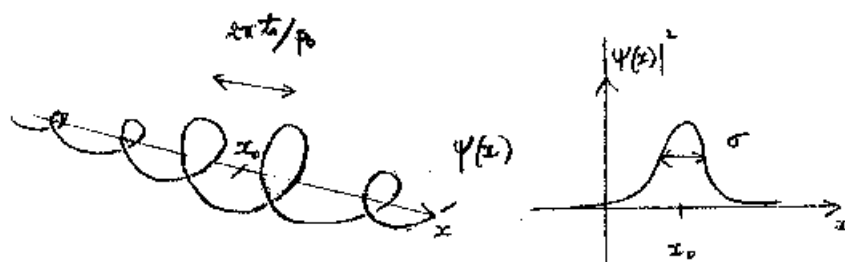
$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)$$

aussi notée $|p\rangle$, avec la **constante de Planck** $\hbar = \frac{h}{2\pi}, h = 6.626 \cdot 10^{-34} J.s$. Il est important de noter que la longueur d'onde (= période spatiale) de cette onde plane est $l = 2\pi\hbar/p$ qui est très petite à notre échelle.



- Un **paquet d'onde Gaussien** de position moyenne $x_0 \in \mathbb{R}$, d'impulsion moyenne $p_0 \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma > 0$, est :

$$\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$



Remarque : un paquet d'onde est "localisé" comme une particule. On parle aussi d'**état quasi-classique**.

Aspects mathématiques (Analyse) :

- Le **produit scalaire** entre deux fonctions d'ondes $\psi(x)$ et $\varphi(x)$ est

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \bar{\psi}(x) \varphi(x) dx$$

La **norme** de φ est

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \left(\int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

Par exemple $\|\psi_{x_0, p_0, \sigma}\| = 1$ et $\|\psi_p\| = \infty$ (norme infinie).

- L'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable est (la fermeture)

$$L^2(\mathbb{R}) := \overline{\{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}), \|\varphi\| < \infty\}}$$

On notera aussi

$$\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$$

l'espace de Hilbert des états quantiques. Si $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$, $\varphi \neq 0$, alors $\tilde{\varphi} = \frac{1}{\|\varphi\|}\varphi$ vérifie $\|\tilde{\varphi}\| = 1$. On dit qu'elle est **normalisée**.

- Avec la notation de Dirac, on note $\langle \psi |$ ou $\langle \psi | \cdot \rangle$, appelée **bra**, la forme linéaire :

$$\langle \psi | : \begin{cases} L^2(\mathbb{R}) & \rightarrow \mathbb{C} \\ \varphi & \rightarrow \langle \psi | \varphi \rangle \end{cases}$$

On appelle $\langle \psi |$ le **vecteur dual métrique** de $|\psi\rangle$. On peut penser que le vecteur dual ψ détecte des propriétés de φ (voir sens physique du produit scalaire ci-dessous).

- La **distribution de Dirac** en x ou l'**état de position** x , est la forme linéaire : $\delta_x : \psi \in C^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \delta_x(\psi) = \psi(x) \in \mathbb{C}$ qui donne la valeur de ψ en x . On note aussi $\langle x | \equiv \delta_x$ ainsi on peut écrire $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$. Son dual est $|x\rangle$. L'écriture suivante est abusive mais utile. $\delta_x(y) = \langle x | y \rangle = \delta(y - x)$. Ainsi les deux écritures suivantes sont équivalentes (la deuxième utilise la notation de Dirac) :

$$\psi(x) = \int \delta_x(y) \psi(y) dy \quad \Leftrightarrow \quad \langle x | \psi \rangle = \int \langle x | y \rangle \langle y | \psi \rangle dy$$

On peut penser que la distribution de Dirac est une fonction d'onde infiniment concentrée au point x et sans impulsion.

Le sens physique du produit scalaire deviendra clair lorsque nous rappellerons le postulat de la mesure. Rappelons déjà l'**inégalité de Cauchy-Schwartz** qui est la relation générale

$$|\langle \psi | \varphi \rangle| = (\cos \alpha) \|\psi\| \|\varphi\| \leq \|\psi\| \|\varphi\|$$

où $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$ est "l'angle" entre les états ψ et φ . On a donc

$$0 \leq \cos \alpha = \frac{|\langle \psi | \varphi \rangle|}{\|\psi\| \|\varphi\|} \leq 1$$

Signification physique de l'angle α :

- Si $\alpha \simeq \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow \frac{|\langle \psi | \varphi \rangle|}{\|\psi\| \|\varphi\|} \simeq 0$ alors ψ et φ décrivent **deux états physiques différents**.
- Si $\alpha \simeq 0 \Leftrightarrow \frac{|\langle \psi | \varphi \rangle|}{\|\psi\| \|\varphi\|} \simeq 1$ alors ψ et φ décrivent **deux états physiques semblables**.
On a alors $\psi \simeq \lambda \varphi$ où $\lambda \in \mathbb{C}$ est une constante ($\lambda = e^{i\theta}$ est une phase si les états sont normalisés).

Exercice : Voici des exemples de fonctions d'ondes, construites à partir du paquet d'onde $\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x)$ ci-dessus et différentes valeurs des paramètres x_0, p_0 .

- $\psi_1 = \psi_{0,0,\sigma}$ avec largeur $\sigma \ll 1$.
- $\psi_2 = -\psi_{0,0,\sigma}$.
- $\psi_3 = 2\psi_{0,0,\sigma}$.
- $\psi_4 = \psi_{0,p,\sigma}$ avec impulsion $p \gg \frac{\hbar}{\sigma}$.
- $\psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{0,0,\sigma} + \psi_{1,0,\sigma})$ avec $\sigma \ll 1$.
- $\psi_6 = \psi_{1,0,\sigma}$.
- $\psi_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_{0,0,\sigma} + \psi_{1,0,\sigma})$.

1. Tracer l'allure de ces fonctions d'ondes.
2. Dans la limite $\sigma \ll 1$ et $p \gg \frac{\hbar}{\sigma}$, calculer les produits scalaires $\langle \psi_i | \psi_j \rangle$ pour $i, j = 1 \dots 6$ et déduire les valeurs de $\cos \alpha_{i,j} = \frac{|\langle \psi_i | \psi_j \rangle|}{\|\psi_i\| \|\psi_j\|}$ qui mesure la différence entre les états quantiques.

1.7.2 Evolution d'un état quantique $\psi_t(x)$

1.7.2.1 Equation de Schrödinger

On suppose que la particule est soumise à une force

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}$$

où $V(x)$ est l'énergie potentielle (qui peut dépendre du temps : $V(x, t)$).

L'onde quantique évolue d'après **l'équation de Schrödinger** :

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar} \right) \psi(t)$$

avec

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \text{ opérateur Hamiltonien (énergie)}$$

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \text{ opérateur impulsion}$$

$$\hat{x} \text{ opérateur position}$$

donc $\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ et $(\hat{x}\psi)(x) = x\psi(x)$, $(V(\hat{x})\psi)(x) = V(x)\psi(x)$. L'équation de Schrödinger s'écrit donc de façon plus explicite comme une **équation linéaire aux dérivées partielles (E.D.P.)** :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad : \forall x, t$$

Remarques :

- Le fait que l'équation de Schrödinger est linéaire s'appelle le **principe de superposition**. La conséquence est que si $\psi_1(x, t)$, $\psi_2(x, t)$ sont solutions alors $(\psi_1 + \psi_2)(x, t)$ et $\lambda \cdot \psi_1(x, t)$ sont aussi solutions. La manifestation physique sont les **phénomènes d'interférences**.
- Un résultat fondamental (qui a un statut mathématique) est qu'un paquet d'onde Gaussien $\psi_{x_0, p_0, \sigma}$ évoluant d'après l'équation de Schrödinger est proche à tout instant t d'un paquet d'onde $\psi_{x(t), p(t), \sigma(t)}$ avec $x(t), p(t)$ régit par les équations de mouvement de Hamilton de la mécanique classique :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

Plus précisément, cela est vrai approximativement pour t fixé et dans la limite de \hbar petit (i.e. petite longueur d'onde) par rapport aux unités physique du problème (respect. taille du système). Pour les temps plus longs le paquet d'onde se disperse. Cette approximation est donc d'autant plus valable que l'on observe les ondes à grande échelle (par rapport aux échelles atomiques où $\hbar \simeq 1$). En physique, la petite valeur de $h = 6.626 \cdot 10^{-34} J.s$ à l'échelle humaine explique qu'il ait fallu attendre le XXème siècle pour découvrir les effets subtils de la mécanique quantique qui se manifestent à l'échelle des atomes¹⁰.

- Le fait d'obtenir l'opérateur Hamiltonien \hat{H} en substituant les variables x, p dans le Hamiltonien classique (0.1.4) par les opérateurs \hat{x}, \hat{p} s'appelle le **principe de correspondance**. La remarque précédente explique ce principe. On en discutera encore en Section 1.7.2.3.
- (*) Voir videos d'évolutions d'ondes quantiques sur la page web [Faub].

1.7.2.2 Ondes stationnaires

Une **onde stationnaire** est un état particulier, c'est un vecteur propre de \hat{H} :

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad E \in \mathbb{R} \text{ énergie} \quad (1.7.1)$$

qui s'appelle l'**équation de Schrödinger stationnaire**.

L'évolution de ψ est donc :

$$\frac{d\psi}{dt}(x, t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{H}\psi = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) E\psi(x, t)$$

donnant

$$\psi(x, t) = \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{\text{phase}} \psi(0, t)$$

10.

— En mathématique cette correspondance classique-quantique s'appelle l' « **analyse semi-classique** » ou « **analyse micro-locale** » [Zwo12, Tay96b, chap.7].

Par conséquent le module $|\psi(x, t)| = |\psi(x, 0)|$ ne bouge pas (d'où le nom d'onde stationnaire).

L'ensemble des valeurs propres E_e , $e = 1, \dots, \infty$ s'appelle les **niveaux d'énergie**. Les états d'énergie, vecteurs propres ou ondes stationnaires associées sont notées ψ_e .

Bien que les vecteurs propres (ondes stationnaires) soient des états très particuliers, ils ont une importance en physique car :

- l'état stationnaire de plus basse énergie $\psi_{e=1}$, appelé **état fondamental**, apparaît à basse température à cause des phénomènes de relaxation thermique.
- Dans les expériences de spectroscopie, on excite un atome ou une molécule avec un rayonnement monochromatique, le faisant transiter par effet de résonance vers un état stationnaire ψ_e d'énergie plus élevée.

Dans le cas d'un électron gravitant autour d'un proton (atome d'Hydrogène, voir (??)), on peut calculer les valeurs propres de \hat{H} qui sont négatives et prennent des valeurs discrètes[BC89] :

$$E_n = -\mathcal{R} \frac{1}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*, \quad (1.7.2)$$

avec la constante de Rydberg $\mathcal{R} = \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2$ et la constante de structure fine $\alpha = \frac{k_e e^2}{\hbar c}$. Historiquement ce spectre discret a permis d'expliquer les raies de fluorescence des atomes, observées dès 1752 par T. Melvill. Voir figure 1.7.1.

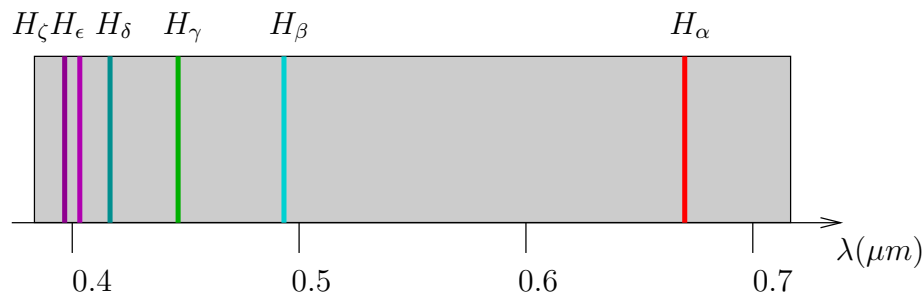


FIGURE 1.7.1 – On éclaire un gaz d'hydrogène avec un laser pour lui fournir de l'énergie. Les électrons des atomes réémettent l'énergie $h\nu$ sous forme lumineuse (appelée fluorescence) après une transition entre des niveaux d'énergie $E_n \rightarrow E_m$, avec $E_m < E_n$. Par exemple les raies de Balmer (1885), notées H_α, H_β, \dots , ont des longueurs d'ondes λ_n dans le visible données par $h\nu_n = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_n} = E_n - E_2$, $n \geq 3$ avec E_n données par (1.7.2).

Modèle très simple : c'est celui à une dimension $d = 1$ d'une particule libre dans l'intervalle $x \in [0, L]$. On a $H(x, p) = \frac{1}{2m}p^2$, $\hat{H} = -\frac{1}{2m}\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$ et (1.7.1) s'écrit $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$ avec les conditions aux bords $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Les ondes stationnaires sont donc $\psi_n(x) = \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$, $n \geq 1$ et les niveaux d'énergie sont $E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$.

1.7.2.3 Explication du principe de correspondance sur un modèle simple

On considère dans cette Section la position dans l'espace $x \in \mathbb{R}^d$. Considérons la fonction de Hamilton classique linéaire suivante¹¹

$$H(x, p) = v \cdot p + w \cdot (-x) \quad (1.7.3)$$

avec $\mathcal{V} = (v, w) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^{2d}$ fixé. Les équations de Hamilton (0.1.5) donnent alors

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = v, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = w$$

qui signifient que le point $(x(t), p(t))$ se déplace à vitesse constante $\mathcal{V} = (v, w)$ sur l'espace des phases. Voir figure 1.7.2.

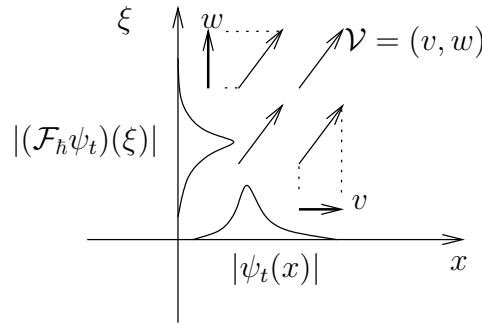


FIGURE 1.7.2 – Champ de vecteurs de Hamilton $\mathcal{V} = (v, w)$ du modèle simple (1.7.3). On montre qu'avec l'équation de Schrödinger, une onde (respect. sa T.F.) se déplace aussi à la vitesse v en x (respect. w en p).

Au niveau de la mécanique quantique, avec le principe de correspondance on obtient l'opérateur :

$$\hat{H} = v \cdot \hat{p} + w \cdot (-\hat{x}) \quad (1.7.4)$$

et l'équation de Schrödinger (??) peut se résoudre pour donner explicitement pour toute fonction $\psi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ ¹² :

$$\psi_t(x) = (e^{-it\text{Op}_h(H)/\hbar} \psi_0)(x) = e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar} \psi_0(x - vt) \quad (1.7.5)$$

ainsi la fonction

$$|\psi_t|(x) = |\psi_0(x - vt)|$$

11. Attention ce modèle ne correspond pas directement à un modèle de physique. Il peut cependant être considéré (par linéarisation) comme le comportement local d'une fonction $H(x, p)$ quelconque.

12. En effet $i\hbar \frac{d\psi_t}{dt} = -w(x - vt) \psi_t(x) + i\hbar(-v) e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar} (\partial_x \psi_0) = \hat{H} \psi_t$ et car $\partial_x \psi_t = i \frac{wt}{\hbar} \psi_t + e^{iw(xt - \frac{1}{2}vt^2)/\hbar} \partial_x \psi_0$

se déplace à la vitesse v selon x , comme en mécanique classique. Voir figure 1.7.2. Ensuite, pour comprendre l'effet de w , considérons la \hbar -transformée de Fourier¹³ de ψ_t :

$$(\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p) := \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ipx/\hbar} \psi_t(x) dx.$$

Eq. (1.7.5) donne :

$$(\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p) = e^{-iv(pt - \frac{1}{2}wt^2)/\hbar} (\mathcal{F}_\hbar \psi_0)(p - wt) \quad (1.7.6)$$

qui montre que la fonction

$$|\mathcal{F}_\hbar \psi_t|(p) = |(\mathcal{F}_\hbar \psi_0)(p - wt)|$$

se déplace à la vitesse w selon p . Voir figure 1.7.2.

Ce petit modèle justifie à posteriori le principe de correspondance car avec le Hamiltonien (1.7.3), l'onde se déplace comme une particule avec la vitesse $\mathcal{V} = (v, w)$ sur l'espace des phases (en fait vitesse v en x et vitesse w en p après transformée de Fourier). De plus il montre la signification de l'impulsion p : elle intervient dans l'expression $e^{-ipx/\hbar} = e^{-i\omega_x x}$ et on peut donc dire que $\omega_x = \frac{1}{\hbar}p$ est une fréquence spatiale¹⁴. Pour un Hamiltonien quelconque $H(x, p)$, le champ de vecteur \mathcal{V} n'est pas uniforme mais l'idée du calcul semiclassique est de montrer que dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, on peut considérer que \mathcal{V} est « localement constant » dans l'espace de phase (x, p) (on dit « microlocalement »), on se ramène à ce modèle simple où le principe de correspondance est valide. Dans le calcul semiclassique, on calcule les corrections à cette approximation sous la forme d'un développement en \hbar .

1.7.3 Signification probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x)$

1.7.3.1 L'expérience des doubles fentes de Young

Voir figure 1.7.3. Il s'agit d'une expérience les plus intrigante de mécanique quantique mettant en valeur la **dualité onde-corpuscule**, très simple en principe mais suscitant des questions d'interprétation qui n'ont pas vraiment de réponse. En rapport avec cette expérience qu'il commente dans son chapitre 1, Richard Feynmann [Fey63] (physicien notoire dans l'élaboration de la mécanique quantique) a écrit « Personne ne comprends la mécanique quantique ».

Les résultats de cette expérience est « expliquée » par le « postulat de la mesure ».

1.7.3.2 Le postulat de la mesure

Dans cette Section on considère une particule dans l'espace \mathbb{R}^3 . La fonction d'onde $\psi(x)$ a une signification probabiliste : si une même expérience est répétée un grand nombre de

13. Inversement $\psi_t(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx/\hbar} (\mathcal{F}_\hbar \psi_t)(p) dp$.

14. en langage de la géométrie différentielle, l'impulsion p est un vecteur cotangent

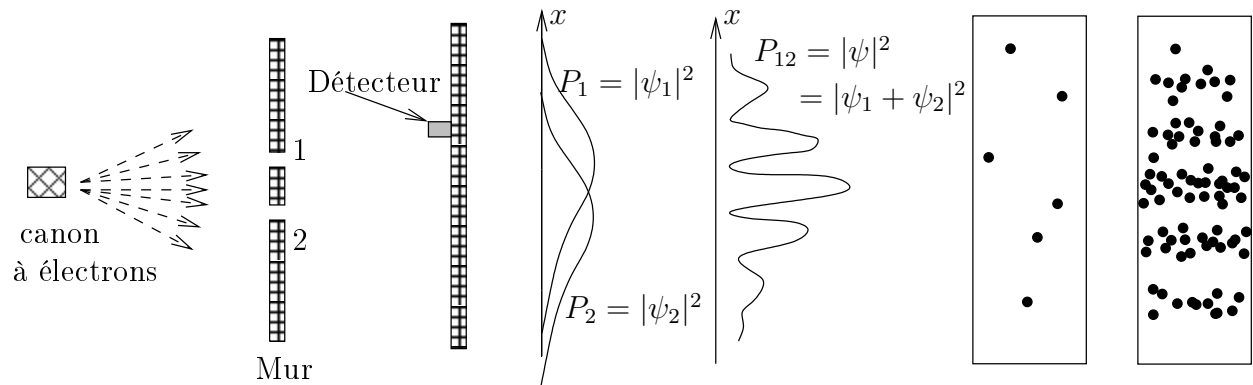


FIGURE 1.7.3 – Schéma d’une expérience faite en 2012 [BPLB13], interférences et détection de l’onde quantique d’un électron après le passage dans une double fente. Après un petit nombre de détections les résultats semblent aléatoires, mais après un grand nombre d’expériences identiques on observe la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ prédit par la théorie quantique. Voir video des impacts sur la page web du journal.

fois et produit une particule toujours dans le même état décrit par la fonction $\psi(x)$ alors cela signifie que la probabilité de détecter expérimentalement la particule dans le domaine $U \subset \mathbb{R}^3$ de l’espace est :

$$P(U) = \frac{1}{\|\psi\|} \int_U |\psi(x)|^2 dx, \quad (1.7.7)$$

avec la constante de normalisation $\|\psi\| := (\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx)^{1/2}$. Autrement dit la densité de probabilité est $\frac{1}{\|\psi\|} |\psi(x)|^2 dx$. Noter que grâce au préfacteur $\frac{1}{\|\psi\|}$, et comme attendu, la probabilité sur tout l’espace est $P(\mathbb{R}^3) = 1$. Notons aussi que le résultat $P(U)$ est inchangé si on modifie $\psi \rightarrow \lambda\psi$ avec $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Cette invariance est aussi vraie pour l’équation d’évolution (??) qui est linéaire. Donc il est plus pratique de supposer que les fonctions d’ondes sont normalisées c’est à dire $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$, ce que l’on fera dans la suite.

Ce résultat (1.7.7) étonnant (appelé **postulat de la mesure**) montre que pour une unique expérience, la théorie quantique ne prédit rien. Elle ne peut prédire que des moyennes sur des grands nombres. En physique, on parle de « hasard quantique intrinsèque ». Par exemple la position moyenne de la particule $\langle x \rangle \in \mathbb{R}^3$ est donnée par

$$\langle x \rangle := \int x |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | x \psi \rangle \quad (1.7.8)$$

Dans ce principe de la mesure il est aussi postulé que après une mesure où la particule a été détectée dans un domaine $U \subset \mathbb{R}^3$, alors la nouvelle fonction d’onde est supportée sur U . Cela s’appelle le « **collapse de la fonction d’onde** » ou « **réduction du paquet d’onde** ».

La relation (1.7.8) est en fait plus générale. Par exemple pour une mesure de l’énergie,

la **valeur moyenne** prédite est donnée par

$$\langle H \rangle = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle$$

et il est postulé en physique que cela est valable pour toutes les « **observables** ». Ce postulat de la mesure est en accord remarquable avec tous les expériences de physique menées jusqu'à ce jour.

Nous allons énoncé dans la Section 1.7.3.4 le postulat de la mesure de façon plus générale (et plus abstraite). Avant cela nous rappelons quelques aspects d'algèbre linéaire (mathématiques).

1.7.3.3 Rappel d'algèbre linéaire. Spectre d'opérateurs. (Analyse fonctionnelle).

Considérons un opérateur linéaire $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. L'opérateur adjoint \hat{A}^+ est défini par la relation $\langle \varphi | \hat{A}^+ \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi | \psi \rangle$ pour tous $\psi, \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. On dit que \hat{A} est autoadjoint si $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Par exemple les opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ sont auto-adjoints. Pour simplifier on considère des opérateurs autoadjoints.

On considère les vecteurs propres ψ_a et valeurs propres $A_a \in \mathbb{R}$ de l'opérateur \hat{A} :

$$\hat{A} \psi_a = A_a \psi_a$$

où $a = 1, 2, \dots$ sont des indices.

Les valeurs propres A_a sont réelles et que les vecteurs propres ψ_a forment une base orthogonale de l'espace des états \mathcal{H} .

Démonstration. On écrit

$$\langle \psi_a | \hat{A} \psi_b \rangle = A_b \langle \psi_a | \psi_b \rangle = \langle \hat{A}^+ \psi_a | \psi_b \rangle = \overline{\langle \psi_b | \hat{A} \psi_a \rangle} = \overline{A_a \langle \psi_b | \psi_a \rangle} = \overline{A_a} \langle \psi_a | \psi_b \rangle$$

En faisant $a = b$ on déduit que $A_a = \overline{A_a}$ donc $A_a \in \mathbb{R}$, valeurs propres réelles. En supposant $A_a \neq A_b$ on déduit que $(A_b - A_a) \langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0$ et $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0$ cad vecteurs propres orthogonaux. \square

On peut classer les valeurs propres par ordre croissant $A_1 \leq A_2 \leq \dots$. Attention, on peut avoir des valeurs propres répétées $A_a = A_{a+1}$, appelées **dégénérescences**. Plus précisément, pour une valeur propres $A \in \mathbb{R}$ donnée, on note $\mathcal{E}_A := \{ \psi \in \mathcal{H}, \hat{A} \psi = A \psi \}$ l'**espace propre** associé. $\dim(\mathcal{E}_A) \geq 1$ est le degré de dégénérescence. Les espaces propres $(\mathcal{E}_A)_A$ sont orthogonaux entre eux. Dans un espace propre donné \mathcal{E}_A on choisit les vecteurs propres $(\psi_a)_a$ comme formant une base orthogonale de \mathcal{E}_A .

À une valeur propre donnée A , on associe le projecteur spectral $\hat{\mathcal{P}}_A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{E}_A$. On a les expressions utiles suivantes pour le projecteur spectral :

$$\hat{\mathcal{P}}_A = \sum_{i.t.q.A_i=A} \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}$$

Pour l'opérateur \hat{A} :

$$\hat{A} = \sum_A A \hat{\mathcal{P}}_A$$

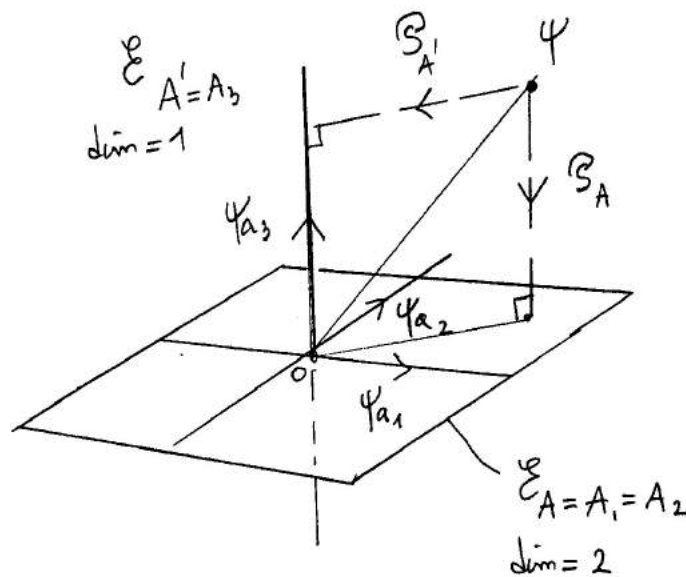
et pour l'opérateur identité :

$$\text{Id} = \sum_A \hat{\mathcal{P}}_A$$

appelée **relation de fermeture**.

Démonstration. Il suffit de les vérifier sur les vecteurs propres car ils forment une base orthogonales : $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{a,b} \langle \psi_a | \psi_a \rangle$. Considérons un vecteur propre ψ_b de \hat{A} . On a vu que si $A_i = A \neq A_b$ alors $\langle \psi_i | \psi_b \rangle = 0$ donc $\hat{\mathcal{P}}_A \psi_b = 0$. Au contraire si $A_b = A$ alors $\hat{\mathcal{P}}_A \psi_b = \frac{|\psi_b\rangle\langle\psi_b|\psi_b\rangle}{\langle\psi_b|\psi_b\rangle} = \psi_b$. C'est bien la définition du projecteur orthogonal sur \mathcal{E}_A .

De même, $(\sum_A A \hat{\mathcal{P}}_A) \psi_b = A_b \hat{\mathcal{P}}_{A_b} \psi_b = A_b \psi_b = \hat{A} \psi_b$ donc $\hat{A} = \sum_A A \hat{\mathcal{P}}_A$. Et finalement $(\sum_A \hat{\mathcal{P}}_A) \psi_b = \hat{\mathcal{P}}_{A_b} \psi_b = \psi_b$ donc $\text{Id} = \sum_A \hat{\mathcal{P}}_A$. \square



Il est important de savoir qu'un projecteur orthogonal $\hat{\mathcal{P}}$ est caractérisé par les relations $\hat{\mathcal{P}}^2 = \hat{\mathcal{P}}$ et $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}$, voir [Fau10b].

- Dans le cas simple où la valeur propre A est non dégénérée et le vecteur propre est normalisé, $\|\psi_a\| = 1$, alors on a l'expression plus simple :

$$\hat{\mathcal{P}}_A = |\psi_a\rangle\langle\psi_a|$$

- Par exemples
 - pour l'opérateur Hamiltonien (énergie) on a

$$\hat{H} = \sum_{e=1}^{\infty} E_e |\psi_e\rangle \langle \psi_e|$$

et

$$\text{Id} = \sum_e |\psi_e\rangle \langle \psi_e|$$

- L'opérateur de position a un spectre continu car ses “valeurs propres” sont $x \in \mathbb{R}$. Pour appliquer les relations présentées ici, il faut considérer un intervalle $[x, x + dx]$ et le projecteur spectral associé s'écrit $\mathcal{P}_{[x, x+dx]} = \int_x^{x+dx} |x'\rangle \langle x'| dx'$. Pour l'opérateur position on a alors

$$\hat{x} = \int_{\mathbb{R}} x |x\rangle \langle x| dx$$

et

$$\text{Id} = \int |x\rangle \langle x| dx$$

- De même, pour l'opérateur impulsion, on a

$$\hat{p} = \int_{\mathbb{R}} p |p\rangle \langle p| dp$$

et

$$\text{Id} = \int |p\rangle \langle p| dp$$

1.7.3.4 Mesure d'un état quantique

- Si la particule interagit et influence son environnement, alors l'équation de Schrödinger ci-dessus n'est pas valable.
- On dit que cet environnement est un “**détecteur**” si il “mesure” une grandeur physique particulière A appelée **observable** (ex : position x de la particule, impulsion p , énergie H , etc..). Voici comment décrire la mesure dans un cas idéal.
 - Un opérateur autoadjoint \hat{A} (comme discuté ci-dessus) est associé à l'observable A . On considère ses vecteurs propres ψ_a et ses valeurs propres A_a définies par :

$$\hat{A}\psi_a = A_a\psi_a$$

où $a = 1, 2, \dots$ sont des indices. (Dans le cas d'une mesure de position, penser par exemple que $a = 1, 2, \dots$ numérote des détecteurs alignés sur l'axe x , et que $A_a = x_a \in \mathbb{R}$ est la position du détecteur a .)

Postulat de la mesure :

- Si la particule est dans un état initial ϕ et interagit avec le détecteur alors le **résultat de la mesure sera une des valeurs propres** A_1, A_2, \dots . Après une seule expérience il est impossible de savoir quelle valeur est obtenue, c'est le **"hasard quantique"**.
- Mais si on répète un grand nombre de fois la même expérience (cad avec le même état initial ϕ , même détecteur, même observable) alors la valeur A apparaît avec la **probabilité**¹⁵ :

$$\text{Proba}(A) = \frac{\|\hat{\mathcal{P}}_A \phi\|^2}{\|\phi\|^2} = \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

On vérifie¹⁶ que $\sum_A \text{Proba}(A) = 1$.

Remarques :

- dans le cas simple où la valeur propre A est non dégénérée et les états sont normalisés, cad $\|\psi_a\| = 1$, $\|\phi\| = 1$, alors on a l'expression simple :

$$\text{Proba}(A) = \langle \phi | \underbrace{\psi_a}_{\hat{\mathcal{P}}_A} \rangle \langle \psi_a | \phi \rangle = |\langle \psi_a | \phi \rangle|^2$$

- Si les résultats expérimentaux après N mesures sont a_1, a_2, \dots, a_N , la **moyenne expérimentale** est $\langle a \rangle_N := \frac{1}{N} (a_1 + a_2 + \dots + a_N)$. Pour $N \rightarrow \infty$ la théorie quantique prédit qu'elle converge vers une valeur précise

$$\langle a \rangle_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \langle A \rangle$$

qui est la **moyenne statistique** donnée par (on utilise la relation de fermeture) :

$$\langle A \rangle := \sum_A A \cdot \text{Proba}(A) = \sum_A A \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\langle \phi | \hat{A} \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

- **Juste après la mesure**, si la particule n'a pas été détruite, elle est alors dans l'état

$$\phi' = \hat{\mathcal{P}}_A \phi$$

qui est donc un vecteur propre de \hat{A} : $\hat{A} \phi' = A \phi'$. Ce phénomène s'appelle aussi la **réduction du paquet d'onde** ou le **collapse de la fonction d'onde**.

Par exemple si on mesure la position de la particule, l'observable est l'opérateur position \hat{x} et (supposant l'état initial normalisé $\|\psi\| = 1$)

$$\text{Proba}(x \in [x, x + dx]) = \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}_{[x, x+dx]} \psi \rangle = \int_x^{x+dx} |\langle x' | \psi \rangle|^2 dx' \underset{dx \rightarrow 0}{=} |\langle x | \psi \rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$$

On dit que $|\psi(x)|^2$ est la **densité de probabilité** en position.

15. la dernière égalité vient de ce que $\hat{\mathcal{P}}_A$ est un projecteur orthogonal vérifiant $\hat{\mathcal{P}}_A^2 = \hat{\mathcal{P}}_A$ et $\hat{\mathcal{P}}_A^\dagger = \hat{\mathcal{P}}_A$ donc : $\frac{\|\hat{\mathcal{P}}_A \phi\|^2}{\|\phi\|^2} = \frac{\langle \hat{\mathcal{P}}_A \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$.

16. Preuve : avec la relation de fermeture, $\sum_A \text{Proba}(A) = \sum_A \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\langle \phi | \sum_A \hat{\mathcal{P}}_A \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\langle \phi | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 1$

Remarque 1.7.1. Une particule quantique qui se déplace dans un milieu pas parfaitement vide est localisée sans cesse par le phénomène de réduction. Cela lui donne l'aspect d'une particule classique localisée qui se déplace .

1.8 Conseils de Lecture

- Cohen-Tannoudji [CBF], chapitres I,II,III
- Cours de Feynmann [Fey63], chapitres 1,2,3,8,20.

Pour approfondir :

- **Pour approfondir les problèmes de décohérence et de mesure quantique :**
 - Cours de C. Cohen Tanoudji du collège de France, (à télécharger sur le web!) :[Cla88]
 - Très bon cours de Joos dans : [DEC⁺96]
 - Cours de S. Haroche du collège de france [Har02].
- **Pour approfondir les aspects mathématiques,**
 - Mathématiques générales : [YCB82]
 - Livre de mathématiques sur l'analyse fonctionnelle : Reed & Simon [RS72].
 - Pour plus de précisions sur la théorie mathématique des opérateurs linéaires non bornés :[RS72] chapitre VIII.
 - Sur la théorie des distributions : [Tay96a],[Sch66], ou [CB73].
 - Mathématiques pour la mécanique quantique : [SI00].

Chapitre 2

Une particule quantique sans spin à 1 dimension (II)

Dans cette deuxième partie toujours consacrée à la description d'une particule isolée, à une dimension (et sans spin), on développe l'aspect algébrique, et on montre en particulier l'utilité de la théorie des groupes à travers la résolution du spectre de l'oscillateur harmonique.

2.1 Interprétation des opérateurs \hat{x} , \hat{p} , \hat{H} comme générateurs

2.1.1 \hat{H} génère les translations dans le temps

2.1.1.1 L'opérateur d'évolution : le propagateur

L'équation d'évolution de Schrödinger (1.3.1) page 30 donne la modification instantanée $\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\hat{H}|\phi(t)\rangle$ de l'état quantique. Étant donné un état initial $|\phi(0)\rangle$ à l'instant $t = 0$, nous allons voir qu'il est possible d'avoir l'expression de l'état $|\phi(t)\rangle$ après une durée finie t d'évolution.

Proposition 2.1.1. *L'équation d'évolution de Schrödinger (1.3.1) page 30 donne la modification instantanée d'un état quantique à chaque instant*

$$\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\hat{H}|\phi(t)\rangle \quad (2.1.1)$$

On dit que \hat{H} est un **générateur**. Étant donné un état initial $|\phi(0)\rangle$ à l'instant $t = 0$, son état $|\phi(t)\rangle$ à un autre instant t est donné par

$$|\phi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\phi(0)\rangle \quad (2.1.2)$$

où l'opérateur $\hat{U}(t)$, appelé **propagateur** ou **opérateur d'évolution** ou encore **opérateur de translation dans le temps** est solution de l'équation :

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\right)\hat{U}(t), \quad \hat{U}(0) = \hat{I} \quad (2.1.3)$$

Si $\hat{H}(t)$ est indépendant du temps, alors cette équation admet une solution unique que l'on note :

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)^n \quad (2.1.4)$$

Démonstration. Supposons eq.(2.1.4). Vérifions que $|\phi(t)\rangle$ défini par (2.1.2) satisfait l'équation de Schrödinger (dont la solution est unique) :

$$d|\phi(t)\rangle/dt = \frac{d\hat{U}}{dt}|\phi(0)\rangle = \left(-i\hat{H}/\hbar\right)\hat{U}(t)|\phi(0)\rangle = \left(-i\hat{H}/\hbar\right)|\phi(t)\rangle$$

□

Remarque (*) : la série (2.1.4) sert de définition à la notion d'exponentielle d'opérateur, mais n'est pas convergente si \hat{H} n'est pas un opérateur borné. Or $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ n'est pas borné car l'énergie peut être arbitrairement grande. Si \hat{H} est une matrice, (ou opérateur de rang fini), il n'y a pas de problème. Dans ce cours, on se permettra d'utiliser l'expression (2.1.4), bien que ce ne soit pas justifié a priori. Pour plus d'informations mathématiques sur l'équation (2.1.3), consulter un ouvrage sur "la théorie des semi-groupes", par exemple celui Pazy [Paz83] ou Engel et Nagel [EN06, EN99].

Proposition 2.1.2. Si \hat{H} est autoadjoint (c'est à dire $\hat{H}^+ = \hat{H}$) alors $\hat{U}(t)$ est **unitaire** c'est à dire l'on a les relations suivantes (qui sont équivalentes) :

$$\begin{aligned} (1) \forall \varphi, \left\| \hat{U}(t) \varphi \right\| &= \|\varphi\| \quad \text{norme conservée} \\ (2) \forall \varphi, \psi, \langle \hat{U}(t) \psi | \hat{U}(t) \varphi \rangle &= \langle \psi | \varphi \rangle \quad \text{:produit scalaire conservé} \\ (3) \left(\hat{U}(t) \right)^+ &= \left(\hat{U}(t) \right)^{-1} = \hat{U}(-t) \end{aligned}$$

Démonstration. Supposons que $\hat{H}^+ = \hat{H}$. Alors

$$\begin{aligned} \hat{U}^+(t) &= \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right)^+ = \exp\left(i\hat{H}^+t/\hbar\right) = \exp\left(i\hat{H}t/\hbar\right) \\ &= \exp\left(-i\hat{H}(-t)/\hbar\right) = \hat{U}(-t) \end{aligned}$$

$$\hat{U}^+(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(-t)\hat{U}(t) = \exp\left(i\hat{H}t/\hbar\right)\exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right) = \hat{I}$$

donc $\left(\hat{U}(t)\right)^+ = \hat{U}(-t) = \left(\hat{U}(t)\right)^{-1}$. On a montré (3). Ensuite on a

$$\begin{aligned} (2) : \forall \psi, \varphi, \langle \hat{U}(t) \psi | \hat{U}(t) \varphi \rangle &= \langle \psi | \left(\hat{U}(t)\right)^+ \hat{U}(t) \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle \\ &\Leftrightarrow \hat{U}^+(t)\hat{U}(t) = \hat{I} \end{aligned}$$

donc on a obtenu (3) \Leftrightarrow (2). Et Finalement (2) implique (1) car $\left\| \hat{U}(t) \varphi \right\|^2 = \langle \hat{U}(t) \varphi | \hat{U}(t) \varphi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle = \|\varphi\|^2$.

(*) Finalement pour montrer que (1) \Rightarrow (2), On utilise $\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \phi | \phi \rangle + 2\Re(\langle \psi | \phi \rangle)$ donnant $\langle \psi + i\phi | \psi + i\phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \phi | \phi \rangle - 2\Im(\langle \psi | \phi \rangle)$ et donc :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \Re(\langle \psi | \phi \rangle) + i\Im(\langle \psi | \phi \rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle + (i-1)\langle \psi | \psi \rangle + (i-1)\langle \phi | \phi \rangle - i\langle \psi + i\phi | \psi + i\phi \rangle) \end{aligned}$$

Cette dernière expression de $\langle \psi | \phi \rangle$ appelée **relation de polarisation**, ne fait intervenir que des produits scalaires de la forme $\langle \varphi | \varphi \rangle = \|\varphi\|^2$. (1) suppose que cette norme est conservée par l'action de \hat{U} . On déduit que $\langle \psi | \phi \rangle$ est aussi conservé, soit (2). □

◦ **Exercice** (TD) : retrouver l'eq.(1.5.12) à partir de eq.(1.5.11) et (2.1.2).

Remarque (*)

◦ L'équivalent en géométrie euclidienne (espace vectoriel réel) sont les transformations orthogonales (par exemples les rotations) qui conservent le produit scalaire euclidien.

2.1.1.2 Le groupe d'évolution des états quantiques dans le temps

Les opérateurs d'évolution $\hat{U}(t)$ dépendent du paramètre continu $t \in \mathbb{R}$. Ils forment donc un ensemble d'opérateurs unitaires, vérifiant les 3 propriétés suivantes :

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2) \quad : \text{loi de composition} \quad (2.1.5)$$

$$\hat{U}(0) = I \quad : \text{élément neutre} \quad (2.1.6)$$

$$\left(\hat{U}(t)\right)^{-1} = \hat{U}(-t) \quad : \text{inverse} \quad (2.1.7)$$

Pour cela on dit qu'ils forment un **groupe de Lie de dimension 1** d'opérateurs unitaires.

Le terme "groupe" est lié aux 3 propriétés, et le terme "Lie de dimension 1" vient du fait qu'ils dépendent continuellement d'un paramètre : t .

Dans le cas présent c'est le groupe d'évolution dans le temps.

On dit que $\hat{U}(t)$ est un **élément du groupe** (c'est ici un opérateur unitaire) et que \hat{H} est le **générateur du groupe** (c'est un opérateur auto-adjoint). Les trois expressions équivalentes (2.1.1),(2.1.3),(2.1.4) montrent la relation entre le générateur \hat{H} et l'élément du groupe $\hat{U}(t)$.

La notion de groupe peut paraître un peu abstraite ou inutile ici, mais nous rencontrerons d'autres exemples moins simples de groupes dans la suite, où ces mêmes relations apparaissent et cette notion a finalement une extrême importance en mécanique quantique.

Exercice (*Autre exemples de Groupes de Lie*) (*)

1. Montrer que les translation d'un point sur la droite (\mathbb{R}), (respectivement le plan (\mathbb{R}^2), et l'espace \mathbb{R}^3) est un groupe de Lie de dimension 1 (respect. 2 et 3). Remarquer que le groupe d'évolution dans le temps ci-dessus est isomorphe au groupe de translation sur la droite.
2. Montrer que les matrices de rotations conservant l'orientation dans le plan \mathbb{R}^2 forment un groupe de Lie de dimension 1. Ce groupe de matrices est noté $SO(2)$.
3. Montrer que les matrices de rotations conservant l'orientation dans l'espace \mathbb{R}^3 forment un groupe de Lie de dimension 3. Ce groupe de matrices est noté $SO(3)$. (Rappel : il faut trois angles d'Euler pour spécifier une rotation).

Remarque : Nous avons **deux points de vue sur l'opérateur auto-adjoint \hat{H}** :

1. dans ce paragraphe (et aussi d'après l'équation de Schrödinger), il est interprété comme un **générateur d'évolution**.
2. Dans le paragraphe sur l'opération de mesure, il est interprété comme une **observable** possible de la grandeur énergie.

Ce double aspect est valable pour tout opérateur auto-adjoint.

Développement limité (*) : Si $t \ll 1$, le développement limité au premier ordre de (l'exponentielle) $\hat{U}(t)$ est :

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t\right) = \hat{I} - \frac{i\hat{H}}{\hbar}t + o(t)$$

Cette expression montre le rôle de \hat{H} dans l'expression de $\hat{U}(t)$ comme **transformation infinitésimale**.

2.1.1.3 Relation d'incertitude temps-énergie

Considérons un état quelconque $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ normalisé, et son évolution $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$. Si $|\psi\rangle$ est état propre de \hat{H} , alors c'est un état stationnaire car il vérifie $|\langle\psi(t)|\psi(0)\rangle| = 1, \forall t$, et son incertitude en énergie (définie par 1.6.4) est $\Delta E = 0$. Un état quelconque par contre n'est pas forcément un état stationnaire. On a la propriété suivante.

Proposition 2.1.3. Si $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ est un état normalisé, son évolution étant notée $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$ alors le produit scalaire avec l'état initial décroît comme :

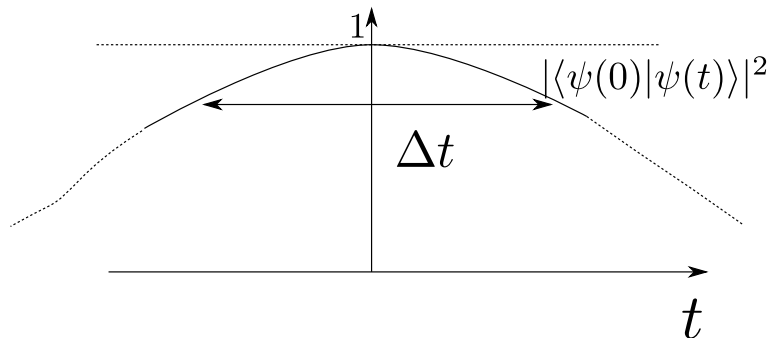
$$|\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \left(\frac{t}{\Delta t}\right)^2 + o(t^2)$$

avec la durée caractéristique :

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E} \tag{2.1.8}$$

$$(\Delta E)^2 := \langle(\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2$$

L'interprétation est que l'état $|\psi(t)\rangle$ a sensiblement changé de l'état initial $|\psi(0)\rangle$ (et avec lui toutes ses propriétés observables) seulement après la durée Δt .



(remarquer que $\Delta t \rightarrow \infty$ si $\Delta E \rightarrow 0$). Cette dernière relation qui s'écrit aussi $\Delta t \Delta E = \hbar$, s'appelle la **relation d'incertitude temps-énergie**. Attention cependant que nous n'avons pas introduit d'opérateur "temps", et donc que cette relation d'incertitude n'est pas de la forme (1.6.9) étudiée plus haut.

Démonstration. on a

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = \left(\hat{I} - i\frac{t}{\hbar}\hat{H} - \frac{t^2}{2\hbar^2}\hat{H}^2 + o(t^2) \right) |\psi(0)\rangle$$

Alors

$$\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle = 1 - i\frac{t}{\hbar}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \frac{t^2}{2\hbar^2}\langle\psi|\hat{H}^2|\psi\rangle + o(t^2)$$

et donc

$$\begin{aligned} |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 &= \left(1 - \frac{t^2}{2\hbar^2}\langle\hat{H}^2\rangle\right)^2 + \left(\frac{t}{\hbar}\langle\hat{H}\rangle\right)^2 + o(t^2) = 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\hat{H}^2\rangle + \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\hat{H}\rangle^2 + o(t^2) \\ &= 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}\left(\langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2\right) + o(t^2) = 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}(\Delta E)^2 + o(t^2) \end{aligned}$$

□

2.1.2 Groupe des translations des états quantiques en espace

Soit $\psi(x)$ une fonction d'onde, et $\psi_\lambda(x) = \psi(x-\lambda)$ la même fonction translatée de $\lambda \in \mathbb{R}$ en espace, dans la direction x . Voir figure (2.1.1). On définit l'**opérateur de translation** \hat{T}_λ qui effectue cette transformation :

$$\left(\hat{T}_\lambda\psi\right)(x) = \psi(x-\lambda) \quad (2.1.9)$$

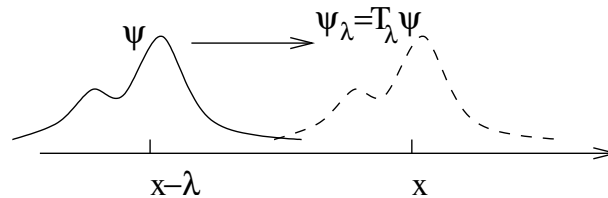


FIGURE 2.1.1 – Translation d'une fonction d'onde de λ .

Propriétés et remarques

Proposition 2.1.4. *les opérateurs \hat{T}_λ forment un groupe à un paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$ d'opérateurs unitaires, appelé **groupe des opérateurs de translation des états quantiques** en x . Le générateur est l'**opérateur impulsion** selon x :*

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \tag{2.1.10}$$

Démonstration. Notons \hat{p} le générateur des translations sans savoir à priori son expression. Par définition

$$\frac{d|\psi_\lambda\rangle}{d\lambda} = \left(-\frac{i\hat{p}}{\hbar}\right)|\psi_\lambda\rangle$$

donc

$$\langle x|\frac{d}{d\lambda}|\psi_\lambda\rangle = \langle x|\frac{-i}{\hbar}\hat{p}|\psi_\lambda\rangle$$

On a $\psi_\lambda(x) = \psi(x - \lambda)$, donc

$$\langle x|\frac{d}{d\lambda}|\psi_\lambda\rangle = \left(\frac{d\psi_\lambda}{d\lambda}\right)(x) = \frac{d}{d\lambda}\psi(x - \lambda) = -\left(\frac{d\psi}{dx}\right)(x - \lambda) = -\left(\frac{d\psi_\lambda}{dx}\right)(x)$$

Par identification on déduit que $\frac{-i}{\hbar}\hat{p} = -\frac{d}{dx}$, soit $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$. □

- (*) Graphiquement, la relation de base $(d\psi_\lambda/d\lambda)(x) = -(d\psi_\lambda/dx)(x)$ (qui est responsable de la fameuse expression “ $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ ” pour l’opérateur impulsion) est assez claire sur la figure (2.1.2).

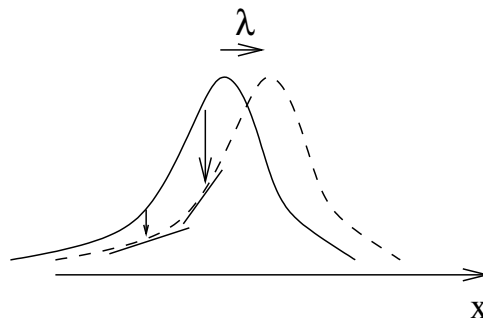


FIGURE 2.1.2 – Schéma d’une petite translation, montrant la relation $(d\psi_\lambda/d\lambda)(x) = -(d\psi_\lambda/dx)(x)$ entre la variation de la fonction et sa dérivée.

- L’interprétation de l’impulsion comme générateur des translations spatiales est assez fondamentale, et valable en mécanique classique comme en mécanique quantique, voir page 95. De plus, le calcul précédent justifie d’un certain point de vue l’expression à priori surprenante de l’opérateur impulsion $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ introduite dès le chapitre 1.

Exercice 2.1.5. Montrer l'action suivante de l'opérateur translation sur les états de position

$$\langle x | \hat{T}_\lambda = \langle x - \lambda | \quad (2.1.11)$$

$$\hat{T}_\lambda | x \rangle = | x + \lambda \rangle \quad (2.1.12)$$

2.1.3 Groupe des translations en impulsion (*)

On peut faire de même avec la translation en impulsion, c'est à dire considérer l'opérateur \hat{B}_μ qui translate de $\mu \in \mathbb{R}$ la fonction d'onde en représentation d'impulsion (1.5.8) page 52 :

$$\tilde{\psi}_\mu(p) = (\hat{B}_\mu \tilde{\psi})(p) = \tilde{\psi}(p - \mu)$$

D'après la relation $p = mv$ (obtenur en mécanique classique si $H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$), l'opérateur \hat{B}_μ consiste à changer la vitesse par une constante $\nu = \frac{\mu}{m}$. Cela s'appelle aussi un **boost**. Ce changement intervient lors d'un **changement de référentiel Galiléen** : $x' = x + \nu t$, donnant $dx'/dt = dx/dt + \nu$.

Exercice 2.1.6. Montrer que \hat{B}_μ forment un groupe à un paramètre $\mu \in \mathbb{R}$ d'opérateurs unitaires, et que l'opérateur position $(-\hat{x})$ est leur générateur, i.e. :

$$\hat{B}_\mu = \exp\left(-\frac{i(-\hat{x})\mu}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i\hat{x}\mu}{\hbar}\right) \quad (2.1.13)$$

$$\frac{d|\psi_\mu\rangle}{d\mu} = \left(-i\frac{(-\hat{x})}{\hbar}\right) |\psi_\mu\rangle$$

Résumé jusqu'à présent : (voir figure 2.1.3)

- L'opérateur $(-\hat{x})$ est le générateur des translations des fonctions d'ondes en impulsion.
- L'opérateur \hat{p} est le générateur des translations des fonctions d'ondes en espace.
- L'opérateur \hat{H} est le générateur des translations des fonctions d'ondes en temps.

Cet énoncé un peu abstrait, est utilisé dans les formulations “modernes” et géométriques des théories physiques.

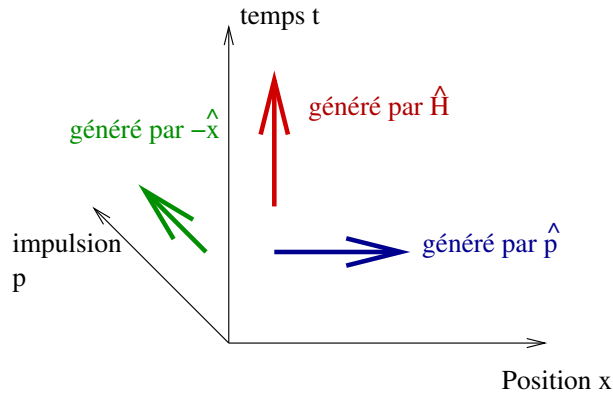


FIGURE 2.1.3 – Résumé de l'action des générateurs des translations dans l'espace (de phase) et temps.

2.1.4 Générateurs en mécanique classique (*)

Montrons que en mécanique classique de Hamilton la situation est analogue.

Rappels (voir cours de mécanique analytique de L3 [Fau10c]) : un état est un point (x, p) dans l'espace de phase. Si le point $(x(t), p(t))$ évolue en temps, il satisfait l'équation d'évolution de Hamilton :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial x} \end{pmatrix}$$

C'est équation qui est l'analogue classique de l'équation de Schrödinger, permet de dire que la fonction de Hamilton H est le générateur de l'évolution temporelle.

Si maintenant on considère les translations en espace de $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$(x_\lambda, p_\lambda) = T_\lambda(x_0, p_0) = (x_0 + \lambda, p_0)$$

alors $dx_\lambda/d\lambda = 1$, et $dp_\lambda/d\lambda = 0$, soit

$$\frac{d}{d\lambda} \begin{pmatrix} x_\lambda \\ p_\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial p} \\ -\frac{\partial G}{\partial x} \end{pmatrix}$$

où le générateur est cette fois ci la fonction impulsion $G(x, p) = p$.

De même pour les translations en impulsion, le générateur est la fonction $G(x, p) = -x$.

1

1. Attention, il y a cependant une différence entre les translations dans l'espace de phase en mécanique classique et quantique : du fait de la non commutativité $[\hat{q}, \hat{p}] \neq 0$, on déduit que $[\hat{T}_\lambda, \hat{B}_\mu] \neq 0$ en général, où \hat{T}_λ est l'opérateur (2.1.9) et \hat{B}_μ est (2.1.13). On verra par conséquent que le groupe des translations quantiques dans l'espace de phase, appelé groupe de Weyl-Heisenberg, est un groupe de Lie non commutatif de dimension 3. En mécanique classique le groupe des translations dans l'espace de phase est un groupe de Lie commutatif de dimension 2. Le troisième paramètre apparaissant en mécanique quantique est une phase dont on verra l'importance dans la section suivante.

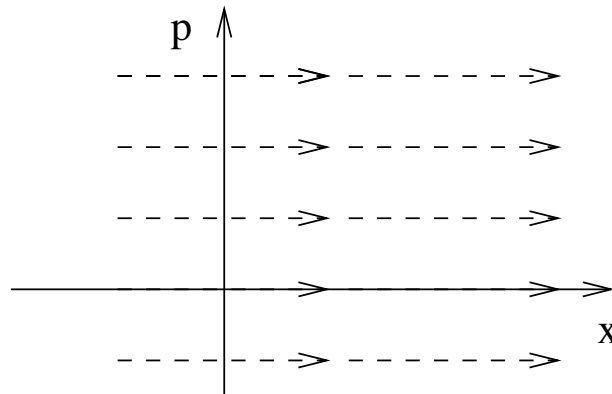


FIGURE 2.1.4 – Trajectoires dans l’espace de phase classique (x, p) engendrée par le générateur $G(x, p) = p$. Ce sont des translations en x .

2.1.5 Représentation de Heisenberg (*)

En résumé, dans la description mathématique que nous venons de faire de l’évolution quantique, un état quantique est un vecteur $\psi(t) \in \mathcal{H}$ qui évolue d’après l’équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi$$

où $\hat{H}(t)$ est l’opérateur Hamiltonien. On a alors $\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0)$ avec

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right).$$

Si on effectue une expérience associée à une observable \hat{A} (opérateur auto-adjoint), la distribution statistique des résultats possibles est donnée par les probabilités d’observer la valeur propre A à l’instant t (d’après eq.(1.6.2) page 61) :

$$P_A = \frac{\left\| \hat{\mathcal{P}}_A \psi(t) \right\|^2}{\left\| \psi(t) \right\|^2}$$

(où $\hat{\mathcal{P}}_A$ est le projecteur sur l’espace propre associé à la valeur propre A).

Cette description s’appelle aussi **la représentation de Schrödinger**.

On a vu que l’opérateur $\hat{U}(t)$ est un opérateur unitaire, qui agit sur l’espace de Hilbert en préservant sa structure (son produit scalaire). On utilise l’opérateur $\hat{U}(-t)$ à l’instant t comme transformation dans l’espace de Hilbert :

$$\begin{cases} \mathcal{H} & \rightarrow \mathcal{H} \\ \psi & \rightarrow \tilde{\psi} := \hat{U}(-t)\psi \end{cases} \quad \text{:transformation d'un vecteur}$$

(La transformation inverse est simplement $\tilde{\psi} \rightarrow \psi = \hat{U}(t)\tilde{\psi}$). La **représentation de Heisenberg** de la mécanique quantique consiste à effectuer cette transformation.

Par cette transformation, un opérateur \hat{A} devient :

$$\tilde{A}(t) = \hat{U}(-t) \hat{A} \hat{U}(t) \quad : \text{transformation d'un opérateur}$$

et dépend donc du temps.

Démonstration. En effet : par définition un opérateur agit sur des vecteurs : si $\psi_1 \in \mathcal{H}$ et $\psi_2 = \hat{A}\psi_1$ alors par la transformation on obtient $\tilde{\psi}_1 = \hat{U}(-t)\psi_1$ et $\tilde{\psi}_2 = \hat{U}(-t)\psi_2$. L'opérateur recherché \tilde{A} est défini par $\tilde{\psi}_2 = \tilde{A}\tilde{\psi}_1$. Or $\tilde{\psi}_2 = \hat{U}(-t)\psi_2 = \hat{U}(-t)\hat{A}\hat{U}(t)\psi_1$ donc $\tilde{A}(t) = \hat{U}(-t)\hat{A}\hat{U}(t)$. \square

Exemples :

- par cette transformation, l'état $\psi(t)$ qui évolue devient :

$$\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0) \rightarrow \tilde{\psi} = \hat{U}(-t)\psi(t) = \psi(0)$$

et devient donc un vecteur qui n'évolue pas.

Remarque :

- Il n'y a rien de profond dans ce "changement de représentation". Il faut considérer la représentation de Heisenberg comme un changement de coordonnées en géométrie ou en mécanique classique. Son intérêt est que l'évolution ne porte plus sur les vecteurs (qui deviennent fixes) mais sur les opérateurs comme $\tilde{A}(t)$. Or il existe des techniques très puissantes pour étudier les opérateurs, leur spectre, la dynamique qu'ils génèrent, comme l'analyse micro-locale ou l'analyse semiclassique (qui consiste à ramener l'étude d'opérateurs par l'étude de fonctions sur l'espace de phase, appelées **symbole de l'opérateur**), [?], [Mar02].

Exercice 2.1.7. "Groupe de Weyl-Heisenberg"

Le but de cet exercice est de montrer le rôle fondamental des opérateurs $\hat{H}, \hat{p}, \hat{x}$ comme étant respectivement les générateurs des transformations dans le temps t , l'espace x des positions, et l'espace p des impulsions. On considère une fonction d'onde $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ décrivant une particule évoluant à une dimension.

1. Soit t_0 un intervalle de temps. On note $\psi(x, t + t_0) = \langle x | \hat{U}(t_0) \psi(t) \rangle$, où $\hat{U}(t_0)$ est l'opérateur unitaire d'évolution sur l'intervalle de temps t_0 . Partant de l'équation de Schrödinger $\frac{d\psi(t)}{dt} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{H}\psi(t)$, déduire l'expression de $\hat{U}(t_0)$ en fonction de \hat{H} . On dit que \hat{H} est le **générateur** de la transformation $\hat{U}(t_0)$.
 - (a) Par analogie, soit x_0 un intervalle d'espace. On note (à t fixé) $\langle x | \psi_{x_0} \rangle = \psi_{x_0}(x) = \psi(x - x_0) = \langle x - x_0 | \psi \rangle$ la fonction d'onde $\psi(x)$ translatée de x_0 (vérifier sur un schéma que c'est la bonne expression). En dérivant cette équation par rapport à x_0 , montrer que $\frac{d\psi_{x_0}}{dx_0} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p}\psi_{x_0}$. On note $\hat{T}(x_0)$ l'opérateur unitaire qui translate la fonction d'onde de x_0 , c'est à dire $\psi_{x_0} = \hat{T}(x_0)\psi$. Montrer que $\hat{T}(x_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p}x_0\right)$. On dit que \hat{p} est le **générateur des translations en espace**. Montrer que $|x + x_0\rangle = \hat{T}(x_0)|x\rangle$.

- (b) Soit $\hat{B}(p_0)$ l'opérateur "boost" d'une impulsion p_0 , c'est à dire qui transforme une onde plane : $\hat{B}(p_0)|p\rangle = |p+p_0\rangle$. Note : en mécanique non relativiste, cet opérateur correspond à faire un changement de référentiel de Galilée : $v \rightarrow v+v_0$, avec $p=mv$, $p_0=mv_0$. Par analogie avec ci-dessus, montrer que l'opérateur $(-\hat{x})$ est le générateur des ces transformations : $\hat{B}(p_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right)(-\hat{x})p_0\right)$.
- (c) Si \hat{A}, \hat{B} sont deux opérateurs qui ne commutent pas, mais tels que $[\hat{A}, \hat{B}]$ commute avec \hat{A} et \hat{B} , alors $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$ (**relation de Glauber**, voir Cohen-Tannoudji [CBF] p. 174). Utilisant cette relation, montrer que :

$$\hat{T}(-x_0)\hat{B}(-p_0)\hat{T}(x_0)\hat{B}(p_0) = e^{-2\pi i \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}} \hat{I}$$

où $\mathcal{S} = x_0 p_0$ est l'aire du rectangle dans l'espace de phase parcourut par le chemin des transformations successives. Note : on appelle \mathcal{S} l'**action**. Les transformations $\hat{T}(x_0), \hat{B}(p_0)$ forment le **groupe de transformations de Weyl-Heisenberg**. Le rôle de la phase $e^{-2\pi i \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}}$ est fondamental en mécanique quantique. Quelle est l'interprétation de la quantité sans dimension $\mathcal{S}/(2\pi\hbar)$?

2.2 Le potentiel harmonique ; Spectre de \hat{H} et évolution

référence : Ballentine p111 [L.E90].

Comme signalé plus haut, il est en général impossible de résoudre de façon exact l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel quelconque $V(x)$ à une dimension. En revanche cela est possible pour un potentiel quadratique $V(x) = ax^2 + bx + c$. Dans cette section nous allons résoudre ce problème, et nous intéresser au **potentiel Harmonique** :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

Le Hamiltonien correspondant est celui de l'**oscillateur harmonique** :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \tag{2.2.1}$$

2.2.1 Importance du potentiel Harmonique en physique

Si une particule se déplaçant à une dimension, subit un champ de force dérivant d'un potentiel $F(x) = -dV/dx$, et se trouve près d'une position d'équilibre, disons en $x = 0$, alors $F(0) = -(dV/dx)(0) = 0$; si de plus cette position d'équilibre est stable, alors $(dF/dx)(0) = -(d^2V/d^2x)(0) < 0$. Dans ce cas le mouvement de la particule reste au voisinage de cette position d'équilibre, et on peut approximer la fonction potentielle par son développement limité en $x \simeq 0$:

$$V(x) = V(0) + x \frac{dV}{dx}(0) + \frac{1}{2}x^2 \frac{d^2V}{dx^2}(0) + o(x^2) \tag{2.2.2}$$

$$= \frac{1}{2}kx^2 + o(x^2) \tag{2.2.3}$$

en posant :

$$k = \frac{d^2V}{dx^2}(0) > 0$$

et $V(0) = 0$ (par choix de l'échelle d'énergie). Voir figure 2.2.1.

Cette situation est très courante, car à “basse” température, les particules ont tendance à se mettre près de leur position d'équilibre stable qui est la position de plus basse énergie.

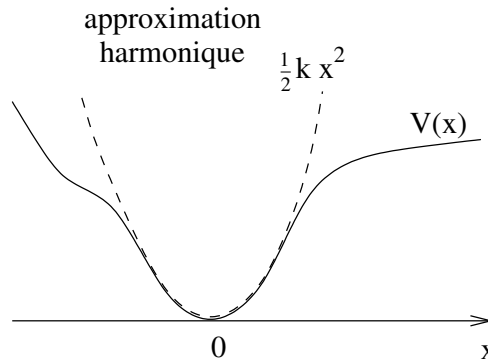


FIGURE 2.2.1 – Approximation harmonique près de la position d'équilibre stable.

Pour ces raisons, **l'approximation harmonique est très utile et fondamentale en physique.**

Les équations de mouvement classique sont pour le Hamiltonien $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx. \quad (2.2.4)$$

Elles sont linéaires en les variables (x, p) , car celles ci n'apparaissent que au degré 1. Pour cette raison, on parle aussi de **l'approximation linéaire** du mouvement. (Plus généralement, les équations de mouvement sont linéaires lorsque le Hamiltonien $H(x, p)$ est quadratique en (x, p)).

La résolution de ces équations (voir rappels ci-dessous) montre que la particule a un mouvement d'oscillation à la fréquence

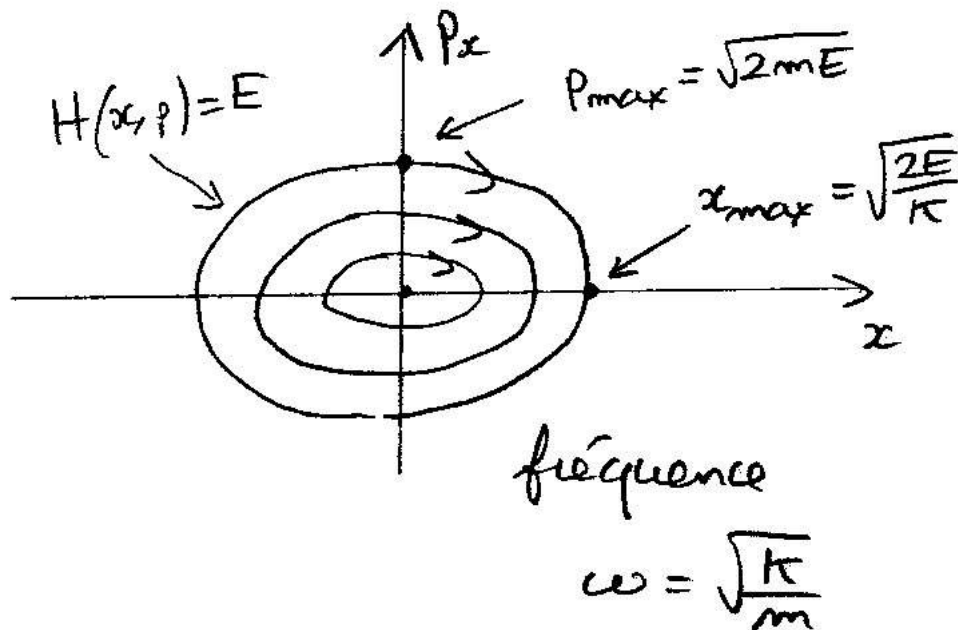
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

indépendante de l'énergie, et que $x(t) = A \sin(-\omega t + \varphi)$ est purement sinusoïdale. Le terme **“harmonique”** vient de cette propriété. Rappelons nous aussi que les trajectoires $x(t), p(t)$ dans l'espace de phase sont des ellipses (voir figure 1.3.2).

Rappels sur le mouvement classique de l'oscillateur harmonique (*) : L'équation $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = E = cste$ est l'équation d'une ellipse dans l'espace de phase (x, p) de demi axes

$$x_{max} = \sqrt{\frac{2E}{K}}, \quad p_{max} = \sqrt{2mE}$$

Voir figure.



mais pour connaître le mouvement $(x(t), p(t))$ sur cette ellipse, il faut résoudre les équations du mouvement (2.2.4). Ce qui est particulier dans ces équations est que le terme de droite est linéaire en x, p (cad de degré 1). La petite difficulté est que les deux équations sont couplées. Un tel système est soluble avec de l'algèbre linéaire. Pour simplifier, ici on exploite le fait que l'expression est simple. Posons (avec $E = 1$) :

$$X := \frac{x}{x_{\max}} = \sqrt{\frac{k}{2}}x, \quad Y := \frac{p}{p_{\max}} = \frac{p}{\sqrt{2m}} \quad (2.2.5)$$

Posons

$$\omega := \sqrt{\frac{k}{m}}$$

alors

$$\begin{aligned} \dot{X} &= \sqrt{\frac{k}{2}}\dot{x} = \sqrt{\frac{k}{2}}\left(\frac{p}{m}\right) = \sqrt{\frac{k}{m}}Y = \omega Y \\ \dot{Y} &= \frac{1}{\sqrt{2m}}\dot{p} = \frac{-k}{\sqrt{2m}}x = -\omega X \end{aligned}$$

Soit

$$Z := X + iY \in \mathbb{C}$$

alors

$$\dot{Z} = \dot{X} + i\dot{Y} = -i\omega(X + iY) = -i\omega Z$$

on obtient une équation très simple à résoudre :

$$Z(t) = Z(0)e^{-i\omega t}, \quad (2.2.6)$$

qui est un mouvement de rotation à vitesse angulaire ω dans le sens indirect sur \mathbb{C} .

En notant $Z(0) = Ae^{i\varphi}$, on a

$$Z(t) = Ae^{i(-\omega t + \varphi)}$$

donc

$$X(t) = \Re(Z(t)) = A \cos(-\omega t + \varphi), \quad Y(t) = \Im(Z(t)) = A \sin(-\omega t + \varphi)$$

Remarquer que

$$H = X^2 + Y^2 = \bar{Z}Z$$

Avec le changement de variable (2.2.5) les ellipses dans les coordonnées de départ (x, p) sont devenues des cercles dans les coordonnées (X, Y) .

Remarques :

- pour un problème à plusieurs dimensions ou plusieurs degrés de liberté, cela est encore valable.
- Par exemple, les équations de Maxwell sont linéaires par rapport aux champs \vec{E}, \vec{B} . Ainsi la dynamique du champ de Maxwell est “harmonique”, et l’analyse de cette section sera directement applicable pour comprendre la nature quantique du champ électromagnétique et le concept de **photon** (états stationnaires quantiques des oscillations du champs).
- Comme autre exemple, citons les ondes de vibration d’un solide. L’équation d’onde élastiques est non linéaire mais pour les faibles amplitudes, on peut utiliser l’approximation linéaire comme décrite ici, et les petites vibrations du solide sont alors décrites par un Hamiltonien qui est la somme d’oscillateurs harmonique indépendants. Les **phonons** sont les états stationnaires quantiques de ces oscillations.
- Dans la théorie actuelle (moderne) de la physique fondamentale, appelée “**modèle standard de la physique des particules**”, le Hamiltonien est non quadratique. Par conséquent les équations de mouvement classiques des champs sont non linéaires. Afin de pouvoir les résoudre, on néglige les termes non linéaires (lorsque cela est possible, et cela revient à négliger les interactions), et l’on obtient des équations linéaires appelées “équations des champs libres”, analogues au modèles de l’oscillateur harmonique. Les états propres quantiques de ces champs libres correspondent aux particules élémentaires. La grande difficulté à laquelle est confrontée la physique des particules est de justifier cette approximation linéaire (de montrer que les vrais états propres sont proches), et d’aller au delà de cette approximation. Voir section 5.4.

2.2.2 Résolution algébrique du spectre

Pour résoudre le spectre de l'oscillateur Harmonique nous allons essayer de mettre en évidence dans ce cas simple, une démarche générale qui est bien adaptée aux problèmes possédant une symétrie dynamique. (Cette même démarche sera utilisée plus loin pour l'étude du groupe de rotation, et s'utilise en général pour tous les groupes de symétrie continus.)

2.2.2.1 Changement de variable

On simplifie tout d'abord l'expression de \hat{H} en introduisant des coordonnées (\hat{Q}, \hat{P}) sans dimension :

$$\hat{Q} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{q} \quad (2.2.7)$$

$$\hat{P} = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} \hat{p} \quad (2.2.8)$$

donnant :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right)$$

(on a ainsi factorisé la seule constante ayant une dimension d'énergie : $\hbar\omega$). On obtient pour les nouvelles variables :

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{q}, \hat{p}] = i\hat{I} \quad (2.2.9)$$

2.2.2.2 Remarques sur l'algèbre de Lie de l'oscillateur harmonique (*)

En utilisant eq.(A.2.3), donnant $[\hat{Q}, F(\hat{P})] = i\frac{dF(\hat{P})}{d\hat{P}}$, $[F(\hat{Q}), \hat{P}] = i\frac{dF(\hat{Q})}{d\hat{Q}}$, ou directement, on remarque que

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{Q}] &= -i\hbar\omega\hat{P} \\ [\hat{H}, \hat{P}] &= i\hbar\omega\hat{Q} \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Le problème fait donc intervenir seulement quatre opérateurs autoadjoints : $\hat{H}, \hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$. Nous venons de montrer une propriété remarquable qui est que les commutateurs de deux quelconques de ces opérateurs est une combinaison linéaire de ces opérateurs. On dit que l'espace vectoriel engendré par ces opérateurs est stable vis à vis de l'opération de commutation.

L'**algèbre de Lie de l'oscillateur Harmonique**, noté \mathcal{O} est l'espace vectoriel engendré par ces quatre opérateurs, c'est à dire par toutes les combinaisons linéaires possibles. C'est un espace vectoriel de dimension 4, qui est stable par l'opération de commutation. (i.e. un élément quelconque $\hat{A} \in \mathcal{O}$ s'écrit $\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{H} + \delta\hat{I}$, avec $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$; et si $\hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{O}$ alors $\frac{1}{i}[\hat{A}, \hat{B}] \in \mathcal{O}$).

Nous verrons ci-dessous page 127, que ces opérateurs sont les générateurs du groupe de Lie des déplacements dans l'espace de phase (rotation comprise).²

2.2.2.3 Opérateurs de création et d'annihilation

Nous allons voir qu'il est préférable de considérer d'autres opérateurs appartenant à l'algèbre de l'oscillateur Harmonique :

$$\begin{aligned} a &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \\ a^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad : \text{ adjoint de } a \end{aligned}$$

2. **Une algèbre de Lie d'opérateurs** est un ensemble d'opérateurs *auto-adjoints* formant un espace vectoriel *réel* de dimension finie n et stable par l'opération de commutation.

En notant \mathcal{A} une telle algèbre de dimension n , cela signifie, qu'il existe des opérateurs *auto-adjoints* $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n$ indépendants, formant une base de \mathcal{A} , et que tout élément $\hat{A} \in \mathcal{A}$ s'écrit, comme une combinaison linéaire à coefficients réels :

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^n a_i \hat{A}_i \in \mathcal{A}, \quad a_i \in \mathbb{R}$$

et il faut aussi que si $\forall \hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{A}$ alors $\frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \in \mathcal{A}$.

Remarques :

- L'algèbre est caractérisée par sa dimension n et par les commutateurs des éléments de base \hat{A}_i , autrement dit par les coefficients $C_{ijk} \in \mathbb{R}$ définis par :

$$\frac{1}{i} [\hat{A}_i, \hat{A}_j] = \sum_{k=1}^n C_{ijk} \hat{A}_k$$

- Deux algèbres de Lie \mathcal{A} et \mathcal{A}' sont dites isomorphes (i.e. "équivalentes") si il existe une bijection $\varphi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}'$ (qui permet d'identifier \mathcal{A} et \mathcal{A}') telle que :

1. φ soit une application linéaire (i.e. préserve les combinaisons linéaires)

2. φ préserve les commutateurs : $\frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ alors $\frac{1}{i} [\varphi(\hat{A}), \varphi(\hat{B})] = \varphi(\hat{C})$.
(On verra l'exemple d'un tel isomorphisme page 127).

- On peut considérer aussi les combinaisons à coefficients complexes. Il s'agit alors de l'**algèbre de Lie complexifiée**.
- Nous verrons que les opérateurs auto-adjoints d'une algèbre de Lie peuvent toujours être considérés comme des générateurs; et que l'on peut associer un groupe de Lie d'opérateurs unitaires.
- En physique la notion de algèbre de Lie et groupe de Lie est une notion qui peut être abstraite et se manifeste dans des situations très différentes.

qui vérifient

$$\boxed{[a, a^+] = \hat{I}}$$

(en effet : $[a, a^+] = \frac{1}{2} \left([\hat{Q}, -i\hat{P}] + [i\hat{P}, \hat{Q}] \right) = \frac{1}{2} (1 + 1) = \hat{I}$)

On a inversement $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$, $\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$. On utilise $aa^+ = a^+a + \hat{I}$ et on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(-\frac{1}{2}(a^+ - a)^2 + \frac{1}{2}(a + a^+)^2 \right) \\ &= \frac{1}{4}\hbar\omega \left(-(a^+)^2 - a^2 + a^+a + aa^+ + a^2 + (a^+)^2 + a^+a + aa^+ \right) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega (a^+a + aa^+) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(2a^+a + \hat{I} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I} \right) \end{aligned}$$

soit :

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I} \right)} \quad (2.2.11)$$

où l'on a posé :

$$\boxed{\hat{N} := a^+a}$$

(remarquer que \hat{N} est autoadjoint : $\hat{N}^+ = (a^+a)^+ = a^+a = \hat{N}$). Sachant que $aa^+ = a^+a + \hat{I}$, on calcule

$$[\hat{N}, a] = a^+aa - (aa^+)a = a^+aa - (a^+a + \hat{I})a = -a$$

Et de même

$$[\hat{N}, a^+] = a^+(aa^+) - a^+a^+a = a^+(a^+a + \hat{I}) - a^+a^+a = a^+$$

On a donc obtenu les relations

$$[a, a^+] = \hat{I} \quad (2.2.12)$$

$$[* , \hat{I}] = 0 \quad \text{avec } * = \text{tout opérateur} \quad (2.2.13)$$

$$[\hat{N}, a] = -a \quad (2.2.14)$$

$$[\hat{N}, a^+] = a^+ \quad (2.2.15)$$

Ainsi, les quatre opérateurs $(\hat{N}, a^+, a, \hat{I})$ forment une autre base de la même algèbre de Lie \mathcal{O} de l'oscillateur harmonique, mais les relations de commutation sont plus simples. On les a mis sous une forme standard appelée **décomposition de Cartan**³.

3. pour être plus précis, on considère l'opérateur adjoint³ $ad_N : \mathcal{O} \rightarrow \mathcal{O}$ sur l'algèbre de Lie définie par

$$ad_N(\hat{A}) = [\hat{N}, \hat{A}].$$

Les relations (2.2.15) montrent que la base de Cartan est une base de vecteurs propres pour l'opérateur ad_N .

2.2.2.4 Spectre l'Oscillateur Harmonique

La relation (2.2.11) montre que le spectre de \hat{H} se déduit simplement du spectre de \hat{N} . Grâce aux relations précédentes de Cartan, il est possible de calculer le spectre de l'opérateur \hat{N} , et donc de déduire celui du Hamiltonien \hat{H} . Voici le résultat. La preuve sera donnée ensuite.

Proposition 2.2.1. *Dans l'espace quantique $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, le spectre de $\hat{N} = a^+a$ est formé par :*

$$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle, \quad n \in \mathbb{N},$$

Les états propres $|\psi_n\rangle, n \in \mathbb{N}$ forment une base de l'espace de Hilbert. L'état $|\psi_0\rangle$ vérifie :

$$a|\psi_0\rangle = 0$$

sa fonction d'onde normalisée dans la "représentation Q ", est une fonction gaussienne :

$$\psi_0(Q) := \langle Q|\psi_0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}Q^2} \quad (2.2.16)$$

*et plus généralement pour les états $|\psi_n\rangle$ la fonction d'onde est appelée **fonction de Hermite** :*

$$\psi_n(Q) = \langle Q|\psi_n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} H_n(Q)$$

*où $H_n(Q)$ est un polynôme de degré n à coefficients entiers, appelé **polynôme d'Hermite**, obtenu par la relation de récurrence*

$$H_n(Q) = \left(2Q - \frac{d}{dQ}\right) H_{n-1}(Q)$$

Les premiers termes sont :

$$H_0(Q) = 1, \quad H_1(Q) = 2Q, \quad H_2(Q) = 4Q^2 - 2, \dots$$

*Code sous **Maple** ou sous **xcas** (qui est libre et gratuit, [B.]) pour dessiner les **fonctions d'Hermite** $\psi_n(Q)$:*

```
f0:=exp(-x^2/2);
f1:=1/(sqrt(2*1))*(x*f0-diff(f0,x));
f2:=1/(sqrt(2*2))*(x*f1-diff(f1,x));
f3:=1/(sqrt(2*3))*(x*f2-diff(f2,x));
plot([f0,f1,f2,f3],x=-5..5);
```

Proposition 2.2.2. *Donnant la figure 2.2.2.*

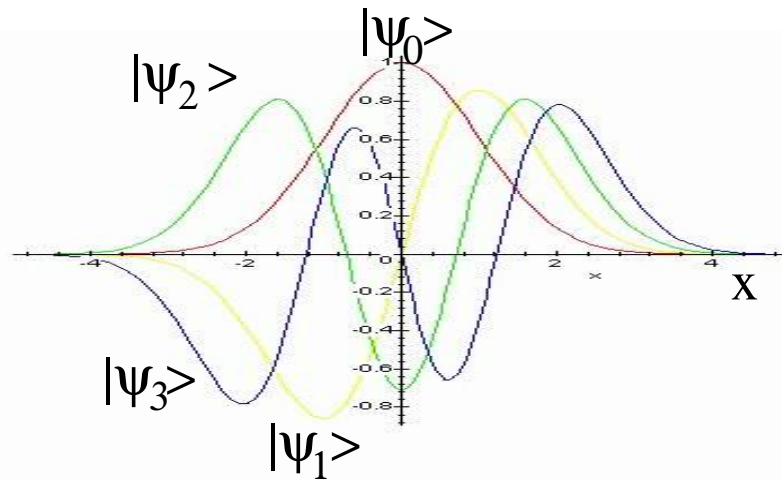


FIGURE 2.2.2 – Fonctions d’ondes stationnaires $\psi_n(Q) = \langle Q|\psi_n\rangle$ de l’oscillateur Harmonique.

Proposition 2.2.3. *Les opérateurs a^+ , a vérifient les relations suivantes et sont appelés des opérateurs d’échelle ou opérateurs de création et d’annihilation (voir figure 2.2.3) :*

$$\begin{aligned} a^+|\psi_n\rangle &= \sqrt{n+1}|\psi_{n+1}\rangle, & \text{pour } n \geq 0 \\ a|n\psi_n\rangle &= \sqrt{n}|\psi_{n-1}\rangle, & \text{pour } n \geq 1 \end{aligned}$$

donc chaque état normalisé $|\psi_n\rangle$ s’exprime à partir de l’état $|0\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\psi_0\rangle \quad (2.2.17)$$

Corollaire 2.2.4. *le spectre de \hat{H} est :*

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (2.2.18)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.2.19)$$

La relation de fermeture dans la base $(|\psi_n\rangle)_n$ s’écrit :

$$\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

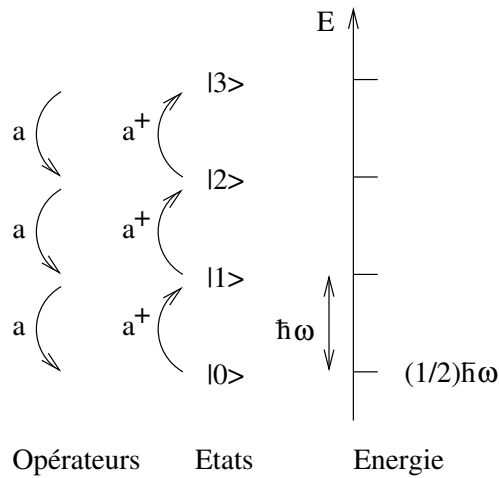


FIGURE 2.2.3 – Schéma des opérateurs d'échelle agissant entre les états propres $|n\rangle = |\psi_n\rangle$, et schéma du spectre d'énergie équidistant de l'oscillateur Harmonique. On appelle aussi a^+ **l'opérateur de création**, et a **l'opérateur d'annihilation**. (Ce terme est plus approprié dans le cadre de l'électrodynamique quantique, voir plus loin).

Remarque 2.2.5. Il est habituel de noter $|n\rangle = |\psi_n\rangle$ pour la fonction d'Hermite du niveau $n \geq 0$.

Démonstration. (*) Cherchons la fonction notée $\psi_0(Q)$, définie par :

$$a\psi_0 = 0$$

(c'est à dire que ψ_0 est dans le **noyau** de l'opérateur a). On se rappelle que par définition des opérateurs \hat{Q}, \hat{P} , pour tout état ψ , on a $\langle Q|\hat{Q}\psi\rangle = Q\langle Q|\psi\rangle$ et $\langle Q|\hat{P}\psi\rangle = -i\frac{d}{dQ}\langle Q|\psi\rangle$. Cela donne :

$$0 = \langle Q|a\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle Q|\left(\hat{Q} + i\hat{P}\right)\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)\psi_0(Q), \quad \forall Q \in \mathbb{R}.$$

On obtient donc l'équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{d\psi_0}{dQ} = -Q\psi_0$$

que l'on résoud en écrivant :

$$\begin{aligned} d\psi_0/\psi_0 = -QdQ &\Leftrightarrow d\log \psi_0 = -d\left(\frac{1}{2}Q^2\right) \\ &\Leftrightarrow \log \psi_0 = -\frac{1}{2}Q^2 + cste \Leftrightarrow \psi_0(Q) = Ce^{-\frac{1}{2}Q^2} \end{aligned}$$

La constante C se trouve en cherchant une solution normalisée :

$$1 = \|\psi_0\|^2 = \int |\psi_0(Q)|^2 dQ = C^2 \int e^{-Q^2} dQ = C^2 \sqrt{\pi}$$

(on a utilisé l'intégrale Gaussienne eq. (A.1.1) page 361) donc $C = \pi^{-1/4}$,

$$\psi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)$$

Notons que ψ_0 est vecteur propre de l'opérateur $\hat{N} = a^+a$ avec la valeur propre 0 :

$$\hat{N}\psi_0 = a^+(a\psi_0) = 0\psi_0$$

On cherche maintenant les autres vecteurs propres de \hat{N} . Pour un entier $n \geq 1$, on définit par récurrence l'état ψ_n par

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}(a^\dagger)^2\psi_{n-2} = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\psi_0$$

Supposons que $\hat{N}\psi_{n-1} = (n-1)\psi_{n-1}$. Alors utilisant (2.2.15), donnant $\hat{N}a^+ = a^+\hat{N} + a^+ = a^+(\hat{N} + \hat{I})$ on a

$$\hat{N}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{N}a^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+(\hat{N} + \hat{I})\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+(n-1+1)\psi_{n-1} = n\psi_n$$

Calculons la norme de ψ_n . On utilise $aa^+ = a^+a + \hat{I}$:

$$\|\psi_n\|^2 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \frac{1}{n} \langle \psi_{n-1} | aa^+ \psi_{n-1} \rangle = \frac{1}{n} \langle \psi_{n-1} | (\hat{N} + \hat{I}) \psi_{n-1} \rangle = \frac{(n-1+1)}{n} \|\psi_{n-1}\|^2 = \|\psi_{n-1}\|^2$$

Par récurrence on déduit que $\|\psi_n\|^2 = 1$ (est normalisé) et que pour tout $n \in \mathbb{N}$, ψ_n est vecteur propre de \hat{N} avec la valeur propre n :

$$\hat{N}\psi_n = n\psi_n$$

Remarquons aussi la relation :

$$a\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}aa^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}(a^+a + \hat{I})\psi_{n-1} = \sqrt{n}\psi_{n-1}.$$

Cherchons maintenant la fonction d'onde de l'état ψ_n :

$$\psi_n(Q) = \langle Q | \psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \langle Q | a^+ \psi_{n-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right) \psi_{n-1}(Q) \quad (2.2.20)$$

La fonction d'onde $\psi_n(Q)$ s'obtient donc par une opération de dérivation à partir de la fonction $\psi_{n-1}(Q)$. Pour simplifier l'écriture, on définit la fonction $H_n(Q)$ par l'écriture :

$$\psi_n(Q) = \langle Q | \psi_n \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} H_n(Q)$$

et connaissant $\psi_0(Q)$ ci-dessus, on observe que $H_0(Q) = 1$. La relation de récurrence (2.2.20) donne

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} H_n(Q) &= \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right) \left(\frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \left(\frac{1}{(n-1)!2^{n-1}}\right)^{1/2} H_{n-1}(Q) \right) \\ &\Leftrightarrow \left(\frac{1}{2n}\right)^{1/2} H_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(Q H_{n-1} - (-Q)H_{n-1} - \frac{dH_{n-1}}{dQ} \right) \end{aligned}$$

donc :

$$H_n(Q) = \left(2Q - \frac{d}{dQ}\right) H_{n-1}(Q)$$

et on déduit que $H_n(Q)$ est en fait un polynôme de degré n à coefficients entiers appelé **polynôme d'Hermite**, dont les premiers termes sont :

$$H_0(Q) = 1, \quad H_1(Q) = 2Q, \quad H_2(Q) = 4Q^2 - 2, \dots$$

Comme \hat{N} est auto adjoint ($\hat{N}^+ = (a^+ a)^+ = \hat{N}$), on a d'après (1.5.1), que les vecteurs propres ψ_n forment un ensemble orthonormés de vecteurs. Pour montrer que l'opérateur \hat{N} n'a pas d'autres vecteurs propres, il faut montrer que ces états ψ_n forment une base de l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

On cherche une fonction $\varphi(Q)$ orthogonale à toutes les fonctions ψ_n précédentes. Par hypothèse on a donc $\int \varphi(Q) e^{-Q^2/2} Q^n$ pour tout $n \geq 0$. On écrit la transformée de Fourier

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(\varphi(Q) e^{-Q^2/2}\right)(P) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(Q) e^{-Q^2/2} e^{-iPQ} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(Q) e^{-Q^2/2} \left(1 - iPQ + \frac{1}{2}(-iPQ)^2 + \dots\right) \end{aligned}$$

Chaque terme du développement en série de e^{-iPQ} est un polynôme en Q . On permute la série et l'intégrale, et on déduit d'après l'hypothèse sur φ que chacun des termes est nul, donc $\mathcal{F}\left(\varphi(Q) e^{-Q^2/2}\right) = 0$, donc $\varphi(Q) e^{-Q^2/2} = 0, \forall Q$, donc $\varphi = 0$. Il n'y a donc pas de fonction orthogonale à l'espace engendré par les ψ_n . Conclusion : les vecteurs orthogonaux ψ_n engendrent tout l'espace $L^2(\mathbb{R})$ et forment donc une base orthonormée.

Le spectre de \hat{H} se déduit simplement de la relation $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}Id\right)$ et du spectre de \hat{N} obtenu ci-dessus.

□

2.2.2.5 (*) Fonctions d'ondes $\psi_n(x)$

On a donné l'expression des fonctions d'onde avec la variable Q sans unité. Voici leur expression avec la variable de position x . Pour cela on a la propriété générale suivante concernant un changement d'échelle :

Proposition 2.2.6. Soit $\alpha > 0$. Pour le changement de variable de position $\hat{x} \rightarrow \hat{Q} = \alpha \hat{x}$, l'état de position est $|Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}|x\rangle$.

Démonstration. Posons $|Q\rangle = \beta|x\rangle$. On a $|Q\rangle = \beta|x\rangle = \beta \int dQ' |Q'\rangle \langle Q'|x\rangle = \beta \int \alpha dx' |Q'\rangle \beta \langle x'|x\rangle$. Or $\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x)$, donc $|Q\rangle = \alpha\beta^2|Q\rangle$, ainsi $\beta = 1/\sqrt{\alpha}$.

□

Dans le cas considéré ci-dessus, avec $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$, on obtient alors pour l'état fondamental :

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \sqrt{\alpha}\langle Q|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (2.2.21)$$

qui est le paquet d'onde Gaussien (1.1.6), avec $x_0 = 0$, $p_0 = 0$, et de largeur $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

2.2.3 Application : Modèle d'Einstein (1907) sur la capacité calorifique des matériaux

Nous discutons maintenant une conséquence expérimentale remarquable de la quantification du spectre de l'oscillateur Harmonique, très importante au niveau historique. C'est un modèle que Einstein a introduit en 1907, bien avant la connaissance de la mécanique quantique.

On modélise un atome de carbone dans un cristal de diamant, par une particule oscillant autour de sa position d'équilibre. Dans l'approximation harmonique, son mouvement selon x est décrit par le Hamiltonien (2.2.1) de l'oscillateur harmonique. Ses niveaux d'énergie selon x sont donc quantifiés, selon :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

A température nulle, l'atome est dans le niveau $|0\rangle$ d'énergie le plus bas, mais à température T plus élevée, il peut être dans le niveau $|n\rangle$, d'énergie E_n avec la probabilité

$$P_n = \frac{1}{Z} \exp(-E_n/(k_B T))$$

C'est la **loi de Boltzmann**⁴ avec Z constante de normalisation.

Comme $E_n \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$ on devine que tant que à température suffisamment basse de sorte que $k_B T \ll \hbar\omega$ (ou $T \ll \Theta_E := \frac{\hbar\omega}{k_B}$ appelée **température d'Einstein**), alors $\frac{E_n}{k_B T} \gg 1$ et donc $P_n \ll 1$ pour $n \geq 1$, c'est à dire que l'atome a une probabilité négligeable d'atteindre les niveaux excités $n \geq 1$, et restera donc dans l'état fondamental $n = 0$ (son mouvement est "gelé"). Son énergie moyenne reste donc constante, $\langle E \rangle \simeq E_0$, et sa capacité calorifique $c(T) = d\langle E \rangle/dT \simeq 0$ est quasiment nulle.

Pour le diamant, cela correspond à $T \ll \Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B} = 1320K$. C'est donc le cas à température ambiante⁵.

4. Rappelons que la loi de Boltzmann est à la base de la physique statistique. On montre qu'elle découle du comportement chaotique microscopique ("hypothèse ergodique"). Cependant on ne connaît pas de preuve rigoureuse pour les systèmes réalistes.

5. Notons les propriétés remarquables du diamant : matériau le plus dur connu ; les atomes de carbone du diamant sont à température ambiante dans leur état quantique fondamental (comme à $T = 0K$!). Aussi c'est un matériau inerte chimiquement, si bien que l'on trouve des diamants qui ont été créés il y a des milliards d'années, qui ont survécus à des générations de tectonique des plaques dans la croûte terrestre.

La quantification des niveaux d'énergie explique donc que $c(T) \rightarrow 0$ pour $T \ll \Theta_E$. Voir la figure 2.2.4.

Un calcul précis donne une expression analytique de la courbe $c(T)$, (voir cours de physique statistique).

En particulier, le théorème d'équipartition classique donne $c(T) \rightarrow 3R$ pour $T \gg \Theta_E$.

Exercice 2.2.7. On considère un atome oscillant à une dimension x .

- Utilisant $P_n = \frac{1}{Z} \exp(-E_n/(k_B T))$ qui est la probabilité d'occupation du niveau n à la température T (loi de Boltzmann), montrer que l'énergie moyenne de l'atome est $\langle E^{(x)} \rangle = \sum_{n \geq 0} P_n E_n^{(x)} = \frac{k_B \Theta}{2} \coth\left(\frac{\Theta}{2T}\right)$.

(a) Dédurre la capacité calorifique molaire :

$$c(T) = 3R \left(\frac{\Theta}{2T}\right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\Theta}{2T}\right)}, \quad R = \mathcal{N}_A k_B$$

et tracer l'allure de cette courbe. Remarquer que d'après l'expression $\Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B}$, et utilisant la relation $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, un coefficient de raideur k élevé est relié à une valeur Θ élevée. Ainsi cette théorie relie des propriétés d'élasticité ou mécaniques du matériau à des propriétés calorifiques. Par exemple pour le diamant qui est dur, $\Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k} = 1320K$. Pour l'or qui est plus mou (k plus faible) on a $\Theta_E = 165K = -108C^\circ$.

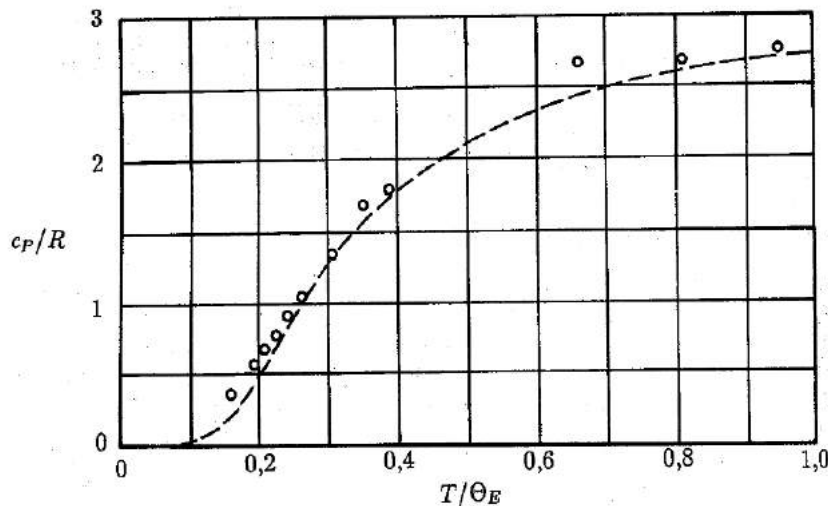


FIGURE 2.2.4 – Capacité calorifique molaire $c(T)$ du diamant, avec $\Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B} = 1320K$. (A.Einstein, Ann. Physik, vol 22, 180, (1907)). La quantification des niveaux d'énergie explique donc que $c(T) \rightarrow 0$ pour $T \ll \Theta_E$.

Remarque : Le modèle de Debye tient compte du couplage entre atomes voisins, les modes de vibration sont donc différents. Mais la méthode et les phénomènes sont les mêmes. Les résultats sont proches.

2.2.4 Application : les modes quantiques du champ électromagnétique dans le vide.

2.2.4.1 Les équations de Maxwell dans le vide interprétées comme une assemblée d'oscillateurs harmoniques

Bien que le modèle de l'oscillateur harmonique soit simple, il se trouve être utilisé pour décrire la dynamique du champ électromagnétique $(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t))$ dans le vide, c'est à dire en négligeant le couplage à tout autre champ comme un champ de matière chargée.

Rappels d'électromagnétisme : (cours de Licence 3)

Les équations de Maxwell sont des équations linéaires par rapport aux variables (\vec{E}, \vec{B}) (et leurs dérivées partielles). Le champ électromagnétique forme un système dynamique avec **un nombre infini de degrés de liberté**. Lorsque l'on résout les équations de Maxwell, on isole les degrés de liberté indépendants. **Un degré de liberté indépendant du champ électromagnétique dans le vide est une onde plane** caractérisée par son vecteur d'onde $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$, et sa polarisation (droite ou gauche). Nous montrons maintenant que la dynamique (linéaire) de **cette onde plane s'identifie à la dynamique d'un oscillateur harmonique**.

Pour démarrer rappelons-nous d'un résultat d'électromagnétisme (voir [Jac75] par exemple), qu'une onde plane dans le vide, de vecteur d'onde $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ et de polarisation circulaire gauche a pour expression (avec $\vec{x} \equiv (x, y, z)$) :

$$\begin{aligned} E_x(\vec{x}, t) &= \mathbf{E} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}) \\ E_y(\vec{x}, t) &= -\mathbf{E} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}) \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

où $\mathbf{E} > 0$ est l'amplitude. Donc

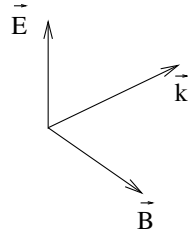
$$\begin{cases} \frac{\partial E_x}{\partial t} = \omega E_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} = -\omega E_x \end{cases}$$

La norme de \vec{k} est reliée à la fréquence ω de l'onde par

$$k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}.$$

Le champ $\vec{B}(\vec{x}, t)$ quant à lui est complètement spécifié par

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} \left(\frac{\vec{k}}{k} \wedge \vec{E}(\vec{x}, t) \right)$$


 FIGURE 2.2.5 – Triade des vecteurs $\vec{k}, \vec{E}, \vec{B}$ orthogonaux pour une onde plane.

C'est à dire que $\vec{k}, \vec{E}, \vec{B}$ forment une base orthogonale directe, et

$$B_y(\vec{x}, t) = -\frac{1}{c}E_x, \quad B_x(\vec{x}, t) = \frac{1}{c}E_y.$$

La densité volumique d'énergie de l'onde plane est

$$H = \frac{\varepsilon_0}{2} (E^2(\vec{x}, t) + c^2 B^2(\vec{x}, t)) = \varepsilon_0 \mathbf{E}^2 = \varepsilon_0 (E_x^2 + E_y^2)$$

et sa densité d'impulsion est donnée par le vecteur de Poynting :

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{x}, t) \wedge \vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{\varepsilon_0}{c} \mathbf{E}^2 \begin{pmatrix} \vec{k} \\ \vec{k} \end{pmatrix}$$

(Remarquer la relation relativiste $H^2 - P^2 c^2 = 0$ entre l'énergie et l'impulsion).

D'après ci-dessus la dynamique de l'onde plane, se représente à \vec{x} fixé, par un **mouvement circulaire** dans le plan (E_x, E_y) (ou (B_x, B_y)).

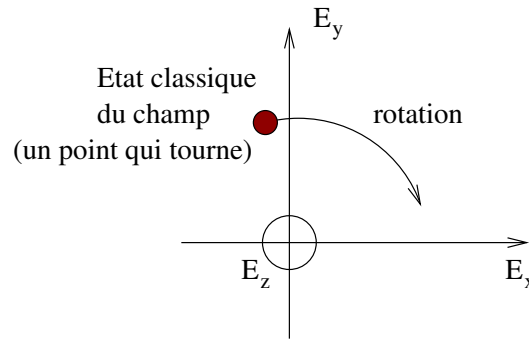


FIGURE 2.2.6 –

Cela fait naturellement penser à la dynamique de l'oscillateur harmonique dans le plan $(q(t), p(t))$. Pour préciser cette formulation, choisissons un point de référence, par exemple l'origine $\vec{x} = 0$, et définissons :⁶

$$q(t) = \frac{\sqrt{2\varepsilon_0}}{\omega} E_x(0, t), \quad p(t) = \sqrt{2\varepsilon_0} E_y(0, t). \quad (2.2.23)$$

6. Pour procéder systématiquement, posons $q = \alpha E_x$ et $p = \beta E_y$, avec α, β inconnus. On a $dE_x/dt = \omega E_y$, $dE_y/dt = -\omega E_x$ et $H = \varepsilon_0 (E_x^2 + E_y^2)$. Donc $dq/dt = (\alpha\omega/\beta)p$ et $dp/dt = -(\beta\omega/\alpha)q$. On voudrait $dq/dt = p$ et $dp/dt = -\omega^2 q$ et $H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2)$. On déduit que $\alpha = \sqrt{2\varepsilon_0}/\omega$ et $\beta = \alpha\omega = \sqrt{2\varepsilon_0}$.

Alors on vérifie que l'on a bien les relations définissant la dynamique d'un oscillateur de fréquence ω :

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= p(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \frac{dp}{dt} &= -\omega^2 q = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{aligned}$$

Pour le mode de polarisation circulaire droite, la démarche est identique, il suffit d'inverser le rôle de E_x et E_y .

D'un point de vue dynamique, le rayonnement électromagnétique classique dans le vide est donc équivalent à une assemblée d'oscillateurs harmoniques. Il y a une infinité de variables (q, p) différentes et indépendantes, pour chacun des modes (ou onde plane) :

$$\text{mode} \equiv \left(\vec{k} \in \mathbb{R}^3, \text{polarisation} = \pm 1 \right)$$

Globalement, l'espace des phases classique est donc

$$\mathcal{P}_{\text{phase}} = 2 \bigoplus_{\vec{k} \in \mathbb{R}^3} \mathbb{R}_{q_k, p_k}^2$$

et le Hamiltonien classique est la fonction suivante sur $\mathcal{P}_{\text{phase}}$:

$$H = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{R}^3} \frac{1}{2} (p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2)$$

avec $\omega_k = c |\vec{k}|$. Noter que la décomposition d'une onde en ondes planes est similaire à la décomposition de Fourier d'une fonction en modes de Fourier.

2.2.4.2 Quantification du champ électromagnétique

Bien qu'il s'agisse d'une onde, **le champ électromagnétique de Maxwell est de nature classique** et non quantique (l'onde n'exprime pas une amplitude de probabilité de présence d'une particule). Mais comme nous le ferons remarquer ultérieurement (page 168), pour la cohérence interne de la physique, il est nécessaire de considérer que **le champ classique n'est que "l'apparence classique" d'un objet quantique "le champ électromagnétique quantique"** (essentiellement cela correspond à considérer des superpositions quantiques de différentes configurations de champ électromagnétique).

Les expériences confirment tout à fait l'existence de ce champ quantique. Les manifestations sont nombreuses et les plus simples (à l'origine de la découverte de la mécanique quantique d'ailleurs) sont

- l'**effet photo-électrique** (émission d'un électron par un matériau soumis à la lumière).
- le **rayonnement du corps noir**. (Voir page 133).

La théorie quantique du champ électromagnétique dans le vide est très simple, il suffit de considérer que l'oscillateur harmonique décrivant une onde plane est un oscillateur harmonique quantique comme (2.2.1) page 98.

L'état quantique d'un mode donné $mode \equiv (\vec{k}, pol)$ est décrit par une fonction d'onde $\psi(q)$ de la variable dynamique q . La dynamique n'est donc plus celle d'un point dans le plan ($q \propto E_x, p \propto E_y$), eq.(2.2.23), mais d'une onde ("une onde quantique d'ondes électromagnétiques classiques").

L'espace quantique total du champ électromagnétique est

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{\vec{k} \in \mathbb{R}^3} (L^2(\mathbb{R}_{q_k}) \otimes \mathbb{C}^2)$$

où $L^2(\mathbb{R}_{q_k})$ est l'espace de Hilbert d'un oscillateur harmonique du mode \vec{k} et \mathbb{C}^2 est pour l'état de polarisation. (On verra plus loin pourquoi c'est un produit tensoriel).

2.2.4.3 Une onde classique est un paquet d'onde quantique

Essayons de donner un sens physique à cette onde $\psi(q)$. Par exemple le faisceau monochromatique issue d'un **Laser** que l'on décrit de façon idéale par l'onde plane classique (1.1.3), c'est à dire par le point de la figure (2.2.6), est dans la description quantique plutôt un **paquet d'onde quantique** centré sur ce point. On l'appelle aussi **état cohérent du champ**. Ce n'est donc pas un état stationnaire.

La largeur du paquet d'onde s'appelle fluctuations quantique du champ électromagnétique. Précisément, le principe d'incertitude (1.6.10) $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$, donne pour une onde plane selon z , d'après (2.2.23) :

$$(\Delta E_x)(\Delta E_y) \geq \frac{\hbar\omega}{4\epsilon_0}$$

2.2.4.4 Les photons

Un état quantique stationnaire de l'oscillateur harmonique est de la forme $|n\rangle = |\psi_n\rangle$ avec $n = 0, 1, 2, \dots$, décrit en (2.2.18), et d'énergie :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

On appelle cet état quantique $|n\rangle$ un **état à n photons du mode** $mode \equiv (\vec{k}, pol)$.

Lorsque un atome se désexcite en émettant un photon dans le vide, il crée l'état $|n = 1\rangle$ pour un mode donné.

Si l'espace environnant contient déjà n photon (état $|n\rangle$), alors l'atome rajoute un photon, et il y a transition $|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$. L'énergie de ce photon supplémentaire est

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega = h\nu \quad : \text{énergie d'un photon de fréquence } \omega$$

avec $h = 2\pi\hbar$ et $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$.

Remarquer que la fonction d'onde $\varphi(q)$ d'un état stationnaire $|n\rangle$ est une fonction d'Hermite. Comme $q \simeq E_x$ cette fonction d'onde est délocalisée dans les variables champs électrique et magnétique. Pour cette raison, l'état idéal $|n\rangle$ n'existe pas longtemps : la décohérence (couplage à l'environnement) détruit rapidement un état $|n\rangle$ pour le transformer plutôt en paquet d'onde, contenant aussi n photons mais seulement en moyenne (c'est à dire de même énergie moyenne E_n).⁷

2.2.4.5 Le vide quantique du champ électromagnétique

Si l'espace vide est dans son état d'énergie minimal, chaque mode est dans l'état $|n=0\rangle$. On appelle ces états sans photon, **le vide quantique du champ électromagnétique** :

$$|Vide\rangle \equiv (|0_{mode_1}\rangle \otimes \dots \otimes |0_{mode_k}\rangle \otimes \dots)$$

Ce qui est surprenant est qu'en mécanique quantique, ce "vide" est un état comme un autre (une fonction d'onde non nulle). Seulement c'est l'état fondamental stationnaire, il n'évolue donc pas, et ne peut fournir d'énergie. Pour cette raison il semble indétectable.

Une difficulté qui apparaît cependant est que son énergie est $\frac{1}{2}\hbar\omega$ pour chaque mode, et il y a une infinité de modes. D'après (2.3.3) page 132, un mode ondulatoire occupe le volume $(2\pi)^3$ dans l'espace (\vec{x}, \vec{k}) où \vec{k} est le vecteur d'onde. Autrement dit le nombre de modes dans $d^3\vec{x}d^3\vec{k}$ est $dn = \left(\frac{d^3\vec{x}d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\right)$. Donc dans un volume V et pour un intervalle de fréquences $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$, l'énergie du vide est (on somme la contribution $(\frac{1}{2}\hbar\omega)$ de chaque mode)

$$E_{vide} = 2 \int \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) dn = 2 \int \left(\frac{d^3\vec{x}d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\right) \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) = \frac{4\pi V\hbar}{(2\pi)^3 c^3} \int_{\omega_1}^{\omega_2} \omega^3 d\omega = \frac{V\hbar}{8\pi^2 c^3} (\omega_2^4 - \omega_1^4)$$

le facteur 2 est pour les deux états de polarisation, et on utilisé $\omega = ck$, et

$$d^3\vec{k} = |k^2|dk (\sin\theta d\theta d\varphi) = \frac{1}{c^3}\omega^2 d\omega (\sin\theta d\theta d\varphi).$$

Par exemple dans un volume $V = 1 m^3$, pour le spectre visible $\lambda = 0,4 \rightarrow 0,8 \mu m$, $\omega_1 = ck_1 = \frac{c2\pi}{\lambda_1} = 2,3 \cdot 10^{15} Hz$, $\omega_2 = 4,7 \cdot 10^{15} Hz$, l'énergie du vide est

$$E_{vide} = \frac{\hbar}{8c\pi^2} (\omega_2^4 - \omega_1^4) \simeq 2 \cdot 10^{19} J/m^3$$

7. Des expériences remarquables, étudient des états $|n\rangle$ à n photons dans une cavité de miroirs, et observent à quelle vitesse la décohérence les transforme en paquet d'ondes localisés. Voir Aroche et al.

ce qui est énorme !

L'énergie du vide par unité de volume (et sur toutes les fréquences) est

$$\mathcal{E}_{vide} = \frac{\hbar}{8c^3\pi^2} [\omega^4]_0^{\omega_c \rightarrow +\infty} \xrightarrow{\omega_c \rightarrow \infty} +\infty$$

ce qui montre que en principe cette **densité énergie est infinie** à cause des modes de hautes fréquence.

La divergence de \mathcal{E}_{vide} s'appelle **la catastrophe ultraviolette** en théorie quantique des champs. Comme il s'agit d'énergie par unité de volume, il y a une deuxième divergence pour l'énergie du vide dans l'univers, si celui-ci a un volume infini. On appelle cette seconde divergence la **catastrophe infra-rouge**. Depuis le début de la mécanique quantique, ces divergences montrent un obstacle à la compréhension parfaite de la physique des champs quantiques. On pense par exemple que les longueurs d'ondes des ondes électromagnétique ne peuvent être plus petites qu'une échelle encore inconnue (taille des cordes ?), et cela mettrait une limite ω_c à l'intégrale divergente.

Il y a des spéculations disant que cette énergie du vide "très grande" pourrait être relié à une énigme en cosmologie que l'on appelle **l'énergie noire**. Il semblerait en effet d'après des observations, que 70% de l'énergie contenue dans l'univers⁸ et participant à son expansion serait une énergie de nature encore inconnue et reliée à la valeur de la constante cosmologique dans la théorie de la relativité générale. Pourtant l'énergie du vide quantique du champ électromagnétique et des autres champs est trop grande (malgré ω_c) pour expliquer la constante cosmologique. Voir "Pour la science" mars 2003.

Malgré ces difficultés, la théorie quantique des champs est considérée comme un grand succès de la science, car on arrive à se "débarasser" de ces infini par un argument appelé **renormalisation**, et prédire des phénomènes expérimentaux très précis. Un des résultats les plus remarquables est le calcul du **facteur gyromagnétique de l'électron**, voir (4.9.2, page 196) :

$$\frac{g_{\text{expérimental}} - 2}{2} = 0.001\,159\,652\,153\,5(240)$$

$$\frac{g_{\text{théorique}} - 2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,85(76)$$

(Voir wikipedia "moment magnétique anormal").

La section suivante donne un exemple de calcul en théorie quantique des champs où l'on parvient à prédire des effets physiques, malgré la divergence ultra-violette.

8. (Référence : article dans "Pour la science", mars 2003). Contenu en énergie/matière que l'on suppose y avoir dans l'univers qui semble être plat à grande échelle (courbure nulle) :

- 0.01 % de photons
- 0.01 à 2 % de neutrinos
- 5 à 6 % de baryons
- 25 % de matière noire (matière non identifiée) qui a une action gravitationnelle, en particulier pour le mouvement de rotation des galaxies.
- 70 % "d'énergie noire" (non identifiée, mais correspondant à la constante cosmologique des équations d'Einstein, nécessaire pour la courbure nulle de l'univers)

2.2.5 Un effet surprenant du “vide quantique” de photons : la force de Casimir (1948)

Référence : Milonni p.54 [Mil94].

Il s’agit d’une manifestation de la présence du vide quantique de photons, calculée par Casimir en 1948, et observée en 1958 par Sparnay, et encore récemment avec une grande précision.

Considérons deux plaques métalliques (conducteurs parfaits) de surface S , très proches, d’une distance $l \simeq 1\mu m$.

On va montrer que le vide quantique électromagnétique induit une force attractive entre ces deux plaques, appelée **force de Casimir** :

$$F_{Casimir}(l) = - \left(\frac{\pi^2 \hbar c}{240 l^4} \right) S \quad (2.2.24)$$

Remarquer que cette force décroît très vite avec la distance (en $1/l^4$), et que son expression fait intervenir seulement les constantes fondamentales $\hbar c$. Sa valeur est très faible :

$$F_{Casimir} \simeq 10^{-7} N \text{ pour } l = 1\mu m \text{ et surface } S = 1cm^2.$$

Pour justifier cette force, l’idée simple est que comme les plaques sont conductrices et non chargées, les champs électriques s’annulent à leur surface, et donc les seuls modes électromagnétiques qui peuvent exister dans l’espace les séparant, sont ceux de longueur d’onde λ selon z (direction transverse) tel que $l = n(\lambda/2)$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Il y en a un nombre infini et donc l’énergie du vide $\mathcal{E}(l)$ entre les deux plaques est infinie.

Considérons une plaque à la position l , libre de bouger selon z , dans une enceinte de longueur L . Voir figure (2.2.7).

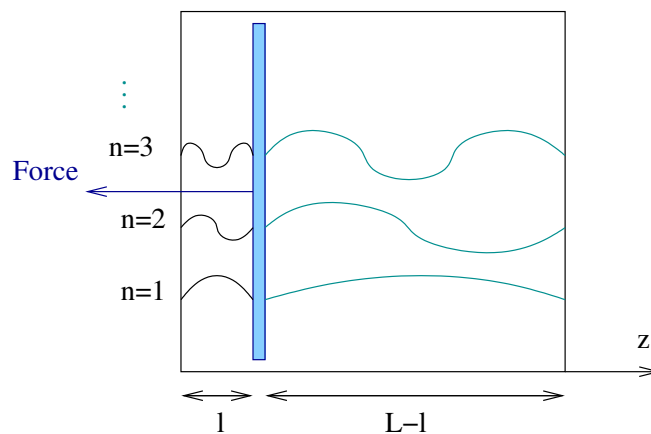


FIGURE 2.2.7 – Miroir libre de bouger selon z dans une enceinte aux murs réfléchissants. Le vide quantique des modes électromagnétiques $n = 1, 2, 3 \dots$ est responsable de la force de Casimir.

L'énergie interne de l'enceinte est $U(l) = \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l)$. La force de Casimir exercée sur la plaque est alors $F_{Casimir}(l) = -\frac{dU}{dl}$. On calcule ci-dessous que cette force est finie.

Pour montrer que la différence est finie, malgré le nombre infini de modes, on introduit une fréquence de coupure ω_c arbitraire, qui stoppe la divergence de l'intégrale, et rend toutes les quantités finies (mais divergentes si $\omega_c \rightarrow \infty$). Seulement à la fin du calcul on fait $\omega_c \rightarrow \infty$, et l'on observe étonnement que $F_{Casimir}(l)$ ne diverge pas. Physiquement, cette fréquence de coupure peut être la fréquence de coupure dans les métaux, appelée aussi fréquence plasma (pour $\omega < \omega_c$ le métal est réfléchissant, et pour $\omega > \omega_c$ le métal est transparent).

Exercice 2.2.8. Soit une boîte rectangulaire aux parois conductrices, de côtés $L_x = L_y$ et d'épaisseur très fine $L_z = l \ll L_x$. Exprimer les vecteurs d'ondes $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ des modes pouvant exister dans cette cavité. Dédire une expression formelle de l'énergie du vide quantique électromagnétique dans cette cavité $\mathcal{E}(l)$, comme somme sur ces modes (en tenant compte des deux états de polarisation possibles). Quelle est l'origine de la divergence de $\mathcal{E}(l)$?

On introduit une **fréquence de coupure** ω_c et on décide de tronquer les hautes fréquences en introduisant le facteur $\exp(-\omega/\omega_c)$ qui rend l'expression de $\mathcal{E}(l)$ convergente. Comme $l \ll L_x$, on pourra remplacer la somme sur les modes selon x, y par une intégrale. Montrer que

$$\mathcal{E}(l) = \frac{\hbar c \pi^2 L_x^2}{2l^3} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{1}{x(e^x - 1)} \right)$$

avec $x = \pi c / (\omega_c l)$.

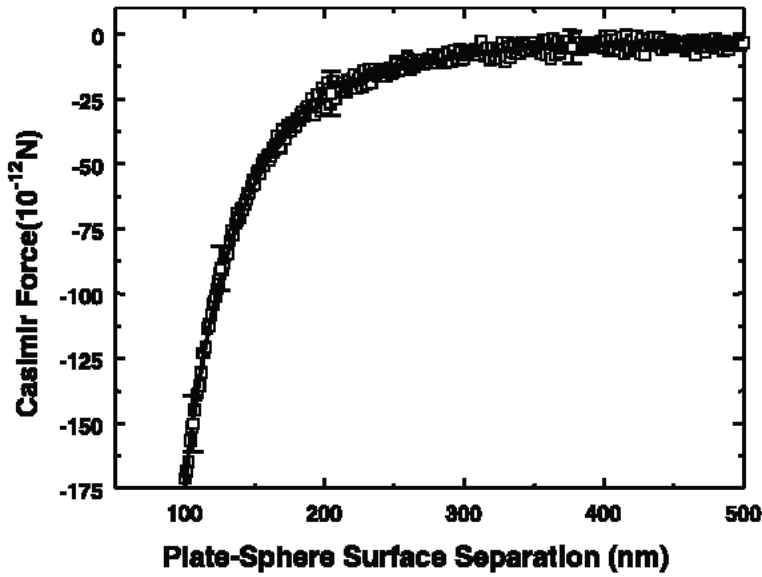
Utiliser l'expansion :

$$\frac{1}{x(e^x - 1)} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{12} - \frac{1}{30.24} x^2 + \mathcal{O}(x^3)$$

pour exprimer l'énergie du vide $\mathcal{E}(l)$ en puissances de ω_c . Montrer que $\mathcal{E}(l)$ diverge comme ω_c^4 dans la limite $\omega_c \rightarrow \infty$, et calculer les termes sous dominants jusqu'au terme fini.

L'énergie dans l'enceinte de largeur $L \ll L_x$ contenant une paroi mobile à la position l a pour énergie $U(l) = \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l)$. Calculer $U(l)$ et déduire l'expression de la force de Casimir $F_{Casimir}(l) = -\frac{dU}{dl}$.

- La force de Casimir est observée expérimentalement avec une très grande précision. Pour cela il faut corriger l'expression (2.2.24), par différents effets : la géométrie des miroirs, la réponse optique des miroirs, et les effets thermiques. Voici une courbe qui compare la théorie et les mesures expérimentales, obtenue par A.Roy, C. Lin, U.Mohideen, Phys.Rev.D vol.60, p.,111101, (1999) :



- Dans le calcul ci-dessus de la force de Casimir, on a choisi une fonction de troncation $e^{-\omega/\omega_c}$. Le résultat ne dépend pas du choix de cette fonction, voir Milonni [Mil94] (faire exercice @@).
- On peut obtenir l'expression de la force de Casimir, sans utiliser l'énergie du vide, mais la pression de radiation (l'impulsion) des fluctuations du vide sur le miroir. Voir Milonni [Mil94]. Faire exercice @@

2.2.6 (*) Les états cohérents et leur évolution par l'oscillateur harmonique

On a obtenu que l'état fondamental de l'oscillateur Harmonique $|0\rangle = |\psi_0\rangle$ en eq.(2.2.16) page (105), est ni plus ni moins qu'un paquet d'onde Gaussien $|q_0, p_0, \sigma\rangle$, eq.(1.1.6) avec $q_0 = 0$, $p_0 = 0$ et de largeur $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Autrement dit :

$$|0\rangle = (|x_0 = 0, p_0 = 0, \sigma\rangle)$$

Nous avons déjà observé sur les calculs numériques, que lors de l'évolution, un paquet d'onde Gaussien se déplace, mais reste un paquet d'onde Gaussien, de façon complètement analogue à une particule classique. Voir figures 1.3.1, 1.3.3. Nous allons le démontrer ici.

2.2.6.1 Expression algébrique d'un paquet d'onde gaussien

Dans tout ce paragraphe, le paramètre $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$ qui est la largeur du paquet d'onde est fixé. On omet de le mentionner.

Les coordonnées (q, p) et (Q, P) sont reliées par (2.2.7). On utilisera les coordonnées (Q, P) sans dimension dans la suite.

Proposition 2.2.9. *Le paquet d'onde $|Q, P\rangle$ défini par (1.1.6), s'obtient à partir de l'état $|0\rangle$ par action des opérateurs de translation en position $\hat{T}_Q = \exp(-iQ\hat{P})$ et de translation en impulsion $\hat{B}_P = \exp(iP\hat{Q})$, définis par (2.1.13) :*

$$|Q, P\rangle = \hat{B}_P \hat{T}_Q |0\rangle$$

En utilisant la coordonnée complexe :

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \in \mathbb{C} : \text{ point de l'espace de phase}$$

on a aussi

$$|Q, P\rangle = \exp\left(\frac{iPQ}{2}\right) \hat{D}(z)|0\rangle$$

où

$$\hat{D}(z) = \exp(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}) = \exp(za^+ - \bar{z}a) \quad (2.2.25)$$

est l'opérateur déplacement sur l'espace de phase, voir figure 2.2.8.

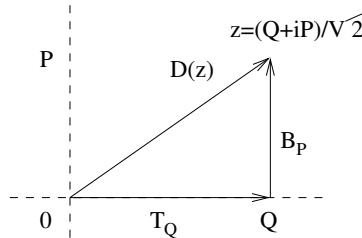


FIGURE 2.2.8 – Schéma du déplacement de $z = (Q + iP)/\sqrt{2} \in \mathbb{C}$ dans l'espace de phase, engendré par l'opérateur $\hat{D}(z)$.

Pour simplifier la suite, on utilise la coordonnée complexe $z \in \mathbb{C}$ qui est plus commode, et l'on pose (on change seulement une phase dans la définition du paquet d'onde) :

$$|z\rangle := \exp\left(-i\frac{PQ}{2}\right) |Q, P\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle \quad (2.2.26)$$

Démonstration. on a énoncé cette propriété car elle est intuitive. Elle devrait même servir à

définir un paquet d'onde Gaussien de position moyenne x_0 , et d'impulsion moyenne p_0 . On calcule :

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{B}_{p_0} \hat{T}_{x_0} | 0 \rangle &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \langle x | \hat{T}_{x_0} | 0 \rangle \\ &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \langle x - x_0 | 0 \rangle \\ &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{\pi \sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x - x_0)^2\right) \\ &= \langle x | x_0, p_0 \rangle \end{aligned}$$

On a utilisé 2.1.11. Ensuite, on a

$$\exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \hat{B}_p \hat{T}_q = \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp\left(za^+ - \bar{z}a\right)$$

en utilisant la relation (A.2.1), qui s'applique car $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$, $[a, a^+] = Id$. □

2.2.6.2 Évolution d'un paquet d'onde gaussien

Supposons que à l'instant $t = 0$, la fonction d'onde est un paquet d'onde Gaussien $|\psi(0)\rangle = |z_0\rangle$ avec $z_0 \in \mathbb{C}$, alors à l'instant t , la fonction d'onde est d'après (2.1.2) :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |z_0\rangle$$

avec $\hat{U}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)$. Or pour l'oscillateur Harmonique, on a $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \hbar\omega (a^+a + \frac{1}{2}Id) = \hbar\omega \hat{n}$, avec :

$$\hat{n} = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$$

Alors $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{n}\omega t)$.

En mécanique classique, les points tournent dans l'espace de phase avec la vitesse angulaire ω (dans le sens indirect). Nous allons voir que la situation est similaire en mécanique quantique, et posons à cet effet :

$$\hat{R}(\theta) = \exp(-i\hat{n}\theta)$$

On va montrer que c'est l'**opérateur de rotation dans l'espace de phase**, d'un angle θ , dans le sens indirect. On a $\hat{U}(t) = \hat{R}(\omega t)$.

Proposition 2.2.10. *On a la relation :*

$$\hat{R}(\theta) \hat{D}(z) = \hat{D}(e^{-i\theta}z) \hat{R}(\theta) \tag{2.2.27}$$

Cette relation entre les déplacements et les rotations est intuitive car elle est aussi vraie en mécanique classique. Voir figure 2.2.9.

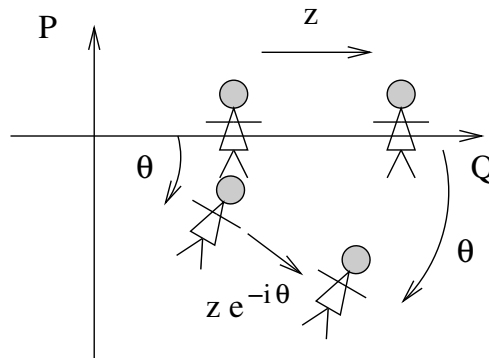


FIGURE 2.2.9 – Cette figure montre que sur le plan $z \in \mathbb{C}$, on a $R(\theta) D(z) = D(e^{-i\theta}z) R(\theta)$, où R est une rotation, et $D(z)$ un déplacement de z . En effet $D(z) : X \rightarrow X + z$, et $R(\theta)$ est linéaire donc pour tout point X , $R(\theta) D(z) X = R(\theta) (X + z) = R(\theta) X + R(\theta) z = D(R(\theta) z) R(\theta) X = D(e^{-i\theta}z) R(\theta) X$.

Démonstration. voir exercice page 129. ou de façon plus élégante avec le Lemme de Shur, voir Segal p.129 [Seg95].

□

Proposition 2.2.11. *On a*

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |z_0\rangle = \exp\left(-i\frac{1}{2}\omega t\right) |z(t)\rangle$$

avec

$$z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

montrant que l'état $|\psi(t)\rangle$ est à tout moment un paquet d'onde $|z(t)\rangle$ situé à l'emplacement de la particule classique. Le paquet d'onde se déplace donc sur un cercle dans l'espace de phase, sans se déformer. Voir figures 1.3.1, 1.3.3 page 32, et figure (2.2.10).

Pour cette raison, on appelle aussi un paquet d'onde Gaussien, un **état cohérent**, (ou plus précisément état cohérent du groupe de l'oscillateur Harmonique).

Démonstration. On a

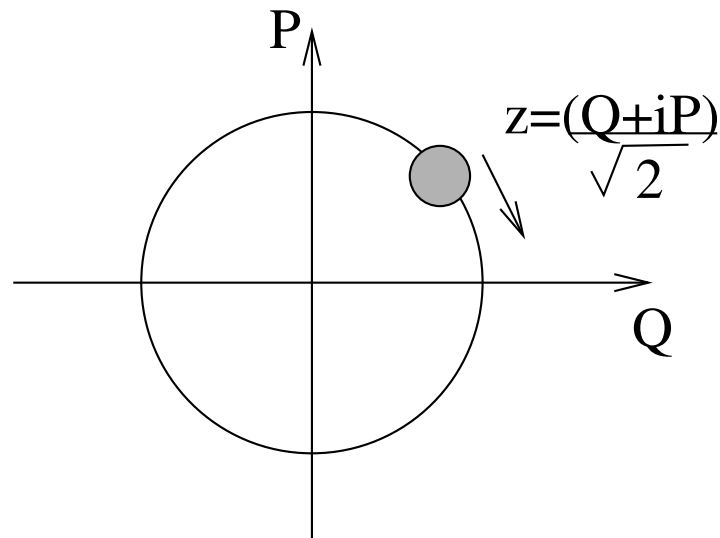
$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}(\omega t) \hat{D}(z_0) |0\rangle = \hat{D}(e^{-i\omega t} z_0) \hat{R}(\omega t) |0\rangle$$

Or $\hat{R}(\theta) |0\rangle = e^{-i\theta/2} e^{-ia^+ a \theta} |0\rangle$. Mais $a^+ a |0\rangle = 0$, donc $e^{-ia^+ a \theta} |0\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} (-ia^+ a \theta)^n |0\rangle = |0\rangle$.
Donc

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} D(e^{-i\omega t} z_0) |0\rangle = e^{-i\omega t/2} |z(t)\rangle$$

avec $z(t) = e^{-i\omega t} z_0$.

□

FIGURE 2.2.10 – Évolution du paquet d'onde : $|z(t)\rangle$, avec $z(t) = z(0) e^{-i\omega t}$

2.2.6.3 Algèbre et groupe de Weyl-Heisenberg (*)

Dans cette section, on présente de façon plus complète (et dans le langage de la théorie des groupes), les opérations de translation dans l'espace de phase utilisées ci-dessus.

On a vu page 102, que les opérateurs $\hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$, avec la relation de commutation $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$, forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 3, appelée **algèbre de Weyl-Heisenberg**, notée \mathcal{W} . Un élément quelconque de cette algèbre peut s'écrire comme combinaison linéaire :

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} \in \mathcal{W}, \quad (\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{R}^3$$

(Remarquer que \hat{A} est un opérateur auto-adjoint).

Remarque : les trois opérateurs a, a^+, \hat{I} sont une autre base de cette même algèbre, mais avec des coefficients complexes (donc ce ne sont pas des opérateurs auto-adjoints; ils appartiennent à l'**algèbre de Lie complexifiée**).

Proposition 2.2.12. *Les opérateurs $\hat{A} \in \mathcal{W}$ sont les générateurs d'un groupe appelé le **groupe de Weyl-Heisenberg** noté W . Les éléments de ce groupe (qui sont des opérateurs unitaires) sont obtenus en prenant l'exponentielle d'un élément de l'algèbre (d'un générateur) :*

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{A}) = \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I}\right)\right) \in W, \quad (2.2.28)$$

(La propriété que ces opérateurs forment un groupe signifie qu'ils vérifient les 3 règles énoncés page 90. La moins évidente de ces propriétés est la loi composition qui est que si $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in W$ alors le produit $\hat{U}_3 = \hat{U}_2\hat{U}_1 \in W$ c'est à dire est aussi de la forme (2.2.28). (Cette propriété découle d'un théorème important et très général : les opérateurs obtenus en prenant l'exponentielle des éléments d'une algèbre de Lie d'opérateurs \mathcal{G} (et aussi multiplication par certains éléments : le centre de G), forment un groupe de Lie G .) De plus l'élément $\hat{U} \in W$ ci-dessus peut s'écrire aussi :

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \exp(-i\gamma + i\alpha\beta/2) \exp(-i\alpha\hat{Q}) \exp(-i\beta\hat{P}) \\ &= e^{-i\gamma + i\alpha\beta/2} \hat{B}_{-\alpha} \hat{T}_\beta \end{aligned}$$

et s'interprète donc comme un opérateur de translation de $(\beta, -\alpha)$ dans l'espace de phase (le premier terme est juste une phase multiplicative ; on verra son importance et sa signification à la section (2.3.3)).

Démonstration. Utiliser la relation (A.2.1), qui s'applique car $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$. Pour la dernière formule, on a $[-i\alpha\hat{Q}, -i\beta\hat{P}] = -i\alpha\beta\hat{I}$ et

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I}\right)\right) = e^{-i\gamma} \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P}\right)\right) \\ &= e^{-i\gamma} e^{i\alpha\beta/2} \exp\left(-i\alpha\hat{Q}\right) \exp\left(-i\beta\hat{P}\right) \end{aligned}$$

Vérifions les trois règles page 90, permettant d'affirmer que les opérateurs de la forme (2.2.28) forment un groupe de Lie de dimension 3. Tout d'abord la loi de composition : si $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in W$ alors le produit s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{U}_3 &= \hat{U}_2\hat{U}_1 = e^{-i\gamma_2} \exp\left(-i\left(\alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right)\right) e^{-i\gamma_1} \exp\left(-i\left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P}\right)\right) \\ &= e^{-i\gamma_1 - i\gamma_2} \exp\left(i\left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)\right) \exp\left(-i\left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P} + \alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right)\right) \end{aligned}$$

où on a utilisé (A.2.1) et $\left[\left(\alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right), \left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P}\right)\right] = i\left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)\hat{I}$. Donc $\hat{U}_3 \in W$, avec

$$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2, \quad \beta_3 = \beta_1 + \beta_2, \quad \gamma_3 = \gamma_1 + \gamma_2 - \left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)$$

On verra le sens physique de cette phase $(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2)$ à la section (2.3.3).

L'élément neutre est $\hat{I} \in W$, et pour $\hat{U} \in W$, son inverse est $\hat{U}^{-1} = \exp\left(-i\left(-\alpha\hat{Q} - \beta\hat{P} - \gamma\hat{I}\right)\right) \in W$. Donc les opérateurs de la forme (2.2.28) forment bien un groupe de Lie de dimension 3. \square

Exercice 2.2.13.

1. Montrer que l'opérateur déplacement dans l'espace de phase, noté $\hat{D}(z)$, défini en (2.2.25) (et figure 2.2.8) appartient au groupe de Weyl-Heisenberg W , et montrer les expressions équivalentes suivantes pour cet opérateur :

$$\hat{D}(z) = \exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \exp\left(iP\hat{Q}\right) \exp\left(-iQ\hat{P}\right) = \exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \hat{B}_p \hat{T}_q \quad (2.2.29)$$

$$= \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp\left(za^+ - \bar{z}a\right) \quad (2.2.30)$$

$$= \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp\left(za^+\right) \exp\left(-\bar{z}a\right) \quad (2.2.31)$$

$$= \exp\left(\frac{|z|^2}{2}\right) \exp\left(-\bar{z}a\right) \exp\left(za^+\right) \quad (2.2.32)$$

- (a) Dédurre les expressions suivantes pour un paquet d'onde Gaussien :

$$\begin{aligned} |x_0, p_0\rangle &= \hat{B}_{p_0} \hat{T}_{x_0} |0\rangle \\ &= \exp\left(iP\hat{Q}\right) \exp\left(-iQ\hat{P}\right) |0\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{PQ}{2}\right) \hat{D}(z) |0\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{PQ}{2}\right) \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp\left(za^+\right) |0\rangle \end{aligned}$$

Remarquer que la phase $\exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right)$ fait intervenir la surface $S = (QP)/2$ dans l'espace de phase, voir figure 2.2.8. La notation complexe $z = (Q + iP)/\sqrt{2} \in \mathbb{C}$ permet d'identifier l'espace de phase avec le plan complexe.

- (b) Montrer que :

$$a|q_0, p_0\rangle = z|q_0, p_0\rangle$$

ainsi un paquet d'onde Gaussien est vecteur propre de l'opérateur a , avec la valeur propre $z \in \mathbb{C}$. Remarquer que cette valeur propre n'est pas réelle, et que l'opérateur a n'est pas auto-adjoint.

2.2.6.4 Algèbre et groupe de l'oscillateur Harmonique (*)

Il s'agit du groupe des déplacements dans l'espace de phase : translations et rotation (quantiques). Rappel : on pose $\hat{n} = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right)$. On a vu page 102, que les

opérateurs $\hat{n}, \hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$, avec les relations de commutation (2.2.10), forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 4, appelée **algèbre de l'oscillateur Harmonique**, notée \mathcal{O} . Un élément quelconque de cette algèbre peut s'écrire comme combinaison linéaire :

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n} \in \mathcal{O}, \quad (\alpha, \beta, \gamma, \theta) \in \mathbb{R}^3$$

(Remarquer que \hat{A} est un opérateur auto-adjoint).

Remarque : les trois opérateurs a, a^+, \hat{I}, \hat{n} sont une autre base de cette même algèbre mais avec des coefficients complexes (donc ce ne sont pas des opérateurs auto-adjoints ; ils appartiennent à l'**algèbre de Lie complexifiée**). Dans cette base les relations de commutation sont (2.2.15).

Proposition 2.2.14. *Les opérateurs $\hat{A} \in \mathcal{O}$ sont les générateurs d'un groupe appelé le **groupe de l'oscillateur Harmonique** noté O . Les éléments de ce groupe (qui sont des opérateurs unitaires) sont obtenus en prenant l'exponentielle d'un élément de l'algèbre (d'un générateur) :*

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{A}) = \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n}\right)\right) \in O, \quad (2.2.33)$$

(La propriété que ces opérateurs forment un groupe signifie qu'ils vérifient les 3 règles énoncés page 90. La moins évidente de ces propriétés est la loi composition qui est que si $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in O$ alors le produit $\hat{U}_3 = \hat{U}_2\hat{U}_1 \in O$ c'est à dire est aussi de la forme (2.2.33)).

De plus l'élément $\hat{U} \in O$ ci-dessus peut s'écrire aussi :

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \exp(-i\gamma'\hat{I}) \exp(-i\alpha'\hat{Q}) \exp(-i\beta'\hat{P}) \exp(-i\theta\hat{n}) \\ &= e^{-i\gamma'} \hat{B}_{-\alpha'} \hat{T}_{\beta'} \hat{R}_\theta \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

avec (en posant $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta - i\alpha)$ et de même pour z')

$$z' = -i \left(\frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta} \right) z,$$

$$\gamma' = \gamma - \frac{1}{2} \Im(z'^2) + \frac{(\sin \theta - \theta)}{\theta^2} |z|^2$$

L'équation (2.2.34) s'interprète donc comme un opérateur de rotation de l'angle θ suivit d'une translation de $(\beta', -\alpha')$ dans l'espace de phase (le premier terme est juste une phase multiplicative).

Démonstration. Dans cette preuve sous forme d'exercice, on donne aussi une méthode utile permettant de calculer des expressions équivalentes de \hat{U} et généralisable à d'autres groupes (voir [WDG90] pour d'autres exemples). Cette méthode consiste à utiliser un isomorphisme φ de l'algèbre \mathcal{O} qui nous intéresse vers une algèbre de matrice 3×3 (donc simples à utiliser). Cet isomorphisme φ est défini sur les éléments de base (on utilise la base \hat{I}, a, a^+, \hat{n} où les expressions sont plus simples) :

$$\begin{aligned} \varphi(a) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi(a^+) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \varphi(\hat{I}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi(\hat{n}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ainsi chaque élément \hat{A} de l'algèbre \mathcal{O} est tout simplement représenté par une matrice 3×3 . □

Exercice 2.2.15.

1. vérifier que φ est un isomorphisme d'algèbres de Lie (i.e. conserve les commutateurs).
 - (a) De cet isomorphisme, on déduit que par exponentiation, l'algèbre des matrices va engendrer un groupe isomorphe au groupe \mathcal{O} qui nous intéresse. Autrement dit par l'opération $\exp(\cdot)$, l'isomorphisme φ s'étend au groupe \mathcal{O} par : $\varphi(\exp(\hat{A})) = \exp(\varphi(\hat{A}))$, et tout élément du groupe \mathcal{O} est tout simplement

représenté par une matrice 3×3 . Montrer que :

$$\begin{aligned}\varphi\left(\exp\left(-i\alpha'\hat{Q}\right)\right) &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{-i\alpha'}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{4}\alpha'^2 \\ 0 & 1 & \frac{-i\alpha'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \varphi\left(\exp\left(-i\beta'\hat{P}\right)\right) &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{-\beta'}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{4}\beta'^2 \\ 0 & 1 & \frac{\beta'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{2.2.35}$$

$$\begin{aligned}\varphi\left(\exp\left(-i\theta'\hat{n}\right)\right) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta'} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \varphi\left(\exp\left(-i\gamma'\hat{I}\right)\right) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i\gamma' \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{2.2.36}$$

$$\exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n}\right)\right) = \begin{pmatrix} 1 & A & B \\ 0 & e^{-i\theta} & C \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\tag{2.2.37}$$

$$\begin{aligned}A &= i\left(\frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta}\right)\bar{z}, \quad C = -i\left(\frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta}\right)z, \\ B &= -i\gamma - \frac{1}{\theta^2}(1 - i\theta - e^{-i\theta})|z|^2, \quad z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta - 2i\alpha)\beta\end{aligned}\tag{2.2.38}$$

En déduire (2.2.34). Cela clot la démonstration.

Exercice 2.2.16. En utilisant la représentation matricielle ci-dessus, montrer (2.2.27).

Exercice 2.2.17. On pose $r, l, \delta, \eta \in \mathbb{C}$. Montrer les relations suivantes du groupe (complexifié) de l'oscillateur Harmonique :

$$\begin{aligned}&\exp(\delta)\exp(ra^+)\exp(\eta\hat{n})\exp(la) \\ &= \exp(\delta')\exp(l'a)\exp(\eta\hat{n})\exp(r'a^+) \\ &= \exp(\delta')\exp(\eta\hat{n})\exp(la)\exp(r'a^+)\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}r &= r'e^\eta \\ l &= l'e^\eta \\ \delta' &= \delta - rle^{-\eta}\end{aligned}$$

Aide : utiliser la représentation matricielle 3×3 ci-dessus.

2.3 Correspondances classique-quantique à l'aide du paquet d'onde Gaussien

2.3.1 Comptage semi-classique du nombre d'états. La loi de Weyl.

On va établir une formule très simple qui permet d'estimer (approximativement) :

- la position des niveaux d'énergie $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ (les valeurs propres de l'opérateur \hat{H}).
- la densité d'état $\rho(E) = \frac{dn}{dE}$

Pour simplifier on considère un problème à une dimension. Considérons une particule dans un puits de potentiel $V(x)$. En mécanique classique, l'énergie d'un point $(x, p) \in \mathbb{R}^2$ de l'espace de phase est le Hamiltonien :

$$E = H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Pour une énergie E donnée, appelons $S(E)$ la surface occupée par les points (x, p) de l'espace de phase qui ont une énergie inférieure à E , c'est à dire

$$S(E) = \text{Surface} \{(x, p), H(x, p) \leq E\}$$

Voir figure 2.3.1.

Considérons maintenant le Hamiltonien quantique $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ et ses niveaux d'énergie $E_1 \leq \dots \leq E_j \leq \dots$ solution de :

$$\hat{H}\psi_j = E_j\psi_j$$

On souhaite estimer :

$$N(E) := \text{nombre de niveaux } E_j \leq E$$

En mécanique quantique, nous avons vu qu'un paquet d'onde occupe une certaine surface élémentaire dans l'espace de phase, voir figure (1.6.4). Cela découle du principe d'incertitude : $\Delta x \Delta p \simeq 2\pi\hbar$. Admettons pour le moment que cette surface élémentaire appelée **cellule de Planck** est exactement $2\pi\hbar$ (et non $\hbar/2$ par exemple). On déduit que dans la surface $S(E)$, il y a un nombre fini d'états quantiques différents, dont le nombre est estimé à $N(E) \simeq \frac{S(E)}{2\pi\hbar}$. Ce résultat est en fait rigoureux :

Théorème 2.3.1. “Loi de Weyl” (ou Loi de Thomas Fermi) :

$$N(E) = \frac{S(E)}{2\pi\hbar} + \left(\text{corrections en } o\left(\frac{1}{\hbar}\right) \right) \quad (2.3.1)$$

donc la densité d'état est

$$\rho(E) := \frac{dN(E)}{dE} \simeq \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{dS(E)}{dE} \right)$$

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

L'idée de la preuve rigoureuse est donnée ci-dessous.

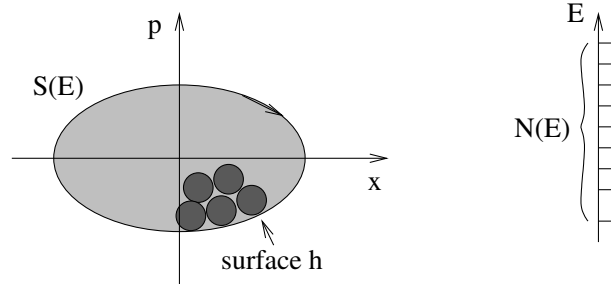


FIGURE 2.3.1 – Pour l'oscillateur harmonique, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, les points (x, p) d'énergie inférieure à $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ forment une ellipse de surface $S(E) = \frac{2\pi E}{\omega}$. (en effet la surface d'une ellipse de $1/2$ grand axe a et $1/2$ petit axe b est $S = \pi ab$. Ici en faisant $p = 0$ dans l'équation $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ on déduit que $a = x = \sqrt{\frac{2E}{k}}$ et en faisant $x = 0$, $b = p = \sqrt{2mE}$ donc $S = \pi \sqrt{\frac{2E}{k}} \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega}$). On estime le nombre de niveaux d'énergie inférieure à E , comme étant le nombre de cellules de Planck de surface h contenue dans $S(E)$. Ainsi $N(E) \simeq S(E)/h$, ce qui donne $E \simeq \hbar\omega N$.

Par exemple pour l'oscillateur Harmonique, on trouve $N(E) \simeq \frac{E}{\hbar\omega}$. Cela permet de d'estimer inversement que l'énergie du niveau n est

$$E_n \simeq \hbar\omega n$$

(C'est presque le résultat exact (2.2.18), sauf le terme $1/2$, ce qui est négligeable si n est grand).

Comparer la facilité avec laquelle on obtient ici ce résultat par rapport à la complexité du calcul algébrique exact page 105.

Remarques :

- (*) La formule (2.3.1) pour un système à 1 degré de liberté est obtenue dans le paragraphe 2.3.3 page 136 à partir de la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld.
- L'étude précédente s'adapte très bien pour des problèmes à plusieurs dimensions (x, y, z) , ou plusieurs particules. Par exemple, pour une particule à trois dimensions, l'espace de phase $(\vec{x}, \vec{p}) = (x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ est de dimension 6. Les points (\vec{x}, \vec{p}) d'énergie inférieure à E donné forment un volume noté $\mathcal{V}(E)$. Le principe d'incertitude est $\Delta x \Delta p_x \simeq 2\pi\hbar$, et $\Delta y \Delta p_y \simeq 2\pi\hbar$, et $\Delta z \Delta p_z \simeq 2\pi\hbar$, donnant une cellule de Planck élémentaire dans l'espace de phase de volume $(2\pi\hbar)^3$. La formule est donc dans ce cas :

$$N(E) \simeq \frac{\mathcal{V}(E)}{(2\pi\hbar)^3} \tag{2.3.2}$$

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathcal{V}}{dE}$$

- Pour un spectre d'énergies, on appelle **densité de niveaux**, le nombre moyen de niveaux par intervalle d'énergie. C'est à dire :

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} : \text{ densite de niveaux}$$

Pour l'oscillateur harmonique, d'après $E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$, on trouve $\rho(E) = \frac{1}{\hbar\omega}$, qui est une constante, montrant que les niveaux d'énergie de l'oscillateur Harmonique sont équidistribués.

- Il est utile de retenir le résultat sous la forme suivante : **à d degrés de liberté, un état quantique occupe le volume h^d dans l'espace de phase $(x, p) \in \mathbb{R}^{2d}$.**
- La densité de niveau est une grandeur très importante en physique statistique par exemple, car la densité de niveaux est reliée aux nombres d'états, ou de configurations, que peut prendre un système près d'une énergie donnée E . Cela est précisément relié à l'**entropie statistique** microcanonique du système, définie par

$$\mathcal{S}(E) = k_B \log(\rho(E)).$$

On calcule ainsi $S(E)$ pour N particules dans une boîte, et on déduit la loi des gaz parfaits $PV = nRT$, en utilisant les définitions de la température : $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ et de la pression $\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}$. (voir [DGLR89]).

- Lorsque $N(E)$ obtenu est un nombre fini, on déduit que le spectre est discret. Cela est possible si $S(E)$ est fini. Comme contre exemple, il y a la particule libre, avec $V = 0$, et ayant un spectre continu. Dans ce cas, pour $E > 0$, la surface dans l'espace de phase $S(E)$ est infinie, car la particule peut partir à l'infini. On explique ainsi le résultat mentionné dans la figure 1.5.2.
- La formule de Weyl semi-classique (2.3.1) dépasse le seul cadre quantique, et **s'applique plus généralement à tout problème ondulatoire** dont les équations sont linéaires (ondes quantiques, ondes électromagnétiques classiques, ondes acoustiques,...), dans le régime semi-classique, c'est à dire lorsque la "longueur d'onde est très petite devant la taille du système". Tenant compte de la relation $p = \hbar k$ entre l'impulsion et le vecteur d'onde, l'énoncé général en mécanique ondulatoire est le suivant. **Un état ondulatoire occupe le volume**

$$\Delta \vec{x} \Delta \vec{k} = (2\pi)^d \tag{2.3.3}$$

dans l'espace de phase $(\vec{x}, \vec{k}) \in \mathbb{R}^{2d}$ à d degrés de liberté.

- On montre diverses applications de cette loi de Weyl ci-dessous (spectre du corps noir, équidistribution de l'énergie des ondes sismiques,...)

Démonstration. (Idée de la preuve de la loi de Weyl) voir [?]. Soit $\hat{\mathcal{P}}_E$ le projecteur spectral sur les états $E_j \leq E$. Son expression est

$$\hat{\mathcal{P}}_E = \sum_{j, E_j \leq E} |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$$

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

On va utiliser que $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle$. Alors

$$\text{Tr}(\hat{\mathcal{P}}_E) = \sum_{j, E_j \leq E} \underbrace{\langle\psi_j|\psi_j\rangle}_1 = N(E)$$

Par ailleurs on admet que l'on a une expression approchée à l'aide des paquets d'ondes (semblable à la relation de fermeture (2.3.4))

$$\hat{\mathcal{P}}_E \simeq \int_{H(x,p) \leq E} |\varphi_{x,p}\rangle\langle\varphi_{x,p}| \frac{dx dp}{2\pi\hbar}$$

Donc

$$N(E) = \text{Tr}(\hat{\mathcal{P}}_E) \simeq \int_{H(x,p) \leq E} \frac{dx dp}{2\pi\hbar} = S(E)$$

□

2.3.2 Applications

2.3.2.1 Electrons dans un métal

Exercice 2.3.2. Electrons dans un métal

1. Utilisant la loi de Weyl semi-classique (2.3.1) calculer le nombre d'états quantiques $N(E)$ ayant une énergie inférieure à E , pour une particule libre à une dimension entre deux murs de largeur L .
 - (a) Même question pour une particule libre dans une boîte de volume V . En déduire la densité d'états $\rho(E)$.
 - (b) Application : pour des électrons libres dans un métal comme le sodium, appliquer la règle de remplissage de Fermi, et estimer l'énergie et la vitesse des électrons à la surface de Fermi, sachant que la densité est $N/V = 2,6 \cdot 10^{22}$ électrons/cm³.

2.3.2.2 Spectre du corps noir : gaz de photons à l'équilibre thermique

Exercice 6. Spectre du corps noir : gaz de photons à l'équilibre thermique

Soit un volume V fixé, qui contient un gaz de photons à l'équilibre thermodynamique à la température T fixée. Cela signifie que ces photons sont en contact avec de la matière qui est à la température T , car il n'y a pas d'interaction directe entre les photons.

La distribution d'énergie de ces photons s'appelle la **loi de Planck** ou **spectre du corps noir**. L'allure de ce spectre dépend de la température T .

Exemples :

- A la surface du Soleil (blanc-jaune), le magma a la température $T = 6000^0K$. L'étoile Betelgeuse qui est rouge a une température $T = 2400K$. L'étoile Bellatrix qui est bleue a la température de surface $T = 22000K$.

- Dans un four, on peut avoir $T = 600^0 K$. Cf Diu p826-917 pour une barre de fer. Le forgeron a des tables de couleurs, lui donnant la température, à partir de la couleur observée.
- Le rayonnement fossile de l'univers suit la loi de Plank pour $T = 2,725 K \pm 0.002$.

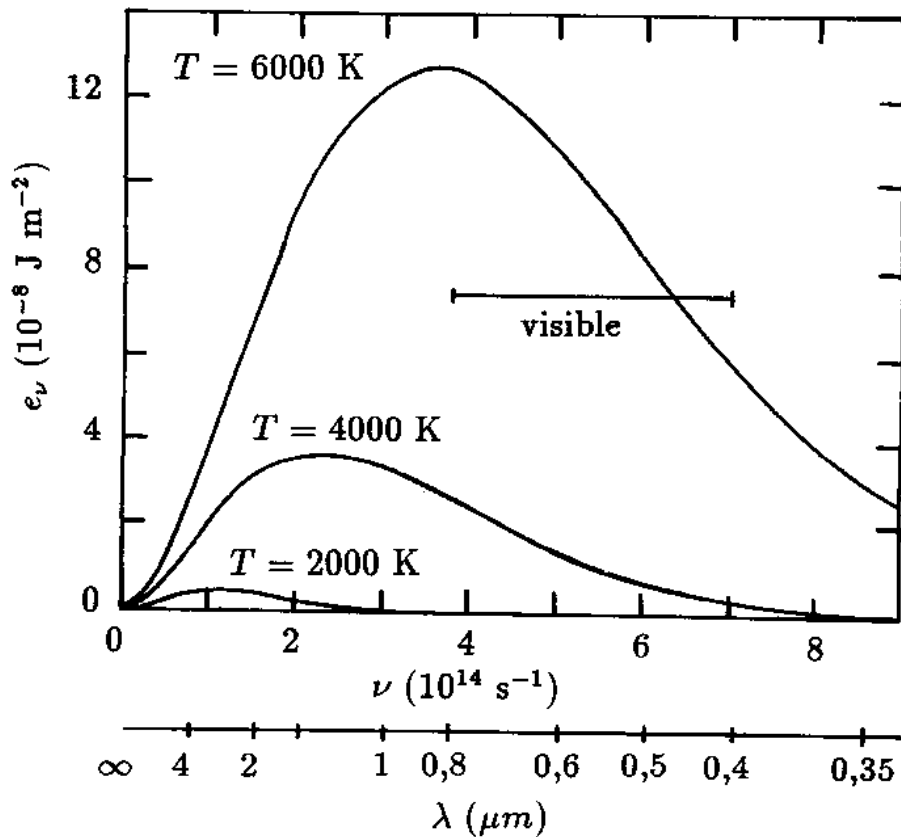
On va établir la loi de Planck qui donne la distribution d'énergie $u(\nu) d\nu$ (par intervalle de fréquence et par unité de volume) d'un gaz de photons à l'équilibre thermique.

Questions Pour un intervalle de fréquence $\nu \in [\nu; \nu + d\nu]$,

1. En utilisant la formule de Weyl sur le comptage d'états ondulatoires (2.3.3), trouver le nombre de modes électromagnétiques par intervalle de fréquence $\frac{dn}{d\nu}$, et dans un volume V .
2. Considérons un mode de fréquence ν , noté (*mode*). D'après la quantification du champ électromagnétique, un mode de fréquence ν ayant N photons a une énergie $E_N = h\nu(N + 1/2)$. De plus la loi de Boltzmann, stipule que cet état à N photons a la probabilité $P_N = \frac{1}{Z} \exp(-E_N/(kT))$ d'apparaître. Déduire la loi de Bose-Einstein sur le remplissage de ce mode, donnant le nombre moyen de photons dans ce mode $\langle N_{mode} \rangle = \frac{dN}{dn}$. Déduire le nombre moyen de photons $\frac{dN}{d\nu}$ par intervalle de fréquence.
3. En déduire l'énergie contenue par ces photons, notée $u(\nu)$, par unité de volume et par intervalle de fréquence? Tracer l'allure de $u(\nu)$, appelée **Loi de Planck** :

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)} : \text{loi de Planck}$$

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN



2.3.2.3 Equidistribution de l'énergie des ondes sismiques

Exercice 7. Equidistribution de l'énergie des ondes sismiques

La croûte terrestre est solide, et inhomogène. Les ondes sismiques sont des ondes de vibration élastiques dans ce milieu. Leur origine est diverse : tremblements de terre pour les fortes amplitudes (qui sont relativement rares et localisées). Mais il y a toujours un "bruit de fond" d'ondes sismiques dont l'origine est essentiellement par exemple le fracas des vagues sur les côtés océaniques. Sauf près des autoroutes par exemple, où le passage des poids lourds a un effet dominant. Dans la croûte, les ondes élastiques ont trois polarisations possibles :

- 2 états de polarisation pour les ondes transverses (**ondes P** comme primaires car plus rapides, elles arrivent les premières), qui ont une vitesse v_P
- 1 état de polarisation pour les ondes longitudinales (**ondes S**, comme secondaires), qui ont une vitesse plus faible $v_S = v_P/1.73$

Dans certaines régions, la croûte terrestre contient de nombreuses inhomogénéités. Dans ces régions les ondes du bruit de fond se comportent de façon très complexe (subissent des réflexions, des interférences...). Il est donc raisonnable de supposer que tous les modes sont excités de façon identique en moyenne. C'est une hypothèse sur l'équidistribution de l'énergie entre les différents modes, semblable à "l'hypothèse ergodique" en physique

statistique.

1. En utilisant la formule de Weyl sur le comptage d'états ondulatoires (2.3.3), considérer un intervalle de fréquence $d\nu$ et un volume V , et calculer le nombre de modes dn_P d'ondes P et le nombre de modes dn_S d'ondes S.
2. Avec l'hypothèse d'équidistribution de l'énergie entre ces différents modes, déduire le rapport E_P/E_S entre l'énergie contenue par les ondes P et S dans un intervalle de fréquence $d\nu$. Cette prédominance en énergie des ondes S sur les ondes P n'a été étudiée que récemment [PRK95] (1995), et observée dans une région du Mexique en 2001 [HTS⁺01], qui forme une cavité propice à la diffusion des ondes. Il faut noter la difficulté qu'il y a de mesurer la polarisation des ondes sismiques.

2.3.2.4 Densité de niveaux semi-classique du spectre de l'atome H

Exercice 8. Densité de niveaux semi-classique du spectre de l'atome H

1. Utilisant la loi de Weyl semi-classique (2.3.1) calculer le nombre d'états quantiques $N(E)$ ayant une énergie inférieure à E pour un électron dans l'atome d'hydrogène.
2. Déduire la densité de niveaux semi-classique $\rho_{sc}(E) = \frac{dN}{dE}$.
3. Comparer aux résultat exact connu à partir de l'expression $E_n = -\frac{\varepsilon_1}{n^2}$ avec $\varepsilon_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$. (voir chapitre ??). (Sans oublier la dégénérescence du niveau E_n qui est n^2).

2.3.3 (*) Règle de quantification semi-classique de Bohr-Sommerfeld

Dans ce paragraphe, on utilise encore le changement de variables $Q = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} q$, et $P = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} p$.

2.3.3.1 Non commutation des translations dans l'espace de phase

Exercice 9. 1. Montrer que que les translations en position et impulsion ne commutent pas :

$$\hat{T}_q \hat{B}_p = \exp(-iS/\hbar) \hat{B}_p \hat{T}_q$$

où la phase S est une quantité que l'on interprétera géométriquement. Pour quelles valeurs (q, p) est-ce que les opérateurs \hat{T}_q et \hat{B}_p commutent ?

2. Soit deux points $(Q_1, P_1) \in \mathbb{R}^2$ et $(Q_2, P_2) \in \mathbb{R}^2$. On note

$$\hat{D}_{1,2} = \exp\left(i(P_2 - P_1)\left(\hat{Q} - Q_1\right) - i(Q_2 - Q_1)\left(\hat{P} - P_1\right)\right)$$

qui est l'opérateur déplacement du point 1 au point 2. Pour trois points consécutifs 1, 2, 3 montrer que

$$\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \exp(iS/\hbar) \hat{D}_{1,3}$$

et interpréter géométriquement S . Voir figure 2.3.2.

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIE

3. En déduire que pour N points consécutifs

$$\hat{D}_{N-1,N} \dots \hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \exp(iS/\hbar) \hat{D}_{1,N}.$$

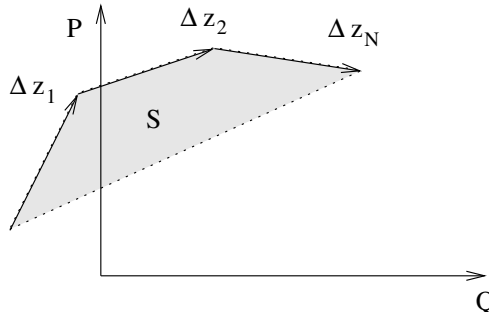


FIGURE 2.3.2 – Composition de déplacements.

2.3.3.2 Déplacement d'un état cohérent par la dynamique

Exercice 10. 1. Soit une dynamique spécifiée par la fonction de Hamilton classique $H(q, p)$. Soit un point $(q_0, p_0) \in \mathbb{R}^2$ de l'espace de phase. Donner l'expression de la fonction $H(q, p)$ linéarisée au voisinage de (q_0, p_0) . Voir figure 2.3.3.

2. Considérons un état cohérent $|q_0, p_0\rangle$ (paquet d'onde Gaussien). Comme cet état est localisé en (q_0, p_0) , l'action de l'opérateur \hat{H} sur $|q_0, p_0\rangle$ s'obtient approximativement en utilisant l'expression linéarisée de \hat{H} . Donner ainsi une expression approximative de $\hat{H}|q_0, p_0\rangle$.

3. En déduire que

$$\hat{U}(\Delta t)|q_0, p_1\rangle \simeq \exp(-iE\Delta t/\hbar)\hat{D}_{0,1}|q_0, p_0\rangle$$

où $\hat{U}(\Delta t) = \exp(-i\hat{H}\Delta t/\hbar)$ est l'opérateur d'évolution sur un temps court Δt , et où E et $\hat{D}_{0,1}$ seront précisés ? Interprétation ?

4. En déduire une expression de l'évolution d'un paquet d'onde sur un temps fini $\hat{U}(t)|q_0, p_0\rangle$? (Utiliser l'exercice précédent)

5. Considérons une trajectoire fermée (périodique) d'énergie E , de période T , passant par le point (q_0, p_0) . On a l'idée de construire un état stationnaire localisé sur cette trajectoire, en superposant des états cohérents. Voir figure 2.3.4. On considère ainsi :

$$|\phi\rangle = \int_0^T e^{iEt/\hbar} \hat{U}(t)|q_0, p_0\rangle dt$$

En appliquant l'opérateur $\hat{U}(t')$ à $|\phi\rangle$, montrer que $|\phi\rangle$ est un état stationnaire (approximatif) d'énergie E à condition que $e^{iET/\hbar}\hat{U}(T)|q_0, p_0\rangle = |q_0, p_0\rangle$.

6. Exprimer cette dernière condition comme une condition sur l'action (surface) S de la trajectoire :

$$S = n (2\pi\hbar) + o(\hbar), \quad n \in \mathbb{N}$$

appelée **règle de quantification de Bohr-Sommerfeld** : la surface doit contenir un nombre entier de cellules de Planck. Application : pour l'oscillateur Harmonique ?

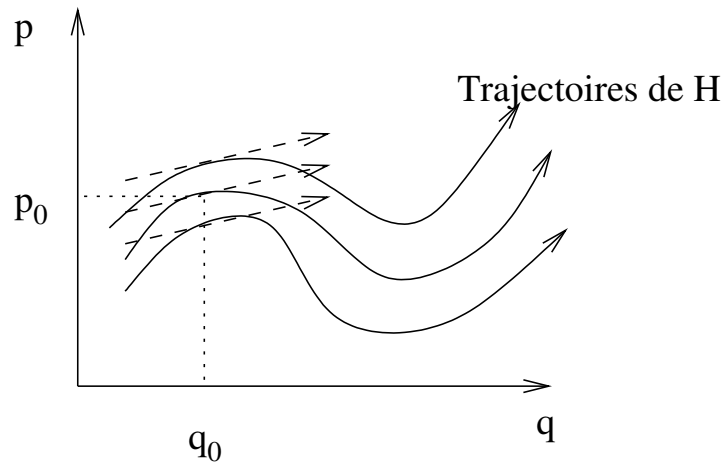


FIGURE 2.3.3 – L'approximation linéaire de $H(q, p)$ près du point (q_0, p_0) revient à approximer les trajectoires classiques au voisinage de ce point, par un mouvement translation.

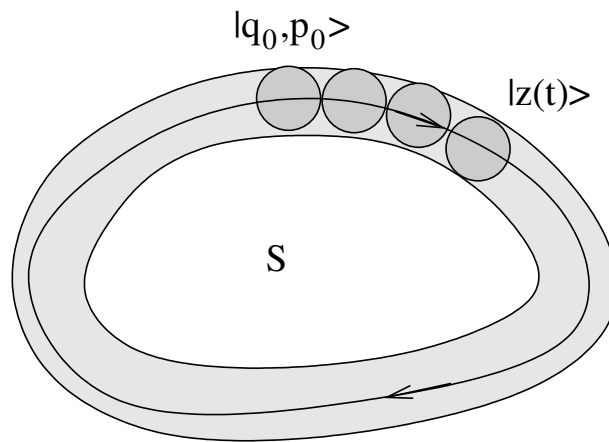


FIGURE 2.3.4 – Construction d'un état stationnaire, en superposant l'évolution d'un état cohérent. On obtient la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld.

Remarques

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

1. Cette construction permet non seulement d'obtenir une formule approchée pour les niveaux d'énergie, mais aussi une expression pour les états stationnaires $|\phi_n\rangle$, montrant qu'ils sont concentrés sur une orbite classique spécifique.
2. On n'obtient pas l'indice 1/2 correct du spectre de l'oscillateur Harmonique. Expliquer pourquoi @@.
3. Pour des problèmes à plusieurs dimensions, cette construction n'est pas assez précise pour donner les états stationnaires. Elle peut s'appliquer cependant aux orbites périodiques, et donne une formule semi-classique très intéressante pour la densité de niveaux, appelée **formule de Gutzwiller**, ou **formule des traces semi-classique**. Voir [Gut91]. La formule de Weyl énoncée ci-dessus constitue le premier ordre de cette formule.
4. On a choisit arbitrairement de mettre la phase $e^{iEt/\hbar}$ dans la construction de $|\phi\rangle$. Ce choix peut se justifier, car c'est celui qui donne un état stationnaire le plus concentré sur la trajectoire. (interférences constructives entre les paquets d'ondes). Cela a un rapport direct avec la phase géométrique, ou phase de Berry. Exercice : le montrer. (L'opérateur de déplacement \hat{D} ci-dessus réalise "un transport parallèle").
5. Finalement, tout cela est lié au fait que \hat{T}_q et \hat{T}_p ne commutent pas. cette observation se généralise, et donne lieu à la théorie de "**la quantification géométrique**". Voir [Woo92], [F. 00].

2.3.4 (*) Représentation quantique dans l'espace de phase

Rappelons ce qu'est "la représentation en position" d'un état quantique mentionné page 50. $|x\rangle$ est un état de position car bien localisé à la position x . On a la relation de fermeture $\hat{I} = \int dx |x\rangle\langle x|$ qui montre que tout état quantique se décompose comme superposition de tels états : $|\psi\rangle = \int dx |x\rangle (\langle x|\psi\rangle)$. Les coefficients de cette décomposition sont $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, qui la fonction d'onde de l'état quantique.

Nous avons aussi vu que les choses sont analogues pour la représentation en impulsion, donnant une fonction $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$.

En suivant cette même démarche, nous allons voir que l'on peut naturellement définir une **représentation dans l'espace de phase**, i.e. en variables (x, p) simultanément, appelée aussi **représentation de Husimi**. L'intérêt de cette représentation est grand. Il se devine lorsque l'on sait que la mécanique classique (de Hamilton) qui est une limite (couramment utilisée) de la mécanique quantique pour des actions grandes ($S/\hbar \gg 1$) se formule naturellement dans l'espace de phase (x, p) , et que de nombreux phénomènes de mécanique classique n'ont une explication claire que lorsqu'ils sont explicités dans l'espace de phase (comme les structures des trajectoires pour les système réguliers, ou chaotiques, voir [Arn76]) ; il en est de même pour de nombreux phénomènes quantiques, comme entrevu ci-dessus.

Le paragraphe (1.3.2), présentant l'évolution de paquets d'ondes a clairement montré l'avantage de la représentation de Husimi d'un état quantique par rapport à la représentation en position $\psi(x)$: elle permet de comprendre l'évolution en terme classique, sur une

durée plus longue. Elle permet aussi de mieux comprendre la structure des états stationnaires.

La représentation de Husimi dans l'espace des phases présentée ci-dessous, permet de donner un sens précis aux représentations schématiques dans l'espace de phase, faites ci-dessus à propos de l'évolution d'un paquet d'onde, figure (2.2.10), ou de la distribution d'un état stationnaire quelconque, figure (2.3.4).

2.3.4.1 Relation de Fermeture par les états cohérents

Nous avons vu en eq.(1.6.7), que le paquet d'onde $|q, p, \sigma\rangle$ défini par eq.(1.1.6), est "assez bien localisé" à la fois à la position x et à l'impulsion p , avec les incertitudes respectives $\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$, $\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma}$. Une famille de paquets d'ondes $|q, p, \sigma\rangle$ avec σ fixé, et $(q, p) \in \mathbb{R}^2$ serait donc un bon candidat pour définir une représentation dans l'espace de phase. Il reste à vérifier que l'on a une relation de fermeture.

Dans la suite, on considère que le paramètre σ est fixé, et on l'omet dans les notations. Pour simplifier, on utilise les coordonnées sans dimension Q, P eq.(2.2.7) et la coordonnée complexe

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \in \mathbb{C} : \quad \text{point de l'espace de phase} \\ Q &= \frac{q}{\sigma}, \quad P = \frac{\sigma}{\hbar}p \end{aligned}$$

On prendra l'expression $|z\rangle$ du paquet d'onde définie en eq.(2.2.26) page (121) :

$$\begin{aligned} |x, p, \sigma\rangle &= \exp\left(\frac{iPQ}{2}\right) |z\rangle \\ |z\rangle &= D(z)|0\rangle \\ D(z) &= \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp(z a^+ - \bar{z} a) \end{aligned}$$

On utilisera aussi si besoin, les expressions équivalentes (2.2.29) pour $\hat{D}(z)$.

Proposition 2.3.3. *Pour σ fixé, on a la relation de fermeture :*

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp |x, p, \sigma\rangle \langle x, p, \sigma| = \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} |z\rangle \langle z| \quad (2.3.4)$$

Démonstration. Voir cours de M1 de math [Fau10b]. □

2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

2.3.4.2 Représentation de Husimi d'un état quantique

Définition 2.3.4. Pour un état quantique $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ on associe la fonction suivante sur l'espace de phase, à valeurs complexes, appelée **distribution de Bargmann** de $|\psi\rangle$:

$$Barg_\psi(x, p) = \langle z|\psi\rangle$$

on associe aussi la fonction positive sur l'espace de phase, appelée **distribution de Husimi** de $|\psi\rangle$:

$$Hus_\psi(x, p) = |\langle z|\psi\rangle|^2 = |Barg_\psi(x, p)|^2$$

Proposition 2.3.5. De la relation de fermeture, on déduit que la **distribution de Bargmann** $Barg_\psi(x, p)$ **caractérise l'état** $|\psi\rangle$.

Démonstration. si $\forall x, p \text{ } Barg_\psi(x, p) = Barg_\phi(x, p)$, alors

$$|\psi\rangle = \int \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} |z\rangle Barg_\psi(x, p) = \int \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} |z\rangle Barg_\phi(x, p) = |\phi\rangle$$

□

Cela est moins clair pour la distribution de Husimi car il semble que l'on perd l'information sur la phase en chaque point (x, p) . Pourtant il n'en est rien :

Proposition 2.3.6. la **distribution de Husimi** caractérise l'état $|\psi\rangle$ à une phase globale près.

Démonstration. [Fau10b] On a $Barg_\psi(x, p) e^{|z|^2/2} = e^{|z|^2/2} \langle z|\psi\rangle = \langle 0|e^{\bar{z}a}|\psi\rangle$ qui est donc analytique en \bar{z} . Il résulte de la théorie des fonctions à variables complexes que cette fonction est déterminée (à une phase près) par son module seulement.

□

Proposition 2.3.7. La norme de l'état $|\psi\rangle$ s'obtient à partir de la distribution de Husimi par :

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} Hus_\psi(x, p)$$

Démonstration. on utilise simplement la relation de fermeture : $\langle \psi|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} \langle \psi|qp\rangle \langle qp|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} Hus_\psi(x, p)$.

□

2.3.4.3 Exemples simples et importants

Onde plane si $|\psi\rangle = |p_0\rangle$ est une onde plane d'impulsion p_0 , définie en eq.(1.1.3), alors

$$Barg_{|p_0\rangle}(x, p) = \langle z|p_0\rangle = \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(i\frac{x_0 p_0}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{x_0 p}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

et donc

$$Hus_{|p_0\rangle}(x, p) = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

qui est une ligne en $p = p_0$ qui a une forme transversale Gaussienne, de largeur $\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}$. C'est un résultat attendu. Voir figure 2.3.5.

Etat de position si $|\psi\rangle = |x_0\rangle$ est un état de position en x_0 , alors

$$Barg_{|x_0\rangle}(x, p) = \langle z|x_0\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-i\frac{x_0 p_0}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

(d'après (1.1.6), et donc

$$Hus_{|x_0\rangle}(x, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right)$$

qui est une ligne en $x = x_0$ qui a une forme transversale Gaussienne, de largeur $\Delta x = \sigma$. C'est un résultat attendu. Voir figure 2.3.5.

Remarquer que $Hus_{|x_0\rangle}(x, p)$ et $Hus_{|p_0\rangle}(x, p)$ ne sont pas normalisable (norme infinie); cela est du au fait que $|p_0\rangle, |x_0\rangle \notin L^2(\mathbb{R})$.

Etat cohérent si $|\psi\rangle = |x_0, p_0\rangle$ est un paquet d'onde Gaussien de position moyenne x_0 et impulsion moyenne p_0 , alors

$$Barg_{|x_0, p_0\rangle}(x, p) = \langle z|z_0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z-z_0|^2} e^{i\Im(\bar{z}z_0)}$$

et donc

$$\begin{aligned} Hus_{|x_0, p_0\rangle}(x, p) &= e^{-|z-z_0|^2} = e^{-\frac{1}{2}(Q-Q_0)^2 - \frac{1}{2}(P-P_0)^2} \\ &= e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-x_0)^2 - \frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2} \end{aligned}$$

qui est une gaussienne centrée en (x_0, p_0) de largeurs $\Delta x = \sigma$, $\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}$. Voir figure 2.3.6. C'est un résultat attendu, qui donne un sens rigoureux à l'image (1.6.4).

preuve : on utilise (2.2.29), et $e^{\bar{z}a} e^{z_0 a^+} = e^{\bar{z}z_0} e^{z_0 a^+} e^{\bar{z}a}$. On a

$$\langle z|z_0\rangle = \langle 0|e^{\bar{z}a} e^{z_0 a^+}|0\rangle e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} = e^{\bar{z}z_0} \langle 0|e^{z_0 a^+} e^{\bar{z}a}|0\rangle e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} = e^{\bar{z}z_0} e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}}$$

soit $\langle z|z_0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z-z_0|^2} e^{i\Im(\bar{z}z_0)}$ \square .

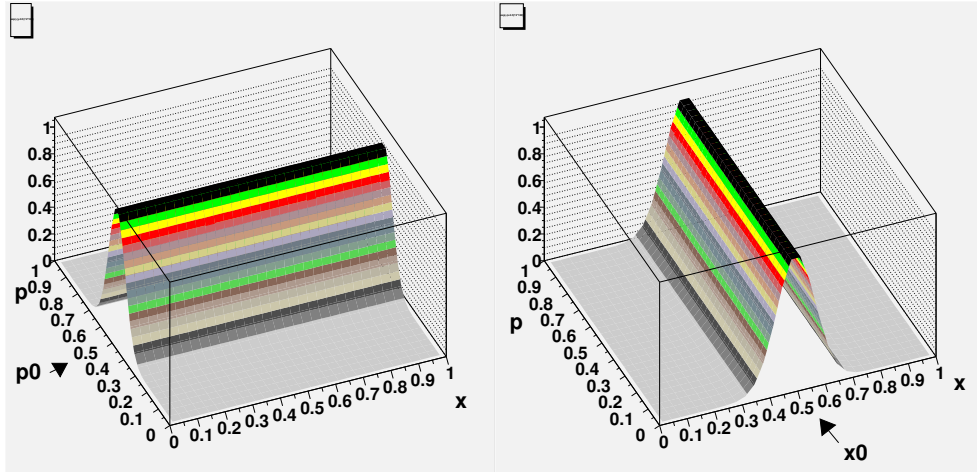


FIGURE 2.3.5 – Distributions de Husimi $Hus_{p_0}(x, p)$ et $Hus_{x_0}(x, p)$ des états $|p_0\rangle$ et $|x_0\rangle$ dans l’espace de phase. Les unités sont arbitraires

Etat stationnaire de l’oscillateur Harmonique Si $|\psi\rangle = |n\rangle$ état propre de l’oscillateur harmonique (voir page 105), alors

$$Barg_{|n\rangle}(x, p) = \langle z|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \bar{z}^n$$

et donc en coordonnées polaires $z = \rho e^{i\theta}$

$$Hus_{|n\rangle}(x, p) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \rho^{2n} e^{-\rho^2}$$

qui est une distribution indépendante de θ , donc de symétrie circulaire, dont le maximum radial est sur le cercle $\rho_{max} = \sqrt{n}$. Voir figure 2.3.6. Ce cercle coïncide avec la trajectoire classique d’énergie $E_n^{class} = \hbar\omega n$, comme observé numériquement sur la figure (1.3.4). (Remarque qu’il y a un petit décalage par rapport à l’énergie du niveau n : $E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$, mais ce décalage est plus petit que la largeur de la distribution).

preuve : $\langle z|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \langle 0|e^{\bar{z}a}|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n' \geq 0} \frac{1}{n'!} \langle 0|(\bar{z}a)^{n'}|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n' \geq 0} \frac{1}{\sqrt{n'!}} \bar{z}^{n'} \langle n'|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \bar{z}^n$.

Le maximum de Hus et sa largeur se trouvent en dérivant par rapport à ρ . Ensuite, le hamiltonien classique $H = \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2) = \hbar\omega |z|^2 = \hbar\omega \rho^2 \square$

2.4 Conseils de Lecture

- Cohen-Tannoudji [CBF], chapitre V.

Pour approfondir :

- L’application du comptage d’états à la physique statistique :

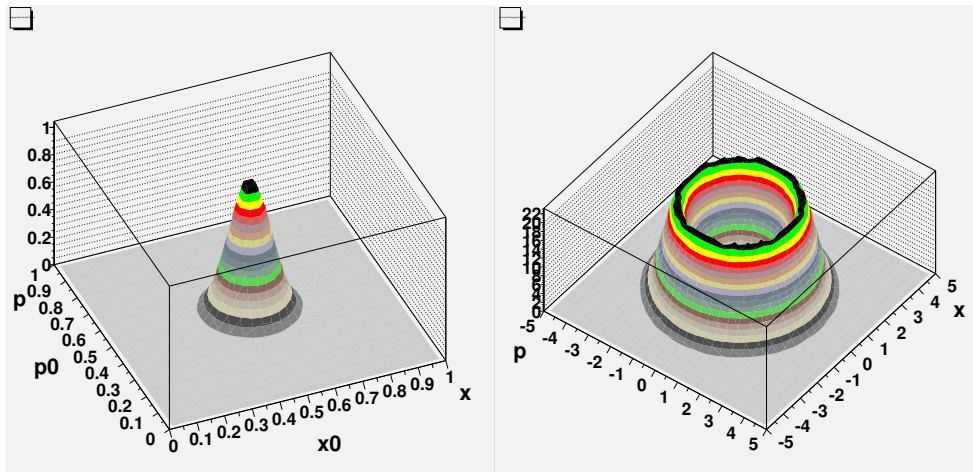


FIGURE 2.3.6 – Distributions de Husimi $Hus_{|x_0 p_0\rangle}(x, p)$ et $Hus_{|n\rangle}(x, p)$ des états $|x_0 p_0\rangle$ et $|n\rangle$ dans l'espace de phase. Les unités sont arbitraires

- Diu et al. [DGLR89],
- **Pour approfondir les aspects mathématiques,**
 - Sur la théorie des groupes : Cours de Segal dans [Seg95]. Livre de Bacry [Bac].
 - Sur les états cohérents (paquets d'ondes) en physique : [WDG90]

Chapitre 3

Une particule à 3 dimensions sans spin

Dans le chapitre précédent nous avons considéré par simplicité une particule se déplaçant seulement selon une direction x (mouvement à une dimension). Dans ce chapitre nous montrons tout d'abord comment le formalisme du chapitre précédent s'étend pour décrire une particule dans l'espace $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ de dimension 3.

Nous traitons ensuite le cas d'une particule chargée qui subit l'influence d'un champ électromagnétique décrit par les champs de potentiel \vec{A} et V .

3.1 Une particule à 3 dimensions sans spin

3.1.1 Espace des états \mathcal{H}

L'état quantique d'une particule dans l'espace \mathbb{R}^3 est maintenant décrit par une fonction d'onde $\psi(x, y, z)$ à 3 variables, et toujours à valeurs complexes. On utilisera toujours la notation de Dirac $|\psi\rangle$. On posera aussi :

$$\vec{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$$

Le produit scalaire entre deux fonctions d'onde est naturellement :

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_1(\vec{x})} \psi_2(\vec{x}) d^3 \vec{x}$$

(où $d^3 \vec{x} = dx dy dz$. C'est une intégrale triple). L'espace des états est constitué des fonctions d'ondes $|\psi\rangle$ de norme finie : $\langle \psi | \psi \rangle < \infty$, noté :

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

Les opérateurs différentiels de base sont les opérateurs position et impulsion que l'on regroupe en **opérateurs vectoriels** (i.e. vecteurs dont les composantes sont des opérateurs) :

$$\hat{\vec{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \tag{3.1.1}$$

$$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \tag{3.1.2}$$

qui sont définis comme ci-dessus, par

$$\begin{aligned}(\hat{x}\psi)(x, y, z) &= x\psi(x, y, z) \\ (\hat{p}_x\psi)(x, y, z) &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}(x, y, z)\end{aligned}$$

etc...

On note aussi pour simplifier $\partial_x := \frac{\partial}{\partial x}$ et $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ appelé **opérateur nabra**.

3.1.2 L'espace \mathcal{H} comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$

Nous connaissons déjà des bases pour l'espace $\mathcal{H}_x = L^2(\mathbb{R})$ des fonctions d'ondes $\psi(x)$ à une variable x , étudié dans le chapitre précédent : nous connaissons la "base" de position $|x\rangle, x \in \mathbb{R}$, la "base" d'impulsion $|p_x\rangle, p_x \in \mathbb{R}$, la base de l'oscillateur Harmonique $|\phi_n\rangle, n \in \mathbb{N}, \dots$ (il y a une infinité d'autres bases possibles). C'est la même chose pour les espaces \mathcal{H}_y et \mathcal{H}_z associés aux variables y, z . Chaque dimension de l'espace : x, y, z s'appelle un **degré de liberté spatial**. Dans \mathbb{R}^3 il y a donc trois degrés de liberté spatial.

Nous aimerions ici construire des bases de l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, fonctions à trois variables (3 degrés de liberté) à partir de ces bases de fonctions à une variable (1 degré de liberté), $L^2(\mathbb{R})$. Autrement dit, comprendre comment l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ se construit à partir des espaces $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y$ et \mathcal{H}_z . Nous allons voir que cette construction se fait par le **produit tensoriel**. Le produit tensoriel sera essentiel pour décrire plus généralement l'espace quantique d'une particule ayant des degrés de liberté interne, ou pour décrire l'espace quantique de plusieurs particules. Nous décidons donc d'illustrer cette construction de produit tensoriel dans le cadre simple de fonctions à trois variables, ce qui reste intuitif.

Proposition 3.1.1. *Supposons que $|\phi_{n_x}\rangle, n_x \in \mathbb{N}$ est une base (orthonormée) de $\mathcal{H}_x = L^2(\mathbb{R}_x)$, et de même $|\phi_{n_y}\rangle, |\phi_{n_z}\rangle$ des bases respectives de $\mathcal{H}_y = L^2(\mathbb{R}_y)$ et $\mathcal{H}_z = L^2(\mathbb{R}_z)$. Alors $\phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z)$ forme une base orthonormée de $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ aussi notée*

$$|\phi_{n_x}\rangle \otimes |\phi_{n_y}\rangle \otimes |\phi_{n_z}\rangle$$

avec $(n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3$. C'est à dire que tout état $\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ s'écrit de façon unique :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z), \quad \psi_{n_x, n_y, n_z} \in \mathbb{C} \quad (3.1.3)$$

On dit que \mathcal{H} est l'**espace produit tensoriel** :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z \text{ ou } L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}_x) \otimes L^2(\mathbb{R}_y) \otimes L^2(\mathbb{R}_z)$$

Le signe \otimes s'appelle **produit tensoriel**.

Démonstration. (*) On note :

$$\phi_{n_x}(x) = \langle x | \phi_{n_x} \rangle, \quad n_x \in \mathbb{N}$$

sont les fonctions de base de \mathcal{H}_x . On considère tout d'abord que y, z sont fixes, donc que $\psi(x, y, z)$ dépend seulement de x , et on écrit de façon unique :

$$\psi(x, y, z) = \langle x | \psi(y, z) \rangle = \sum_{n_x} \psi_{n_x}(y, z) \phi_{n_x}(x)$$

La fonction $\psi_{n_x}(y, z) \in \mathbb{C}$ est ici une "composante". On continue de même avec cette fonction, en considérant z fixe et y variable, donnant

$$\psi_{n_x}(y, z) = \sum_{n_y} \psi_{n_x, n_y}(z) \phi_{n_y}(y)$$

et puis finalement $\psi_{n_x, n_y}(z) = \sum_{n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_z}(z)$. Au total cela donne :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) \quad (3.1.4)$$

Qui montre que en général une fonction $\psi(x, y, z)$ n'est pas juste un produit factorisé de trois fonctions respectivement en x, y, z mais peut toujours s'écrire comme une combinaison linéaire de termes factorisés de la forme $\phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$. De plus on a montré que cette décomposition est unique. La décomposition de ψ que l'on a obtenue montre que $|\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle$ **est une base (orthonormée) de \mathcal{H}** . (On vérifie facilement l'orthonormalité). \square

Remarques

- En notation de Dirac, on ré-écrit (3.1.4) sous la forme :

$$\langle x, y, z | \psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \langle x | \phi_{n_x} \rangle \langle y | \phi_{n_y} \rangle \langle z | \phi_{n_z} \rangle$$

ou encore :

$$|\psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} |\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle$$

Il signifie que la fonction d'onde $(|\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle) \in \mathcal{H}$ est $\langle x | \phi_{n_x} \rangle \langle y | \phi_{n_y} \rangle \langle z | \phi_{n_z} \rangle = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$ qui est un produit de fonctions. On obtient de même la **base de position** de \mathcal{H} notée :

$$|\vec{x} \rangle = |x, y, z \rangle = |x \rangle \otimes |y \rangle \otimes |z \rangle$$

$$\langle \vec{x} | = \langle x, y, z | = \langle x | \otimes \langle y | \otimes \langle z |$$

- Ne pas confondre le produit tensoriel d'espaces vectoriels avec la somme directe d'espaces vectoriels. Voici un rappel de ces deux notions. Si F est un espace vectoriel (e.v.) de dimension N_f , de base $|n_f \rangle, n_f = 1 \rightarrow N_f$ et G est un autre e.v. de dimension N_g , de base $|n_g \rangle, n_g = 1 \rightarrow N_g$, alors nous venons de voir que l'**espace produit tensoriel** est noté

$$E = F \otimes G \quad (3.1.5)$$

et a pour base $|n_f, n_g \rangle = |n_f \rangle \otimes |n_g \rangle$ et est donc de dimension $N_f N_g$. Par contre, l'**espace somme directe**, noté

$$E = F \oplus G$$

a pour base la réunion des vecteurs $|n_f \rangle$ et $|n_g \rangle$, et est donc de dimension $N_f + N_g$. Par exemple $\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^2 \oplus \mathbb{R}$. Voir figure 3.1.1.

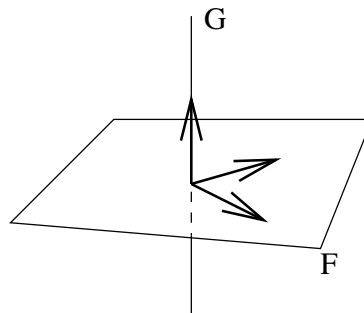


FIGURE 3.1.1 – L'espace total E de dimension 3 est la somme directe $E = F \oplus G$, avec $\dim F = 2$, $\dim G = 1$.

- Voici un schéma (figure 3.1.2) montrant une fonction $\psi(x, y)$ non factorisable en deux fonctions de x et y . Cela traduit une corrélation évidente entre les variables x

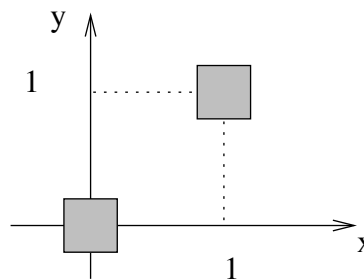


FIGURE 3.1.2 – Cette fonction est $\psi(x, y) = 1$ sur les carrés gris, et $\psi(x, y) = 0$ ailleurs, est non factorisable.

et y . En terme de mesure de la position de la particule, si on observe la particule en $x = 1$, forcément, $y = 1$ (respect. $x = 0$ et $y = 0$). Donc x et y sont des **grandeurs corrélées** dans cet exemple.

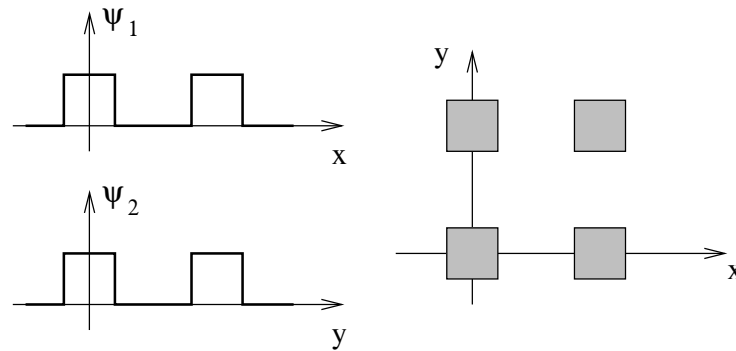


FIGURE 3.1.3 – Cette fonction $\psi(x, y) = 1$ sur les carrés gris, et $\psi(x, y) = 0$ ailleurs est factorisable : $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$

Voici maintenant un schéma montrant une fonction $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$ factorisable en deux fonctions de x et y , figure 3.1.3. Cela correspond au fait qu'il n'y a pas de corrélation entre les grandeurs x et y : Si on observe la particule en $x = 1$, on ne sait pas pour autant si $y = 0$ ou $y = 1$. On dit que x et y sont **dé-corrélés**.

- (*) Dans cette section, on a montré que $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$. Plus généralement, on a donc pour $a, b \in \mathbb{N}$:

$$L^2(\mathbb{R}^{a+b}) = L^2(\mathbb{R}^a) \otimes L^2(\mathbb{R}^b)$$

Exercice 3.1.2. “Action d’une rotation” : Si une particule a la fonction d’onde $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$, montrer que l’expression de la fonction d’onde de la même particule dans un repère \vec{x}' obtenu par une rotation $\vec{x}' = R\vec{x}$ (où $R \in SO(3)$ est une matrice orthogonale 3×3) est

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R^{-1}\vec{x}') \quad (3.1.6)$$

Remarques : on note $\psi' = \hat{R}\psi$ et \hat{R} est l’**opérateur rotation**. Puisque que la transformation $\psi(\vec{x}) \rightarrow \psi'(\vec{x}')$ correspond à un changement de repère, on parle de **transformation passive**. Il pourrait s’agir d’un dispositif qui fasse tourner la particule ; on parlerait de **transformation active**.

3.1.3 (*) L’oscillateur Harmonique à 2 dimensions

Voir TD.

3.2 Particule chargée dans un champ électromagnétique

Dans cette section, on cherche à décrire une **particule quantique** subissant les effets d’un **champ électro-magnétique extérieur classique**. On supposera donc que l’influence de la particule sur le champ est négligeable (ex : rayonnement, champ électrostatique ou magnétostatique, cf discussion page 168).

La dynamique d'une particule quantique isolée est décrite par l'équation de Schrödinger eq.(1.3.1). Dans cette équation intervient l'opérateur Hamiltonien qui contient toutes les informations sur la nature de la particule et les forces qu'elle subit.

En général, cet opérateur \hat{H} s'obtient à partir de la fonction de Hamilton classique $H(\vec{x}, \vec{p})$ (qui est l'énergie totale) qui sert à décrire la dynamique de la particule dans le cadre de la mécanique classique, et l'on remplace les variables classiques x, p_x par les opérateurs \hat{x}, \hat{p}_x etc.. Cette opération s'appelle le **principe de correspondance**¹.

Dans ce paragraphe nous allons donc tout d'abord faire un rappel de mécanique classique et d'électromagnétisme classique, et établir la fonction de Hamilton $H(\vec{x}, \vec{p})$ d'une particule classique chargée, dans un champ électromagnétique extérieur. Puis à l'aide du principe de correspondance, on obtiendra l'opérateur Hamiltonien \hat{H} qui permet de décrire la particule quantique.

Attention : dans ce chapitre, on ne décrira pas le spin de la particule (on le supposera figé par exemple). Nous décrirons l'interaction du spin avec le champ, seulement à la fin du chapitre ??.

3.2.1 Dynamique classique et invariance de Jauge

Voir cours de Mécanique Analytique de L3. [Fau10c].

D'après les équations de Maxwell, les champs $\vec{E}(\vec{x}, t)$ et $\vec{B}(\vec{x}, t)$ vérifient² :

$$\begin{aligned}\text{rot}(\vec{E}) &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \text{div}(\vec{B}) &= 0\end{aligned}$$

D'après le Lemme de Poincaré, cela implique que il existe un champ de vecteur $\vec{A}(\vec{x}, t)$ appelé **potentiel vecteur** et une fonction $U(\vec{x}, t)$ appelé **potentiel scalaire** tels que

$$\boxed{\vec{E} = -\vec{\text{grad}}(U) - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \vec{\text{rot}}\vec{A}}$$

Remarque : utilisant les relations $\vec{\text{rot}} \circ \vec{\text{grad}} = 0$ et $\text{div} \circ \vec{\text{rot}} = 0$, on vérifie que ces solutions conviennent. Le lemme de Poincaré assure la réciproque. Voir page 156.

3.2.1.1 Équations de mouvement classique

Soit une particule classique chargée (électron ou autre), de charge q , se déplaçant sous l'effet d'un champ électromagnétique \vec{E}, \vec{B} . Dans la théorie de Newton, cette particule subit

1. Ce principe de correspondance peut sembler artificiel. Il est justifié par la propriété que l'évolution du centre d'un paquet d'onde avec le Hamiltonien quantique \hat{H} et décrit en première approximation par les équations de Hamilton avec le Hamiltonien classique H correspondant.

2. Voir l'appendice pour avoir l'expression de ces opérateurs différentiels et des relations importantes

la **force de Lorentz** $\vec{F}_{Lorentz} = q \left(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right)$ et cela détermine sa trajectoire d'après l'équation de mouvement de Newton $m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F}_{Lorentz}$.

La proposition suivante montre que ce mouvement peut être décrit par un certain Hamiltonien.

Proposition 3.2.1. *La fonction Hamiltonien suivante*

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + qU(\vec{x}, t)$$

et les équations de mouvement de Hamilton

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{x}}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \\ \frac{d\vec{p}}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \end{aligned}$$

sont équivalentes à l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F}_{Lorentz} = q \left(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right) \quad (3.2.1)$$

L'impulsion est

$$\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{x}, t) \quad (3.2.2)$$

Démonstration. (*) On notera $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ les composantes d'un vecteur. Les équations de mouvement de Hamilton donnent pour $j = 1, 2, 3$

$$\frac{dx_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{1}{m} (p_j - qA_j)$$

(Cela donne $\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}$ où $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$ est la vitesse). On a aussi

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_j} = \left(\sum_{i=1}^3 \frac{1}{m} (p_i - qA_i) \left(q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \right) - q \frac{\partial U}{\partial x_j} = \left(\sum_{i=1}^3 v_i \left(q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \right) - q \frac{\partial U}{\partial x_j}$$

Alors

$$m \frac{d^2 x_j}{dt^2} = \frac{dp_j}{dt} - q \frac{dA_j}{dt}$$

or

$$\frac{dA_j(\vec{x}(t), t)}{dt} = \sum_i \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial A_j}{\partial t}$$

et

$$E_j = -\frac{\partial U}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial t},$$

Donc

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x_j}{dt^2} &= \left(\sum_{i=1}^3 v_i \left(q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \right) - q \frac{\partial U}{\partial x_j} - q \left(\sum_i \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial A_j}{\partial t} \right) \\ &= q \left(\sum_{i=1}^3 v_i \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) \right) + q E_j \\ &= q (v \wedge B)_j + q E_j = F_{Lorentz} \end{aligned}$$

On a obtenu l'équation de Newton. En dernière ligne on a utilisé $(v \wedge B)_j = \left(\sum_{i=1}^3 v_i \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) \right)$ qu'il nous faut montrer maintenant. On a

$$\vec{B} = r \vec{ot} (\vec{A}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{bmatrix} \wedge \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 = \frac{\partial A_3}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_3} \\ B_2 = \frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \\ B_3 = \frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \end{bmatrix}$$

et

$$\vec{v} \wedge \vec{B} = \begin{bmatrix} v_2 B_3 - v_3 B_2 \\ etc \\ .. \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} v_2 B_3 - v_3 B_2 &= v_2 \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \right) + v_3 \left(\frac{\partial A_3}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_3} \right) \\ &= \sum_j v_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

car le terme $j = 1$ est nul. On a donc bien montré que $\sum_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) v_j = \left(\vec{v} \wedge \vec{B} \right)_i$. \square

3.2.1.2 Invariance de Jauge classique

D'après les équations de mouvement de Newton $m d\vec{v}/dt = \vec{F}_{Lorentz}$, et l'expression de $\vec{F}_{Lorentz}$ qui dépend de \vec{E}, \vec{B} , nous savons que le mouvement de la particule est imposé par \vec{E}, \vec{B} et non pas directement par \vec{A}, U . Or différents champs \vec{A}, U donnent les mêmes champs \vec{E}, \vec{B} . En effet, la transformation suivante sur les champs (\vec{A}, U) , appelé **changement de Jauge**, laisse les champs \vec{E}, \vec{B} invariants et donc la trajectoire classique inchangée) :

Proposition 3.2.2. “Invariance de Jauge classique”. si $\chi(\vec{x}, t)$ est une fonction quelconque alors les transformations suivantes appelées **changement de Jauge** :

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \overrightarrow{\text{grad}}(\chi) \\ U &\rightarrow U' = U - \frac{\partial \chi}{\partial t}\end{aligned}\quad (3.2.3)$$

impliquent $\vec{p} \rightarrow \vec{p}' = \vec{p} + q \overrightarrow{\text{grad}}(\chi)$ mais \vec{E} , \vec{B} et la trajectoire classique $\vec{x}(t)$ sont inchangés.

Démonstration. On a

$$\vec{E}' = -\overrightarrow{\text{grad}}U' - \partial \vec{A}' / \partial t = -\overrightarrow{\text{grad}}U + \partial(\overrightarrow{\text{grad}}\chi) / \partial t - \partial \vec{A} / \partial t - \partial(\overrightarrow{\text{grad}}\chi) / \partial t = \vec{E}$$

et

$$\vec{B}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} + \overrightarrow{\text{rot}}\overrightarrow{\text{grad}}\chi = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} = \vec{B}$$

Par conséquent la force de Lorentz \vec{F}_{Lorentz} est inchangée et les équations de mouvement Newton sont aussi inchangées. □

3.2.2 Équation de Schrödinger et invariance de Jauge Quantique

Comme expliqué ci-dessus, l'opérateur Hamiltonien \hat{H} s'obtient à partir du Hamiltonien classique par le principe de correspondance en substituant les variables positions et impulsions par les opérateurs différentiels correspondants eq(3.1.1). Cela donne :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2 + qU(\hat{\vec{x}}, t) \quad (3.2.4)$$

et l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution de la fonction d'onde de la particule chargée s'écrit toujours comme eq.(1.3.1) :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (3.2.5)$$

$$\Leftrightarrow 0 = \frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \quad (3.2.6)$$

dans la deuxième ligne on a fait apparaître les expressions

$$\mathbb{D} := \begin{cases} D_t & := -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + qU \\ \vec{D} & := -i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A} \end{cases}$$

appelée **dérivée covariante**. (c'est un quadri-vecteur).

Proposition 3.2.3. “Invariance de Jauge quantique”. L'équation de Schrödinger est aussi invariante par le changement de Jauge (3.2.3), à condition de faire aussi le changement suivant sur la fonction d'onde :

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = \exp\left(iq \frac{\chi(\vec{x}, t)}{\hbar}\right) \psi(\vec{x}, t) \quad (3.2.7)$$

$$(3.2.8)$$

Remarque :

- Dans (3.2.7) c'est un changement de la phase de la fonction d'onde différent en chaque point de l'espace-temps.
- Il faut penser aux transformation de Jauge comme à un changement de repère ou de référentiel en mécanique : les coordonnées des objets sont modifiées mais les phénomènes physique sont inchangés.

Démonstration. Supposons que l'équation $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ est vérifiée. On va montrer que $i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi'$ est alors vérifiée. Utilisant l'écriture (3.2.5) avec la dérivée covariante ci-dessus, on pose \vec{D}', D'_t pour les expressions avec (\vec{A}', U') . On veut donc montrer que $0 = \frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi$ est équivalent à $0 = \frac{1}{2m} \vec{D}'^2 \psi' + D'_t \psi'$.

Pour cela on va utiliser la relation suivante :

$$\mathbb{D}' \left(\underbrace{e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi}_{\psi'} \right) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \mathbb{D}(\psi) \quad (3.2.9)$$

qui sera démontrée ci-dessous. Grâce à cette relation on déduit $\vec{D}'(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi)$ donc

$$\left(\vec{D}'\right)^2 \left(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi\right) = \vec{D}' \left(\vec{D}' e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi\right) = \vec{D}' e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}^2(\psi)$$

et $D'_t(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} D_t(\psi)$. Donc

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{2m} \vec{D}'^2 \psi' + D'_t \psi' \\ \Leftrightarrow 0 &= e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \left(\frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \right) \\ \Leftrightarrow 0 &= \left(\frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \right) \end{aligned}$$

On a obtenu le résultat. Preuve de (3.2.9) : pour la composante D'_t on a

$$\begin{aligned} D'_t \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + qU' \right) \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) \\ &= -i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} i \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi - i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \frac{\partial \psi}{\partial t} + q \left(U - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \\ &= e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} D_t(\psi) \end{aligned}$$

et de même pour les composantes spatiales

$$\begin{aligned} \vec{D}' \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) &= \left(-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}' \right) \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) \\ &= -i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} i \frac{q}{\hbar} \left(\vec{\nabla} \chi \right) \psi - i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \left(\vec{\nabla} \psi \right) - q \left(\vec{A} + \vec{\nabla} \chi \right) e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \\ &= e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi) \end{aligned}$$

□

3.2.3 Effet Aharonov-Bohm

Nous venons de voir que en mécanique classique et quantique il y a une invariance de Jauge. On pourrait penser que les deux résultats sont similaires. Ce n'est pas le cas il y a une différence fondamentale avec l'invariance de Jauge quantique et qui vient du fait que la phase est modifiée dans l'expression (3.2.7). Cela implique des phénomènes qui se manifestent dans des expériences d'interférences proposées par Aharonov et Bohm en 1957 et qui n'ont pas d'équivalent en mécanique classique.

Dans le dispositif expérimental décrit par la figure (3.2.1), un faisceau cohérent d'électrons part de x_0 , puis est séparé en deux, et se recombine dans la région d'interférences x . Cela est similaire à l'expérience des doubles fentes de Young en optique, sauf que la région hachurée entourée par les faisceaux contient un champ magnétique \vec{B} perpendiculaire à la figure. Le champ \vec{B} est nul partout ailleurs, en particulier sur le trajet des faisceaux.

Cependant le *potentiel vecteur* \vec{A} n'est pas nul sur les trajets des électrons. En effet si l'on considère la boucle fermée Γ , allant de x_0 à x^* par le chemin du haut, et revenant par le chemin du bas, on a d'après le théorème de Stokes (cf appendice A.3.1)

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{l} = \int_{\text{disque}} \text{rot}(\vec{A}) d^2\vec{s} = \int_{\text{disque}} \vec{B} d^2\vec{s} = \phi_B$$

où ϕ_B est le flux (non nul) du champ \vec{B} à travers la boucle Γ . On déduit que \vec{A} est **donc non nul sur le trajet des électrons**. A cause de sa présence dans le Hamiltonien \hat{H} , ce potentiel vecteur \vec{A} est responsable d'une différence de phase entre les deux trajets qui est précisément :

$$\frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} d\vec{l} = \frac{e}{\hbar} \phi_B$$

(voir exercice ci-dessous). Par conséquent, l'intensité $I(x)$ des figures d'interférence observées au point x , dépendent directement du flux magnétique $\phi = \int_{\text{disque}} \vec{B} d\vec{s}$.

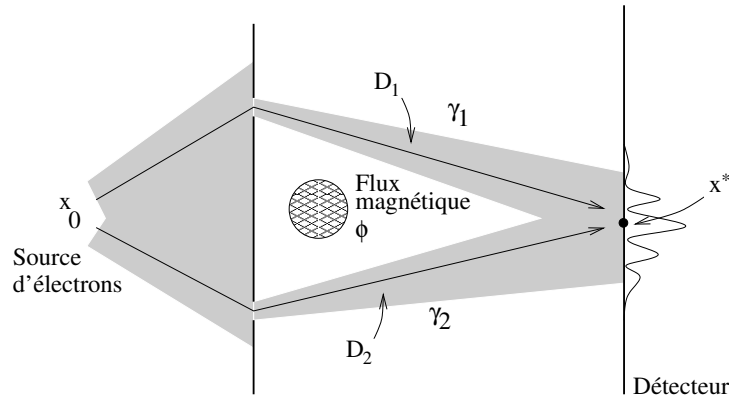


FIGURE 3.2.1 – La fonction d’onde d’un électron est quasiment nulle hors des régions grisées. Le champ magnétique est nul hors de la zone noircie. Cependant les figures d’interférence observées dépendent directement du flux magnétique.

On montre que l’intensité de l’onde au point x du détecteur est (voir TD) :

$$I(x) \simeq \left(1 + \cos \left(\frac{e}{\hbar} \phi_B \right) \right)$$

La conséquence surprenante de cette expérience, est qu’un champ magnétique \vec{B} peut influencer le mouvement d’électrons qui ne le traversent même pas. (Mais dont la fonction d’onde le contourne).

Ce phénomène d’interférences est observé dans des structures semi-conducteurs appelés **SQUID**. Il permet de détecter des changements de champs magnétique très faibles.

Remarque : A l’aide de la “géométrie différentielle” et “la théorie des connexions sur fibrés vectoriels” aussi appelée “théorie de Jauge” on peut formuler l’invariance et les changement de Jauge de façon plus claire. Dans cette formulation il apparait que la phase d’Aharonov Bohm ϕ_B est une “holonomie”, indépendante du choix de Jauge et pouvant donc se manifester physiquement.

3.2.3.1 (*) Le lemme de Poincaré

Il y a un paradoxe apparent dans l’effet Aharonov Bohm. Voici un argument qui est faux : comme $\vec{rot} \vec{A} = \vec{B} = 0$ sur le chemin de l’électron, on devrait trouver une fonction χ telle que $\vec{grad} \chi = \vec{A}$. Le changement de Jauge $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{grad}(\chi)$ donnerait alors $\vec{A}' = 0$ et aucune influence du flux magnétique ϕ_B sur la phase de l’électron.

Réponse : l’erreur de l’argument précédent est que la propriété mathématique $\vec{B} = \vec{rot} \vec{A} = 0 \Rightarrow \exists \chi, tq \vec{A} = \vec{grad} \chi$ n’est pas valable sur le domaine gris de la figure (3.2.1) (d’ailleurs, une preuve que l’on ne peut annuler \vec{A} est que $\oint \vec{A} d\vec{l} = \phi_B \neq 0$). Cette propriété mathématique n’est valable que sur un domaine \mathcal{D} de l’espace **simplement connexe**, c’est

à dire où tout chemin en boucle peut se déformer continument vers un point en restant dans ce domaine.

Plus généralement, les formules bien connues de calcul différentiel

$$\begin{aligned} \vec{\text{grad}} f = 0 &\Rightarrow f = \text{cste} \\ \vec{\text{rot}} \vec{u} = 0 &\Rightarrow \exists f, \text{tg } \vec{u} = \vec{\text{grad}} f \\ \text{div } \vec{v} = 0 &\Rightarrow \exists \vec{u}, \text{tg } \vec{v} = \vec{\text{rot}} \vec{u} \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

sont valable sur un domaine \mathcal{D} de l'espace qui est contractible, c'est à dire déformable en un point ; et ne contenant donc pas de trous. Cette propriété s'appelle le **lemme de Poincaré**³.

Exercice 3.2.4. Chercher un contre exemple simple à chacune des trois règles (3.2.10).

Solution :

1. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Sur \mathbb{R}^+ , $f(x) = 1$, et \mathbb{R}^- , $f(x) = 0$.
2. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. En coordonnée polaires, $\vec{u} = \frac{1}{r} \vec{u}_\theta$.
3. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. En coordonnée sphériques, $\vec{v} = \frac{1}{r^2} \vec{u}_r$.

Exercice 3.2.5. TD sur l'effet Aharanov Bohm.

3.2.4 Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (*)

Dans ce paragraphe, nous donnons une introduction à la description de l'électromagnétisme comme étant "**une théorie de Jauge**". Cette description introduite par les physiciens dans les années 1970', utilise des outils de géométrie introduits par les mathématiciens (H. Whitney, H. Hopf, Pontrjagin, Chern ...) dans les années 1930'-40', comme la notion de **fibré vectoriel** et **connexion sur un fibré vectoriel**,⁴ , que nous allons expliquer.

Cette interprétation a un aspect esthétique certain, mais aussi un gros avantage conceptuel, car cette description se généralise aux autres forces fondamentales de la nature, comme la force nucléaire, la force de gravitation. Cette description a par ailleurs permis en 1973, l'unification de la force électromagnétique avec la force nucléaire faible, dans la théorie dite "**théorie de Jauge électro- faible**", dont la vérification expérimentale a été faite en 1983, avec la découverte des bosons Z_0, Z_\pm et en 2012 avec la découverte du boson de Higgs.

De plus la description géométrique en terme de fibré vectoriel est indispensable pour décrire des phénomènes topologiques ; voir cours de Master 2 pour plus détails [Fau10a].

3. Plus précisément, la condition nécessaire et suffisante sur le domaine \mathcal{D} est que son groupe de cohomologie de De-Rham soit nul, c'est à dire $H_{DR}^0(\mathcal{D}) = 0$, ou $H_{DR}^1(\mathcal{D}) = 0, H_{DR}^2(\mathcal{D}) = 0$, pour respectivement les trois formules ci-dessus, voir [Nak03].

4. "Connection on a vector bundle" en anglais.

Nous rappelons que d'un point de vue physique, nous décrivons une particule chargée *quantique* (décrite par une fonction d'onde ψ), et un champ électromagnétique *classique*. Nous supposons que ce champ influence la particule, mais que celle-ci n'influence pas le champ⁵

3.2.4.1 Nécessité d'une description géométrique

La situation décrite plus haut est insatisfaisante pour deux raisons :

1. L'expérience de Aharonov-Bohm montre que les champs \vec{E}, \vec{B} ne suffisent pas à décrire l'effet du champ électromagnétique sur une particule quantique : il faut l'expression des potentiels \vec{A}, U .
2. Cependant, ces potentiels \vec{A}, U ne sont pas uniquement déterminés : un changement de choix de Jauge arbitraire ne change pas leur effet sur la particule quantique.

Nous allons voir qu'il peut y avoir une description unique et complète du champ électromagnétique, en utilisant une description géométrique adéquate. De la même manière que les coordonnées polaires ou cartésiennes sont des choix différents pour décrire un point dans le plan, différents choix de Jauge, décrivent les mêmes champs électromagnétiques.

3.2.4.2 Autre écriture de l'équation de Schrödinger avec la dérivée covariante

On peut écrire l'équation de Schrödinger (3.2.5), sous la forme :

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + qU\right)\psi + \left(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2\psi = 0$$

Soit :

$$-i\hbar D_t\psi + \left(-i\hbar\vec{D}\right)^2\psi = 0,$$

avec l'opérateur appelé **dérivée covariante** :

$$D : \begin{cases} D_t = \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{qU}{\hbar}\right) \\ D_x = \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{qA_x}{\hbar}\right), \quad D_y = etc... \end{cases}$$

qui a une expression identique sur les quatre axes de l'espace-temps.

Nous allons maintenant donner une description géométrique de la dérivée covariante définie ci-dessus, qui montrera la signification du changement de Jauge.

3.2.4.3 La fonction d'onde comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps

La fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t) \in \mathbb{C}$ est une fonction qui associe une valeur complexe à chaque point $m = (\vec{x}, t)$ de l'espace-temps. D'après (3.2.7), la phase de cette valeur complexe n'est pas uniquement déterminée.

5. Voir discussion à la section 3.2.5 à propos de cette hypothèse.

Cela nous amène à supposer que à chaque point m de l'espace-temps M , est associé un plan vectoriel complexe, appelé fibre F_m , identique à \mathbb{C} , mais *sans choix d'axe réel précisé*. Cependant la norme d'un point $f \in F_m$ est définie, si bien que chaque fibre a une “symétrie de rotation autour de l'origine”. Ainsi si l'on veut associer un nombre complexe $c \in \mathbb{C}$ à $f \in F_m$, il y a le choix arbitraire d'une phase à faire, comme voulu.

La fibre F_m pour chaque $m \in M$ est un plan complexe de dimension 1. Considérant, tous les points m de l'espace temps, l'ensemble de ces fibres forment **un espace fibré sur l'espace-temps**. La fonction d'onde d'une particule quantique est le choix continu d'un point $s(m) \in F_m$ dans chaque fibre : on dit que c'est une **section de l'espace fibré** (car la section “coupe” chaque fibre). Voir figure 3.2.2.

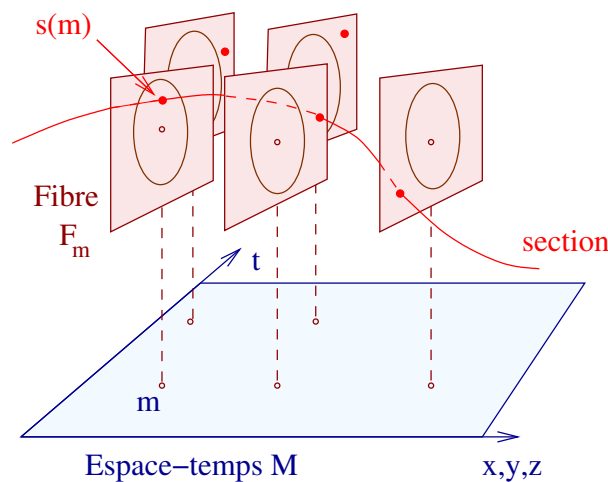


FIGURE 3.2.2 – La fonction d'onde vue comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps. Les cercles représentent les points de norme 1.

3.2.4.4 Le champ électromagnétique comme une connexion sur ce fibré vectoriel

L'espace fibré est l'union des fibres $F = \bigcup_m F_m$. Chaque fibre est “collée” à sa voisine (notion de continuité), mais comme nous l'avons dit il n'y a pas d'axe réel privilégié dans aucune fibre et donc pas d'identification privilégié entre un point d'une fibre et un point d'une fibre voisine, à priori.

Cependant, c'est “le rôle” du champ électromagnétique que d'identifier les fibres voisines entre elles, de les “connecter”. Nous donnons d'abord la description géométrique de cette connexion sur la figure 3.2.3, puis nous verrons comment l'exprimer en formules mathématiques plus loin.

Si m et $m + \delta m$ sont deux points infiniment proches de l'espace temps (distants par un vecteur tangent “infinitésimal” noté δm), chaque point de la fibre F_m est connecté à un point de la fibre $F_{m+\delta m}$. Cette connexion préserve la norme, et l'invariance par rotation

dans chaque fibre⁶. On suppose que cette connexion existe entre m et $m + \delta m$ pour tout point m de l'espace-temps et tout déplacement infinitésimal δm .

Affirmation : *la section $s(m)$ et la connexion sont les seuls objets géométriques nécessaires pour décrire la particule quantique et le champ électromagnétique interagissant avec elle.*

Nous allons maintenant justifier cette affirmation en retrouvant les expressions habituelles de l'électromagnétisme à partir de ces seuls objets.

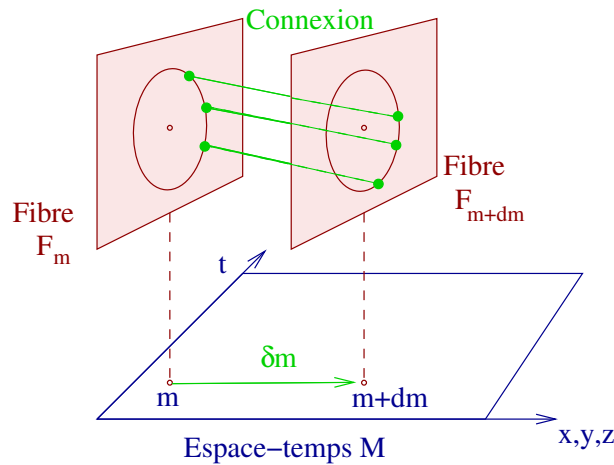


FIGURE 3.2.3 – Le champ électromagnétique est représenté par une connexion qui connecte la fibre F_m à chaque fibre voisine $F_{m+\delta m}$.

3.2.4.5 Signification géométrique de la dérivée covariante \mathcal{D} et courbure de la connexion

À partir de ces deux objets géométriques (section et connexion) voyons ce que l'on peut dire. En un point donné $m \in M$ de l'espace-temps, et pour un déplacement δm donné, on peut comparer la section et la connexion. Plus précisément, voir comment la section s'écarte de la connexion. Voir figure 3.2.4. Cet écart est un vecteur de la fibre F_m , et noté :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s \in F_m$$

et appelé **dérivée covariante de la section selon le vecteur δm** .

Par ailleurs considérons deux vecteurs tangents de l'espace temps $\delta m_1, \delta m_2$, et le petit parcourt qu'ils définissent, partant du point m . Si l'on part d'un point de la fibre $f \in F_m$, et que l'on passe d'une fibre à une autre, au dessus de ce parcourt, en suivant la connexion,

6. On dit alors que cette connexion a le groupe de symétrie $U(1)$ (qui est précisément le groupe des transformations de \mathbb{C} préservant la norme).

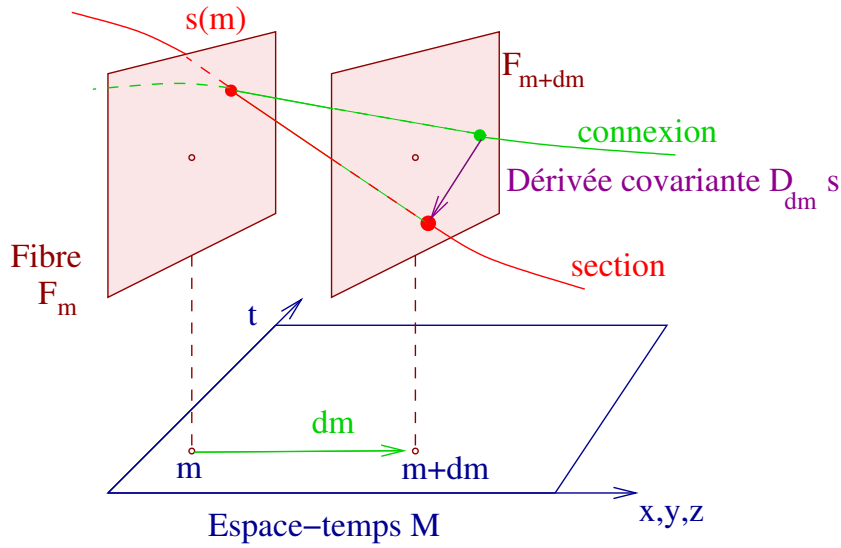


FIGURE 3.2.4 – La dérivée covariante exprime l'écart entre la section et la connexion (ou transport parallèle)

on revient à la fibre de départ F_m , mais en un autre point f^* . L'écart obtenu, appelé **holonomie du parcours** est une phase infinitésimale $\exp(i\delta\varphi)$ que l'on note :

$$\delta\varphi = \mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$$

Le nombre réel $\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$ est appelé **courbure de la connexion au point m , selon les directions $\delta m_1, \delta m_2$** .

Remarques :

- $\mathcal{F}_{(\delta m_2, \delta m_1)} = -\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}$, montrant que \mathcal{F} est antisymétrique (c'est un champ de tenseurs de rang 2 anti-symétrique, ou 2-forme).⁷
- Remarquons aussi pour une généralisation future à d'autres théories de Jauge, que le changement de phase $\exp(i\delta\varphi)$ est la seule transformation autorisée dans la fibre F_m qui préserve la norme. On dit que \mathcal{F} est un générateur (élément de l'algèbre de Lie) du groupe $U(1)$.

3.2.4.6 On retrouve les expressions habituelles de l'électromagnétisme et l'invariance de Jauge

On a décrit la dérivée covariante et la courbure sur un schéma de façon précise mais géométrique. Pour faire des calculs, il nous faut des expressions numériques, et pour cela il faut faire le choix de coordonnées dans chacune des fibres.

7. Rappelons qu'un **tenseur contravariant de rang k** est un objet géométrique en un point m de l'espace-temps qui s'applique sur k vecteurs tangents linéairement et renvoie un nombre. Un tenseur contravariant antisymétrique de rang k est aussi appelé une **k -forme**.

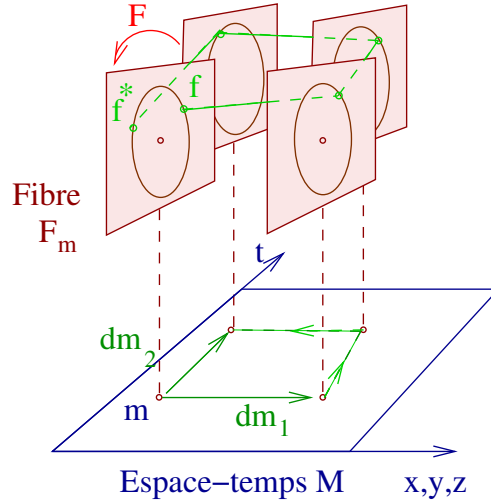


FIGURE 3.2.5 – La courbure \mathcal{F} exprime la différence de phase obtenue après avoir suivi la connexion au-dessus d'une petite boucle de l'espace-temps.

Le **choix d'une Jauge** (aussi appelé **trivialisation du fibré**) est le choix d'un axe réel de référence dans chacune des fibre F_m . Ce choix est arbitraire, il n'a pas de signification physique, mais permet d'exprimer les objets géométriques précédents. (Comme le choix d'axes gradués sur le plan permet de repérer les points par des coordonnées). Dans chaque fibre F_m , le choix de Jauge revient donc à associer le nombre 1 à un point arbitraire (de module 1) $r(m)$, appelé **section unitaire de référence**.

La fonction d'onde ψ : Par rapport à la section de référence $r(m)$, la valeur de la section $s(m)$ est caractérisée par le nombre complexe $\psi(m) \in \mathbb{C}$ en écrivant :

$$s(m) = \psi(m) r(m).$$

La section s est donc caractérisée par la **fonction d'onde complexe** $\psi(m)$.

Le potentiel électromagnétique \mathcal{A} : En un point donné $m \in M$, et pour un vecteur tangent δm donné, l'écart que fait la section de référence r avec la connexion s'exprime par la dérivée covariante $(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) \in F_m$. Comme $r(m)$ est de module 1, et que la connexion conserve la norme (sur la figure, $r(m)$ et $\mathcal{D}_{\delta m} r$ forment un angle droit dans la fibre, traduisant la multiplication par i), cet écart s'exprime donc comme

$$(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) = (i\mathcal{A}_{\delta m}) r(m) \quad (3.2.11)$$

où $\mathcal{A}_{\delta m}$ est un nombre réel (i.e. \mathcal{A} est un tenseur de rang 1, ou 1-forme). Voir figure 3.2.6.

La dérivée covariante : L'écart de la section s par rapport à la section de référence, selon la direction δm est $ds_{\delta m} = (d\psi)_{\delta m} r$. Noter que cet écart dépend du choix de r et n'a

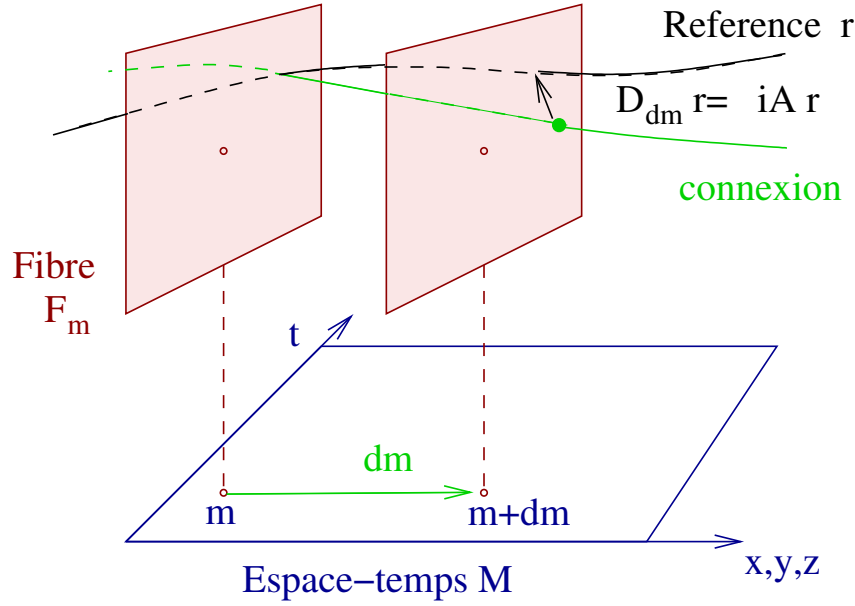


FIGURE 3.2.6 – Le potentiel électromagnétique \mathcal{A} exprime comment la section de référence r s'écarte du transport parallèle (ou connexion).

donc pas de signification physique. Mais en utilisant cette section de référence, la dérivée covariante se décompose en deux termes, d'après⁸ la figure 3.2.7 :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s = \mathcal{D}_{\delta m} (\psi r) = ((d\psi)_{\delta m} + i\mathcal{A}_{\delta m} \psi(m)) r$$

Chacun de ces deux termes dépend du choix de r mais la somme n'en dépend pas.

Ainsi en prenant pour δm tour à tour les quatre vecteurs tangents $\delta m = \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial t}$, d'un référentiel donné, la dérivée covariante s'écrit

$$\mathcal{D}_{\partial/\partial x} s = \left(\underbrace{(d\psi)_{\partial/\partial x} + i\mathcal{A}_{\partial/\partial x} \psi}_{D_x \psi} \right) r$$

avec la dérivée covariante de la fonction d'onde (déjà introduite plus haut) :

$$D_x \psi = (d\psi)_{\partial/\partial x} + i\mathcal{A}_{\partial/\partial x} \psi = \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{qA_x}{\hbar} \right) \psi$$

à condition de poser :

$$\mathcal{A}_{\partial/\partial x} = -\frac{qA_x}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial y} = -\frac{qA_y}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial z} = -\frac{qA_z}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial t} = \frac{qU}{\hbar},$$

(on fait de même pour D_y, D_z, D_t).

8. Cette relation s'écrit aussi $\mathcal{D}(\psi r) = (d\psi) r + \psi \mathcal{D}(r)$, et s'appelle **la règle de Leibnitz**. Elle sert de définition à la dérivée covariante dans les ouvrages de géométrie.

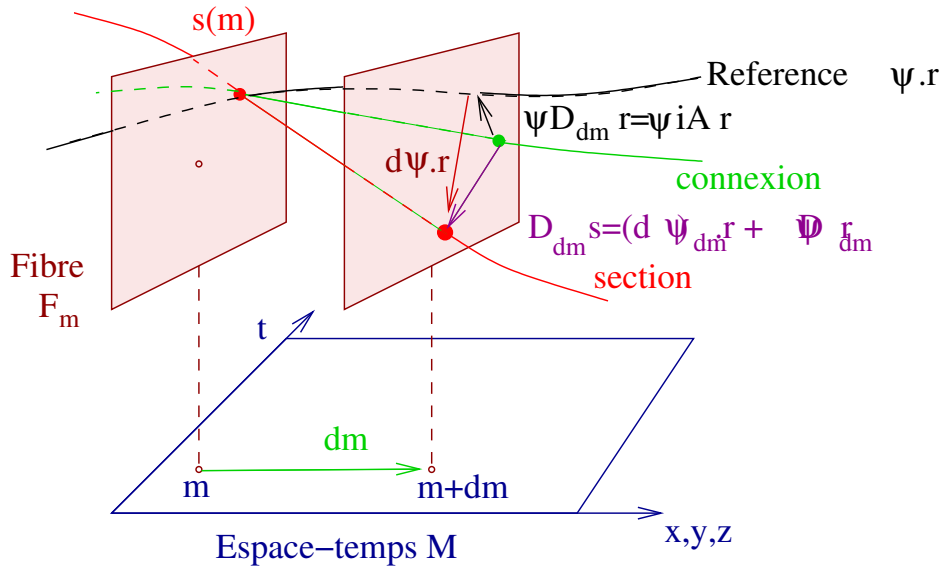


FIGURE 3.2.7 – Décomposition de la dérivée covariante, en utilisant la section de référence $\psi_m r$ (ici ψ_m est une constante).

Le tenseur électromagnétique et la courbure \mathcal{F} : Montrons que la courbure \mathcal{F} définie ci-dessus s'identifie avec le tenseur électromagnétique F de l'électromagnétisme. Considérons l'exemple où l'on choisit les deux vecteurs déplacements selon des axes du référentiel : $\delta m_1 = \partial/\partial x$ et $\delta m_2 = \partial/\partial y$. On calcule :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} &= i(\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x) r \\ &= -\frac{iq}{\hbar} F_{x,y} r\end{aligned}$$

avec le tenseur électromagnétique $F_{x,y} = (\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x)$ etc.. pour les autres composantes.

Démonstration. D'après la figure

$$\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} = \mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r - \mathcal{D}_y \mathcal{D}_x r$$

or d'après la règle de Leibnitz

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r &= \mathcal{D}_x (i \mathcal{A}_y r) = i(\partial_x \mathcal{A}_y) r + i \mathcal{A}_y (\mathcal{D}_x r) \\ &= i(\partial_x \mathcal{A}_y) r + i \mathcal{A}_y i \mathcal{A}_x r\end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} &= \mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r - \mathcal{D}_y \mathcal{D}_x r \\ &= i(\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x) r\end{aligned}$$

□

Effet d'un changement de Jauge : Si on change de choix de section de référence en posant

$$r'(m) = e^{-iq\chi(m)/\hbar} r(m)$$

avec $m \rightarrow \chi(m)$ fonction réelle, alors par définition on doit écrire

$$s(m) = \psi(m)r(m) = \psi'(m)r'(m) = \psi'(m)e^{-iq\chi(m)/\hbar} r(m)$$

la valeur de $\psi'(m)$ est donc changée par une phase :

$$\psi'(m) = e^{i\frac{q\chi(m)}{\hbar}} \psi(m)$$

comme sur la relation (3.2.7). De même la valeur de $\mathcal{A} = \frac{q}{\hbar} (-\vec{A}, U)$ change selon :

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\chi, \quad U' = U - \partial_t\chi$$

comme les formules de transformation de Jauge (3.2.3).

Démonstration. Utilisant la règle de Leibnitz

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_x r' &= (\mathcal{D}_x (e^{-iq\chi/\hbar} r)) \\ &= \partial_x (e^{-iq\chi/\hbar} r) + e^{-iq\chi/\hbar} \mathcal{D}_x r \\ &= -\frac{iq}{\hbar} (\partial_x \chi) e^{-iq\chi/\hbar} r + e^{-iq\chi/\hbar} i\mathcal{A}_x r \\ &= i \left(-\frac{q}{\hbar} (\partial_x \chi) + \mathcal{A}_x \right) e^{-iq\chi/\hbar} r \end{aligned}$$

Par ailleurs

$$\mathcal{D}_x r' = i\mathcal{A}'_x r' = i\mathcal{A}'_x r' = i\mathcal{A}'_x e^{-iq\chi/\hbar} r$$

Par identification on déduit

$$\mathcal{A}'_x = \mathcal{A}_x - \frac{q}{\hbar} (\partial_x \chi)$$

donnant

$$A'_x = A_x + \partial_x \chi$$

etc... pour les autres composantes y, z, t soit

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\chi, \quad U' = U - \partial_t\chi$$

□

Résumé

- En théorie de Jauge de l'électromagnétisme, la particule quantique est une section d'un fibré vectoriel sur l'espace-temps.
- Le champ électromagnétique est décrit par une connexion de ce fibré. La courbure du fibré qui représente l'holonomie infinitésimale exprime la présence de champs électrique et magnétique (c'est le tenseur $F_{\mu\nu}$).
- L'équation d'évolution de Schrödinger fait intervenir la dérivée covariante qui exprime l'écart que fait la section avec la connexion du fibré.
- Un choix de Jauge est le choix d'un repère dans chacune des fibres, et permet d'obtenir des expressions en terme de fonction numériques (et champs de tenseur). Mais ces expressions dépendent de ce choix.

3.2.4.7 Généralisation : Théories de Jauge de Yang-Mills

Il est facile de généraliser la description précédente en considérant d'autres espace fibrés vectoriels de dimension plus grande. Cette simple généralisation permet de décrire les autres théories de Jauges de la nature que sont la **force électro-faible** (force électromagnétique et **force nucléaire faible**) et la **force nucléaire forte**, aussi appelée théorie de la **Chromo-dynamique**. La force électro-faible nécessite la notion de Champs de Higgs, et la brisure spontanée de symétrie. Pour simplifier, nous esquisserons ici seulement la Chromo-Dynamique.

La théorie de la Chromodynamique permet de décrire **les quarks** (qui sont les champs quantiques de matière ; leur fonction d'onde sera la section d'un fibré) qui subissent l'effet d'un champ de Jauge qui est **le champ de gluons** (ce sera la connexion du fibré). Tous ces objets là se trouvent dans les noyaux nucléaires, les protons et les neutrons et forment l'essentiel de ceux ci.

Dans la théorie de Jauge Chromo-dynamique chaque fibre F_m est maintenant un espace de dimension complexe 3. Ainsi **chaque fibre est isomorphe à \mathbb{C}^3** , mais il n'y a pas de repère privilégié, et donc une invariance par les rotations dans \mathbb{C}^3 qui sont représentées justement par **le groupe SU(3)** (matrices 3×3 complexes unitaires de déterminant 1, voir [Fau10b]).

On peut reprendre la description précédente sans difficulté (les formules sont les mêmes) et voici les modifications majeures :

- Une section de référence (ou choix de Jauge) $r(m) \in F_m$ est maintenant un repère avec trois vecteurs de base, appelés **Rouge-Vert-Bleu** (par analogie lointaine avec la perception de la lumière par les humains possédant trois types de récepteurs). Chaque fibre F_m de dimension 3 est appelée "**espace des couleurs**".
- Une section du fibré est une fonction d'onde de quarks. Par rapport à une section de référence (choix de Jauge) cette section est représentée par 3 fonctions d'ondes ($\psi_{Rouge}, \psi_{Vert}, \psi_{Bleu}$) appelées **les trois couleurs des quarks**. (Bien sûr, un autre choix de Jauge mélange ces couleurs, qui sont donc arbitraires.)
- La courbure de la connexion \mathcal{F} est une rotation infinitésimale dans la fibre F_m de dimension 3 ; par conséquent cette courbure est un générateur du groupe SU(3).

Comme ce groupe est de dimension 8 cela signifie que exprimé par rapport à une section de référence, la courbure \mathcal{F} est un champ à 8 composantes. Ce sont les **8 champs de gluons** possibles⁹. Attention que ces 8 composantes dépendent du choix de Jauge.

- L'équation de Schrödinger s'écrira de la même manière, en faisant intervenir la dérivée covariante.

En fait, pour que la théorie de la Chromo-dynamique ait une utilité par rapport aux expériences, il est nécessaire d'apporter deux améliorations par rapport à la description donnée ici :

1. Considérer la **version relativiste**. En effet les quarks sont "légers" ($m_q c^2 \simeq 5$ MeV) et toujours en régime ultra-relativiste dans les noyaux nucléaires. L'essentielle de leur énergie E est sous forme d'énergie cinétique E_c . Un proton au repos (ou un neutron) étant constitué de trois quarks, son énergie est l'énergie totale de ces quarks et d'après $E = m_p c^2 = 938 \text{ MeV}$ la masse (virtuelle) du proton provient essentiellement de l'énergie cinétique des trois quarks (u,u,d) (ou (u,d,d) pour le neutron) et des gluons. La matière ordinaire de notre monde de tous les jours est donc "virtuelle" et faite d'énergie cinétique en quasi-totalité.
2. Les quarks influencent les gluons, et il est donc important de **quantifier le champ de gluons** (d'après une remarque de la section suivante. Cela consiste à quantifier la connexion...ce qui n'est pas une chose aisée. De nombreux physiciens et mathématiciens cherchent encore une formulation élégante et géométrique de cela. Lire l'article de E. Witten 2007 (disponible sur la page web [Faua]). La résolution de ce problème n'est pas connue et est considérée à ce jour comme un des plus grands défis pour la physique et les mathématiques. (ref : wikipedia).

9. **Exercice de mathématique** : Plus généralement, montrer que le groupe de matrice $SU(n)$ agissant dans \mathbb{C}^n est de dimension $n^2 - 1$. Ainsi $\dim(SU(3)) = 9 - 1 = 8$.

Solution :

Si l'on écrit une matrice $n \times n$, $M \in SU(n)$ sous la forme $M = e^{iG}$ (on appelle G le générateur), alors la contrainte M unitaire s'écrit

$$M^+ = M^{-1} \Leftrightarrow e^{-iG^+} = e^{-iG} \Leftrightarrow G^+ = G$$

et la contrainte que $\det(M) = 1$ s'écrit

$$\det(M) = e^{i\text{Tr}(G)} = 1 \Leftrightarrow \text{Tr}(G) = 0$$

Par conséquent il suffit de compter la dimension des matrices G hermitiques ($\overline{G_{ji}} = G_{ij}$) et de trace nulle ($\sum_i G_{ii} = 0$). Pour une telle matrice il y a $n(n-1)/2$ éléments complexes indépendants G_{ij} hors de la diagonale $i \neq j$, soit $n(n-1)$ variables réelles, et n éléments réels G_{ii} indépendants sur la diagonale moins la contrainte de trace nulle, soit

$$\dim(SU(n)) = n(n-1) + n - 1 = n^2 - 1$$

3.2.5 Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique

Le Hamiltonien (3.2.4) décrit la dynamique d'une particule *quantique sous l'influence* d'un champ électromagnétique *classique* dit extérieur. Il est très important de comprendre qu'il n'est pas possible de décrire l'action inverse i.e. l'influence de la particule quantique sur le champ classique, bien que cette influence réciproque est bien présente dans la nature. Nous allons montrer que pour le faire il est *nécessaire de considérer le champ électromagnétique comme quantique*.

Ceci est très général : on peut parfaitement avoir un modèle physique cohérent décrivant l'influence d'un sous système classique sur un sous-système quantique, mais pas l'inverse. On peut bien sûr avoir un modèle cohérent décrivant l'interaction entre deux systèmes classiques (par exemple l'électrodynamique classique, qui décrit un champ classique avec des particules chargées classiques), ou entre deux systèmes quantiques. L'exemple suivant explique simplement pourquoi.

En électrodynamique classique, un électron accéléré émet une onde électromagnétique (rayonnement), issue du lieu x où l'électron est présent.

Si maintenant, cet électron est une fonction d'onde quantique localisée en x_1 (toujours accéléré) notée $|x_1\rangle$ on s'attend à ce qu'il émette une onde électromagnétique issue de x_1 notée $|em_1\rangle$, le résultat serait alors $|x_1\rangle \otimes |em_1\rangle$. De même si l'électron est en $|x_2\rangle$, on obtient $|x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$. Mais la mécanique quantique de l'électron permet un état superposé comme $|\psi\rangle = |x_1\rangle + |x_2\rangle$, (où l'onde de l'électron est dé-localisée) et qui d'après le principe de superposition, devrait donner :

$$|\text{etat final}\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$$

c'est à dire une superposition de deux ondes électromagnétique, ce qui ne rentre pas dans le cadre de l'électromagnétisme classique, mais nécessite bien une description quantique.

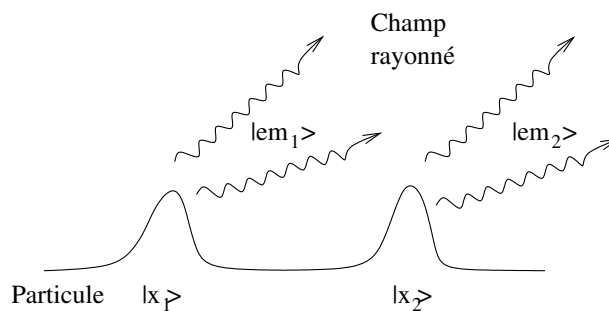


FIGURE 3.2.8 – Schéma montrant l'état $|\text{etat final}\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$.

Cela est relié à une importante problématique qui date depuis les années 1920 et encore actuelle qui est de rechercher la **théorie quantique de la gravitation**. C'est la même situation que précédente, avec le champ de gravitation remplaçant le champ électromagnétique. En effet la théorie d'Einstein de la relativité générale est une théorie classique,

qui décrit la dynamique du champ de gravitation classique (plus précisément le champ métrique de l'espace-temps). Dans cette théorie classique, le champ de gravitation influence la matière et inversement la matière influence le champ de gravitation. Par exemple le Soleil émet un champ gravitationnel que ressent la Terre et détermine sa trajectoire circulaire autour du Soleil. Mais la théorie quantique apparue dans les mêmes années, décrit la matière comme quantique. Puisque celle-ci influence le champ de gravitation, il faut donc selon cette analyse une théorie quantique de la gravitation. La recherche d'une telle théorie est toujours d'actualité. Les efforts les plus actifs en ce moments concernent la "M-théorie" et la "théorie des cordes". Ref : http://www.damtp.cam.ac.uk/user/gr/public/qg_ss.html.

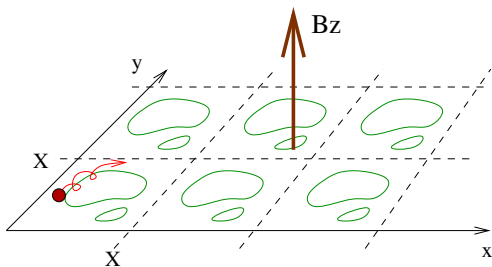
Peut être que ces arguments sont trop naïfs, et que la physique connaîtra un plus grand bouleversement pour résoudre ces questions.

3.3 (*) Niveaux de Landau et spectre fractal de Hofstadter

Dans l'exercice suivant, on propose d'étudier des électrons bidimensionnels dans un champ magnétique constant, avec un potentiel périodique.

- Sans potentiel, le spectre est simple : ce sont les **niveaux de Landau**.
- Avec le potentiel périodique, le spectre est fractal et a été étudié dans *D. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields" Phys.Rev.B 14,2239, (1976)*. Il est (partiellement) observé expérimentalement dans : *Albrecht et al. "Evidence of the Hofstadter Fractal energy spectrum in the Quantized Hall Conductance " Phys.Rev.Lett. 86,147 (2001)*. Chercher "hofstadter butterfly" dans Google.

Exercice 3.3.1. On considère des électrons libres, confinés dans un plan (x, y) (entre deux couches de semi-conducteurs). On impose un fort champ magnétique transverse, constant et uniforme $\vec{B} = B \vec{e}_z$, $B = 0.21 \text{ Tesla}$. On suppose les électrons indépendants.



De plus on suppose que dans ce plan, les électrons subissent un potentiel périodique $V(x, y)$ de période $X = 0, 2\mu m$, (respectivement en x, y), qui est créé par des grilles électrostatiques artificielles.

1. Montrer que $\vec{A} = (A_x = -\frac{1}{2}By, A_y = \frac{1}{2}Bx, A_z = 0)$ est une expression possible pour le potentiel vecteur. Écrire le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - e\vec{A})^2 + V(\hat{x}, \hat{y})$ décri-

vant la dynamique d'un électron, à partir des opérateurs $(\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{y}, \hat{p}_y)$, (sans développer).

- (a) On propose d'effectuer le changement de variables suivant $(\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{y}, \hat{p}_y) \rightarrow (\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$:

$$\begin{cases} Q = \frac{1}{\sqrt{\hbar e B}} \left(p_x + \frac{eB}{2} y \right) \\ P = \frac{1}{\sqrt{\hbar e B}} \left(p_y - \frac{eB}{2} x \right) \end{cases} \quad \begin{cases} q = \frac{1}{eBX} \left(p_x - \frac{eB}{2} y \right) \\ p = -\frac{1}{eBX} \left(p_y + \frac{eB}{2} x \right) \end{cases},$$

Quelles sont les unités physiques de $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$? Calculer les commutateurs des opérateurs $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$ deux à deux, pour vérifier que ce sont bien des variables canoniques ? On introduira une "constante de Planck effective"

$$\hbar_{eff} = \frac{\hbar}{eBX^2}$$

Exprimer \hbar_{eff} à partir du flux $\phi = BX^2$ de B à travers la surface élémentaire X^2 et du "quantum de flux" ou **fluxon** $\phi_0 = h/e$?

- (b) En introduisant la fréquence cyclotron $\omega = eB/m$, donner l'expression de \hat{H} en fonction des nouveaux opérateurs $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$, $(\hbar\omega)$, X et \hbar_{eff} ?
- (c) Dans le cas d'un potentiel nul, $V = 0$, donner l'expression des niveaux d'énergie E_n de \hat{H} , appelés **niveaux de Landau**, et donner leur multiplicité. Interprétation ?
- (d) Dans le cas V quelconque, remarquer que H est périodique par rapport aux variables (q, p) . Donner l'expression des opérateurs de translations \hat{T}_q, \hat{T}_p qui correspondent à cette périodicité et qui commutent donc avec \hat{H} (Attention à ne pas confondre \hbar_{eff} et \hbar).
- (e) En utilisant la relation de Glauber ($e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{[\hat{A}, \hat{B}]} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}}$ valable si $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$), exprimer $\hat{T}_p \hat{T}_q$ à partir de $\hat{T}_q \hat{T}_p$? Dédire que l'on a $[\hat{T}_q, \hat{T}_p] = 0$ si et seulement si

$$\frac{1}{2\pi\hbar_{eff}} = N \in \mathbb{N} \quad : \text{entier} \quad (3.3.1)$$

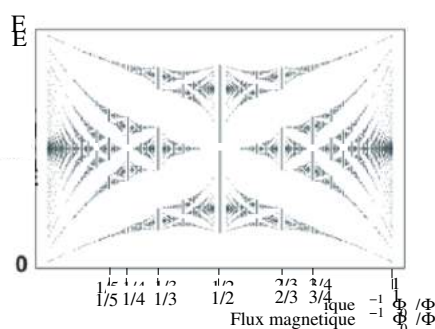
Traduire cette condition en terme du flux $\phi = BX^2$ de B à travers la surface élémentaire X^2 , par rapport au quantum de flux $\phi_0 = h/e$?

Application numérique : que vaut N pour les valeurs de $B = 0,21 \text{ Tesla}$ et $X = 0,2 \mu\text{m}$, $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$?

- (f) En supposant la condition (3.3.1) remplie, et en analogie avec la théorie de Bloch pour les cristaux, déduire la nature du spectre de H ?
- (g) On suppose maintenant V faible mais non nul, et on s'intéresse au premier niveau de Landau ; on supposera donc que les variables (Q, P) sont "gelées" et seuls le

degré de liberté (q, p) subsiste. D'après ci-dessus une fonction d'onde stationnaire $\psi(q)$ est 1-périodique et sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ est aussi 1-périodique. Montrer que l'espace de ces fonctions est de dimension N . Que devient donc le premier niveau de Landau sous l'effet de la perturbation de V ?

- (h) Une variation continue de la valeur du flux ϕ implique une variation continue de la valeur de $1/(2\pi\hbar_{eff})$ (parmi les nombres réels). En utilisant le fait que tout nombre réel s'approche par un rationnel $a/b \in \mathbb{Q}$, montrer comment on peut se ramener à la condition (3.3.1), étudiée ci-dessus (Aide : il faut considérer une cellule élémentaire différente). Discuter alors l'allure fractale du spectre du premier niveau de Landau, obtenu numériquement sur la figure ci-dessous, appelée **papillon de Hofstadter**¹⁰ (pour $V(x, y) = Cste(\cos(x/X) + \cos(y/X))$).



3.4 Conseils de Lecture

- Sur l'invariance de Jauge : Cohen-Tannoudji [CBF], complément H_{III} .
- Niveaux de Landau : Cohen-Tannoudji [CBF], complément E_{VI} .
- Effet Aharonov-Bohm : Sakurai [J.J85], chapitre 2.6.
- Documents sur la page web du cours (Article de Witten).

Pour approfondir :

- L'aspect géométrique de l'électromagnétisme et des théorie de Jauge :
 - Nakahara [Nak03].
 - Notes de cours de M2. [Fau10a]

10. Ce spectre a été étudié dans *D. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields" Phys.Rev.B 14,2239, (1976)*. Il est (partiellement) observé expérimentalement dans : *Albrecht et al. "Evidence of the Hofstadter Fractal energy spectrum in the Quantized Hall Conductance" Phys.Rev.Lett. 86,147 (2001)*. Chercher "hofstadter butterfly" dans Google.

Chapitre 4

Particule de spin 1/2

Dans ce chapitre nous montrons comment décrire les degrés de liberté interne d'une particule formés par son spin (moment angulaire intrinsèque).

Jusqu'à présent, l'état quantique d'une particule est décrite par sa fonction d'onde $|\psi\rangle$. Celle-ci est vue comme un vecteur de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ (qui est de dimension infinie).

Pour certaines particules (électron, neutron, protons, . . . voir plus loin) l'expérience montre qu'elles possèdent un **moment cinétique intrinsèque** \vec{s} , appelé **spin**, et qu'il y a seulement *deux états de spin distincts*. "to spin" signifie "tourner sur soi-même". Nous verrons que c'est l'image que l'on peut se faire d'un électron. La direction du spin est la direction de l'axe rotation.

Dans l'expérience de "Stern-Gerlach" un faisceau de particules neutres (comme le neutron) toutes dans le même état initial, traverse un champ magnétique non homogène. Le champ magnétique interagit avec le moment cinétique \vec{s} de chaque particule, et par conséquent la trajectoire de chaque particule est défléchie selon la valeur de son moment cinétique intrinsèque \vec{s} . On observe deux trajectoires distinctes à la sortie du dispositif, correspondant à deux états de spin orientés parallèlement (ou anti-parallèlement) à l'axe z , que l'on notera respectivement $|+_z\rangle$, $|-_z\rangle$.

Le détail sur l'interaction du spin avec le champ magnétique sera présenté dans la section 4.9.

4.1 L'espace des états de spin

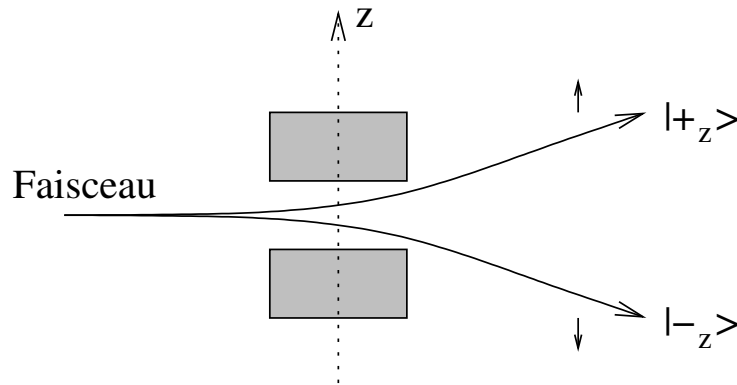


FIGURE 4.0.1 – Dispositif de Stern-Gerlach séparant les états de spin $|+_z\rangle$ ou $|-_z\rangle$ de la particule.

Définition 4.1.1. on part de **deux principes** à priori :

1. Tout d’abord le principe suggéré par l’expérience (et le formalisme quantique, autorisant les superpositions d’états) que l’état de spin $|s\rangle$ de la particule est décrit par un vecteur dans un espace vectoriel complexe noté \mathcal{H}_{spin} qui est **de dimension deux**, engendré par les deux états *orthogonaux* $|+_z\rangle, |-_z\rangle$. Ces deux états correspondent à des spins hauts et bas parallèles à l’axe z . Autrement dit un état de spin général est de la forme :

$$|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin}, \quad a, b \in \mathbb{C} \quad (4.1.1)$$

2. Le deuxième principe est qu’il **n’y a pas de direction privilégiée** (dans l’univers).

Remarques :

- Pour relier cet état de spin $|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle$ à la “mesure du spin selon l’axe z ” dans l’appareil de Stern-Gerlach, figure 4.0.1, rappelons que le principe de la mesure stipule que la probabilité d’observer la particule dans le faisceau supérieur sera alors $P_+ = \frac{|\langle +_z | s \rangle|^2}{\langle s | s \rangle} = \frac{|a|^2}{|a|^2 + |b|^2}$ et la probabilité $P_- = \frac{|\langle -_z | s \rangle|^2}{\langle s | s \rangle} = \frac{|b|^2}{|a|^2 + |b|^2}$ de l’observer dans le faisceau du bas. Après une détection, si la particule a été détectée dans le faisceau du haut (par exemple), l’état de spin sera $|s\rangle = |+_z\rangle$.
- Le problème dans l’écriture (4.1.1) de l’état $|s\rangle$ ci-dessus, est que l’axe z semble jouer un rôle privilégié, en contradiction avec le deuxième principe énoncé. Il nous faudra trouver une description d’un état de spin sans faire référence à une direction privilégiée.
- (*) Mathématiquement, la question précédente correspond à chercher une “représentation projective du groupe de rotation $SO(3)$ dans l’espace \mathbb{C}^2 ”. La théorie des

représentation montre qu'elle existe et est unique. Ce sera $\mathcal{D}_{1/2}$.

- Une autre question qui se pose est que les états $|+z\rangle, |-z\rangle$ correspondent à une direction du moment cinétique particulière dans l'espace (haut et bas). Est-ce qu'il en est de même pour l'état général $|s\rangle$, (4.1.1)? A quelle direction \vec{s} correspond t-il? On répondra à cette question dans la section 4.4.
- La description quantique du spin est plus simple que la description de la fonction d'onde car l'espace de Hilbert est ici de dimension 2 seulement. Par contre, l'interprétation géométrique de cet espace est assez délicate, nous allons donc le faire de façon progressive.
- Remarque très importante : lorsqu'il s'agit du spin 1/2 il est question de deux espaces qui entrent en jeu et qu'il ne faut pas confondre : l'**espace quantique du spin** \mathcal{H}_{spin} définit plus haut qui est un espace vectoriel complexe de dimension deux, et l'**espace ordinaire** \mathbb{R}^3 qui est un espace réel de dimension 3 avec les variables de position (x, y, z) .

La première observation est que dans l'espace ordinaire, la représentation des états $|+z\rangle, |-z\rangle$ forme un angle de 180° entre eux, alors que dans l'espace de spin \mathcal{H}_{spin} , ils sont orthogonaux, et forment donc un angle de 90° . Imaginons un état de spin $|s_\theta\rangle$ intermédiaire, qui dans l'espace ordinaire, est l'état $|+z\rangle$ tourné de l'angle θ autour de l'axe y . Ainsi $|s_{\theta=0}\rangle = |+z\rangle$ et $|s_{\theta=\pi}\rangle = |-z\rangle$. Par conséquent dans l'espace de spin :

$$|s_\theta\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-z\rangle \quad (4.1.2)$$

décrit un état de spin quelconque dans le plan (x, z) . Cela est clair sur la figure 4.1.1.

- L'état $|s_\theta\rangle$ que nous venons de construire s'obtient par l'action d'une rotation d'un angle θ autour de l'axe y . On note $\hat{R}_y(\theta)$ l'opérateur unitaire qui effectue cette opération et donc :

$$|s_\theta\rangle = \hat{R}_y(\theta)|+z\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-z\rangle$$

La rotation de l'état initial $|-z\rangle$ est de même (il est orthogonal au précédent) :

$$\hat{R}_y(\theta)|-z\rangle = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|+z\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|-z\rangle$$

En multipliant les équations précédentes par $\langle \pm_z |$ on obtient les éléments de matrice $\langle \pm_z | \hat{R}_y(\theta) | \pm_z \rangle$ de l'opérateur de rotation $\hat{R}_y(\theta)$ dans la base $|\pm_z\rangle$:

$$\hat{R}_y(\theta) \equiv_{(\text{base } |\pm_z\rangle)} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (4.1.3)$$

- Comme les rotations autour de l'axe y fixé, vérifient la relation de groupe $\hat{R}_y(\theta_2)\hat{R}_y(\theta_1) = \hat{R}_y(\theta_1 + \theta_2)$ (comme la fonction exponentielle) il est naturel de poser $\hat{R}_y(\theta) =$

$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{S}_y\right)$ où \hat{S}_y est une matrice 2×2 appelée générateur des rotations du spin autour de l'axe y (ou opérateur de spin). On le calcule facilement d'après $\left(\frac{d}{d\theta}\hat{R}_y(\theta)\right)_{\theta=0} = -\frac{i}{\hbar}\hat{S}_y$. Cela donne

$$\hat{S}_y = i\hbar \left(\frac{d}{d\theta}\hat{R}_y(\theta)\right)_{\theta=0} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

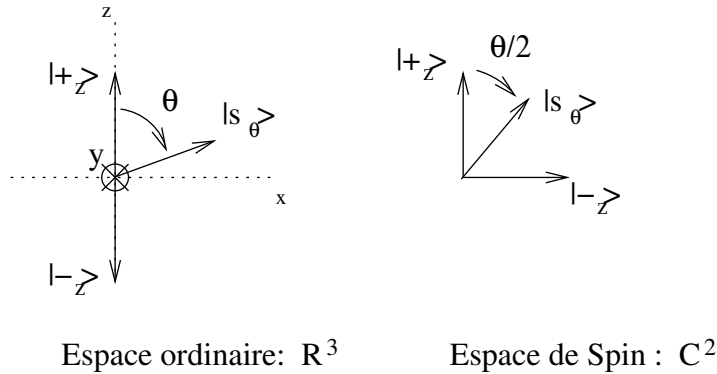


FIGURE 4.1.1 – Pour un spin dans le plan (x, z) , l'espace ordinaire et l'espace de spin sont directement reliés.

4.2 Rotation de 2π et 4π d'un spin

On observe sur la figure (4.1.1), que une rotation de (2π) change le signe du vecteur dans l'espace de spin :

$$\hat{R}_y(2\pi)|+_z \rangle = -|+_z \rangle$$

Seulement une rotation de (4π) ramène l'état de spin à son état initial :

$$\hat{R}_y(4\pi)|+_z \rangle = |+_z \rangle$$

Plus généralement, d'après (4.1.3) on a

$$\hat{R}_y(2\pi) = -\hat{\text{Id}}, \quad \hat{R}_y(4\pi) = \hat{\text{Id}}.$$

Ce signe $(-)$ est assez surprenant. On peut penser au premier abord qu'il est non détectable car une mesure détecte des probabilités, le module des amplitudes, et non pas les phases. Mais on peut imaginer de séparer le faisceau en deux et de détecter les phases par un phénomène d'interférences, comme sur la figure (4.2.1). Une interprétation géométrique est de dire que l'espace de spin est un **double recouvrement** de l'espace des directions de l'espace ordinaire. Ainsi une rotation de 2π ne suffit pas à obtenir l'état initial, il faut 4π . Voir figure (4.2.2). Voir plus loin une discussion plus précise.

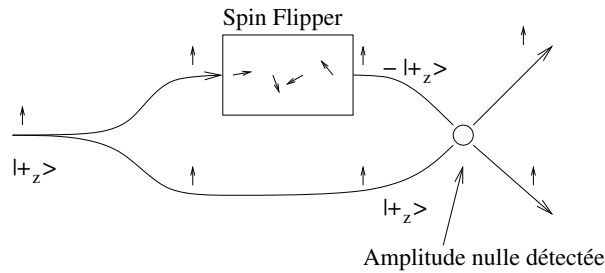


FIGURE 4.2.1 – Le spin-flipper effectue une rotation de $2\pi \equiv 360^\circ$ à la direction du spin. Par conséquent à la sortie l'état est $-|+z \rangle$, et au lieu d'interférence, l'amplitude est $|+z \rangle - |+z \rangle = 0$.

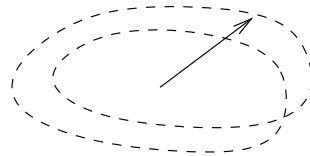


FIGURE 4.2.2 – Schéma du double recouvrement.

4.3 Générateurs des rotations et matrices de rotation

Les opérateurs de rotation $\hat{R}_y(\theta)$ autour de l'axe y forment un groupe à un paramètre θ d'après les 3 critères (4.3.1) :

$$\hat{R}_y(\theta_1)\hat{R}_y(\theta_2) = \hat{R}_y(\theta_1 + \theta_2) \quad : \text{loi de composition} \quad (4.3.1)$$

$$\hat{R}_y(0) = Id \quad : \text{élément neutre} \quad (4.3.2)$$

$$\left(\hat{R}_y(\theta)\right)^{-1} = \hat{R}_y(-\theta) \quad : \text{inverse} \quad (4.3.3)$$

On notera de même $\hat{R}_x(\theta)$, $\hat{R}_z(\theta)$ les opérateurs de rotation autour des autres axes de base x, z respectivement.

On peut considérer les générateurs correspondant à ces rotations comme pour eq(??) :

Définition 4.3.1. L'opérateur de spin selon y noté respectivement \hat{S}_y est le générateur de l'opérateur de rotation $\hat{R}_y(\theta)$ c'est à dire :

$$\forall \theta, \quad \hat{R}_y(\theta) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{S}_y\right) \quad (4.3.4)$$

De même pour les autres axes :

$$\forall \theta, \quad \hat{R}_x(\theta) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{S}_x\right), \quad \hat{R}_z(\theta) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{S}_z\right)$$

Remarque : de façon équivalente, on peut écrire l'équivalent de l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d|s_\theta\rangle}{d\theta} = \left(\frac{-i\hat{S}_y}{\hbar}\right)|s_\theta\rangle, \quad \text{avec } |s_\theta\rangle = \hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle$$

et de même avec les axes x, z .

Proposition 4.3.2. Dans la base $|\pm_z\rangle$,
Les opérateurs $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ sont représentés par les matrices :

$$\hat{S}_{x,y,z} \equiv_{(base\ |\pm_z\rangle)} \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z},$$

avec les **matrices de Pauli** :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.3.5)$$

Les deux valeurs propres de chacun de ces opérateurs sont $(\pm\hbar/2)$. C'est à dire que l'on a

$$\hat{S}_x|+_x\rangle = +\frac{\hbar}{2}|+_x\rangle, \quad \hat{S}_x|-_x\rangle = \left(-\frac{\hbar}{2}\right)|-_x\rangle, \quad \text{etc pour } y, z$$

avec les vecteurs propres de \hat{S}_x donnés par :

$$|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle + |-_z\rangle), \quad |-_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle - |-_z\rangle)$$

et ceux de \hat{S}_y :

$$|+_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle + i|-_z\rangle), \quad |-_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle - i|-_z\rangle)$$

Remarques :

- Les vecteurs propres respectifs des opérateurs $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ correspondent à des états de spins respect. parallèles aux axes x, y, z car ils qui sont invariants par ces rotations. On note l'ensemble de ces trois opérateurs par un opérateur vectoriel :

$$\hat{\vec{S}} := (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$$

- Les opérateurs autoadjoints $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ sont interprétés ici comme des générateurs des opérateurs unitaires de rotation $\hat{R}_x(\theta), \hat{R}_y(\theta), \hat{R}_z(\theta)$. Mais comme remarqué page (90), une autre interprétation est que ce sont des observables lors d'une opération de mesure. Par exemple dans l'expérience de Stern-Gerlach ci-dessus, à cause de l'orientation particulière du dispositif, la mesure est associée à l'observable \hat{S}_z . Il y a donc deux résultats possibles de la mesure que sont les états $|+_z\rangle$ ou $|-_z\rangle$. Voir TD.

Démonstration. (*) Commençons par le calcul de la matrice de \hat{S}_y : dans la base $|\pm_z\rangle$, d'après (4.3.4) et (4.1.2),

$$\hat{S}_y = i\hbar \left(\frac{d\hat{R}_y(\theta)}{d\theta} \right)_{\theta=0} = i\hbar \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\frac{1}{2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}_{\theta=0} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

Ensuite il suffit de diagonaliser cette matrice. Voir Section A.2.2 page 363. Les valeurs propres sont les racines du polynôme caractéristique $P(\lambda) = \det(\hat{S}_y - \lambda I) = \lambda^2 - (\hbar/2)^2$, donc $\lambda = \pm\hbar/2$.

On recherche maintenant le générateur \hat{S}_z des rotations autour de l'axe z . Comme pour \hat{S}_y , ses valeurs propres sont $(\pm\hbar/2)$ (car il n'y a pas de direction privilégiée), et les vecteurs propres sont $|\pm_z\rangle$ car ils sont situés sur l'axe de rotation qui est fixe. Donc la matrice de \hat{S}_z est diagonale dans cette base.

Cherchons finalement \hat{S}_x . L'axe x est obtenu en faisant tourner l'axe y de $(-\pi/2)$ autour de l'axe z , donc

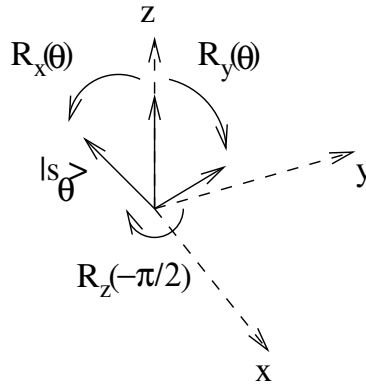


FIGURE 4.3.1 – Cette figure montre que $|s_\theta\rangle = \hat{R}_x(\theta)|+_z\rangle = \hat{R}_z(-\frac{\pi}{2})\hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle$. (Mais attention $\hat{R}_x(\theta) \neq \hat{R}_z(-\frac{\pi}{2})\hat{R}_y(\theta)$, à vérifier sur l'état $|+_y\rangle$).

$$\hat{S}_x = \hat{R}_z(-\frac{\pi}{2})\hat{S}_y\hat{R}_z(+\frac{\pi}{2})$$

Or

$$\hat{R}_z(-\frac{\pi}{2}) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_z(-\pi/2)}{\hbar}\right) = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

Ainsi on obtient

$$\hat{S}_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi/4} \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

□

Exercice 4.3.3. “Expression d’un état de spin $|s_{\theta,\varphi}\rangle$ général”

Un état de spin $|s_{\theta,\varphi}\rangle$ associé à la direction (θ, φ) en coordonnées sphériques est obtenu par :

$$|s_{\theta,\varphi}\rangle = \hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle$$

Montrer que :

$$|s_{\theta,\varphi}\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2)|+_z\rangle + e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2)|-_z\rangle$$

Solution : D'après (4.1.2) on a

$$\hat{R}_y(\theta) |+_z\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+_z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |-_z\rangle$$

Et d'après

$$\hat{R}_z(\varphi) |\pm_z\rangle = \exp\left(-i\varphi \frac{\hat{S}_z}{\hbar}\right) |\pm_z\rangle = \exp\left(-(\pm i) \frac{\varphi}{2}\right) |\pm_z\rangle$$

on a

$$\hat{R}_z(\varphi) \hat{R}_y(\theta) |+_z\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |+_z\rangle + e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) |-_z\rangle$$

Exercice 4.3.4. "l'opérateur \vec{S}^2 "

On considère l'opérateur

$$\vec{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

Montrer que dans l'espace \mathcal{H}_{spin} cet opérateur est multiple de l'identité :

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \hat{I}$$

(Aide : observer que $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$). Ce résultat sera obtenu en plus grande généralité en section (6.3.6) page 255.

Solution : calculer avec les matrices 2×2 , dans la base $|\pm_z\rangle$. Alors $\vec{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (3) Id$.

Remarque (*) : On peut obtenir le résultat $\vec{S}^2 \propto Id$ par des arguments de symétrie (c'est le "lemme de Schur", voir plus loin) : (1) l'opérateur \vec{S}^2 est invariant par rotation, et donc si $\vec{S}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ est vecteur propre et $|\psi'\rangle = \hat{R}|\psi\rangle$, alors $\vec{S}^2|\psi'\rangle = \vec{S}^2\hat{R}|\psi\rangle = \hat{R}\vec{S}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi'\rangle$. Or tout vecteur de \mathcal{H}_{spin} s'obtient de cette façon.

4.4 (*) Représentation de l'état de spin sur la sphère de Bloch

La figure (4.1.1) montre la relation entre l'espace ordinaire \mathbb{R}^3 et l'espace de spin \mathcal{H}_{spin} lorsque le spin est dans le plan (x, z) . Il y a une relation générale, pour n'importe quelle direction du spin que voici.

Supposons donné un état de spin quelconque :

$$|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin}, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

On définit alors le vecteur $\vec{s} \in \mathbb{R}^3$ par les valeurs moyennes de l'observable $\vec{\hat{S}}$ dans l'état $|s\rangle$:

$$\vec{s} = \langle \vec{\hat{S}} \rangle \tag{4.4.1}$$

c'est à dire d'après (1.6.6) page 68 :

$$\vec{s} = \begin{cases} s_x = \frac{\langle s | \hat{S}_x | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \\ s_y = \frac{\langle s | \hat{S}_y | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \\ s_z = \frac{\langle s | \hat{S}_z | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \end{cases}$$

Propriété : Le vecteur \vec{s} caractérise l'état quantique $|s\rangle$ à une constante près (phase près si $|s\rangle$ est normalisé). Plus précisément, le vecteur \vec{s} de l'espace ordinaire, en coordonnées sphériques $\vec{s} = (\theta, \varphi, \|\vec{s}\|)$, est relié aux composantes (a, b) de l'état $|s\rangle$ dans l'espace de Spin par :

$$\begin{aligned} \|\vec{s}\| &= \frac{\hbar}{2} \quad : \text{norme fixée} \\ z = \frac{a}{b} &= \cotg\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi} \in \mathbb{C} \quad : \text{si } b \neq 0 \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

L'interprétation graphique de cette relation est que $z = a/b$ est la **projection stéréographique** du vecteur \vec{s} , voir figure (4.4.1).

Il y a donc une relation bijective entre la direction du vecteur \vec{s} , et l'état quantique normalisé $|s\rangle$ (à une phase près).

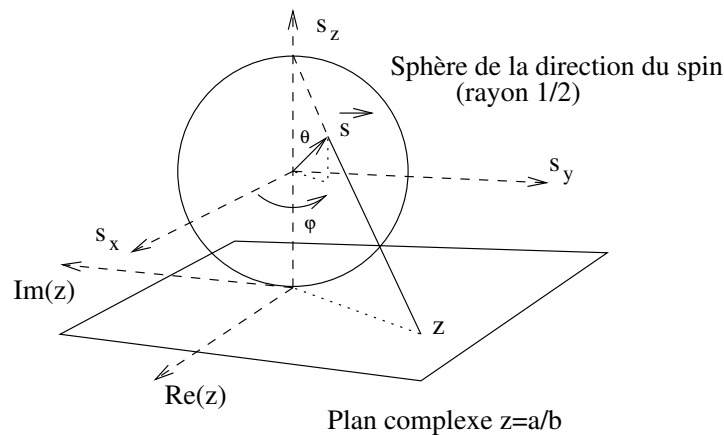


FIGURE 4.4.1 – Projection stéréographique relie le vecteur $\vec{s} = \langle \hat{S} \rangle \in \mathbb{R}^3$ et les composantes (a, b) de l'état quantique $|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin} \equiv \mathbb{C}^2$.

Remarques : La norme $\|\vec{s}\| = \frac{\hbar}{2}$ n'est pas surprenante. La direction (θ, φ) du vecteur \vec{s} , ne dépend que du quotient $z = a/b \in \mathbb{C}$. Cela est attendu, car en général, le résultat des valeurs moyenne ne change pas si on multiplie le vecteur par une constante complexe, donc $|s'\rangle = (a/b)|+_z\rangle + |-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ donne le même résultat $|s\rangle$.

preuve : (TD) On pourrait calculer brutalement les valeurs moyennes $\langle \hat{S} \rangle$, mais ce n'est pas nécessaire : on vérifie d'abord dans le cas $\varphi = 0$, lorsque \vec{s} est dans le plan (x, z) . Cela correspond à la figure (4.1.1). On obtient alors $z = \cotg(\theta/2)$ sans calcul, en se référant à la figure (4.4.2).

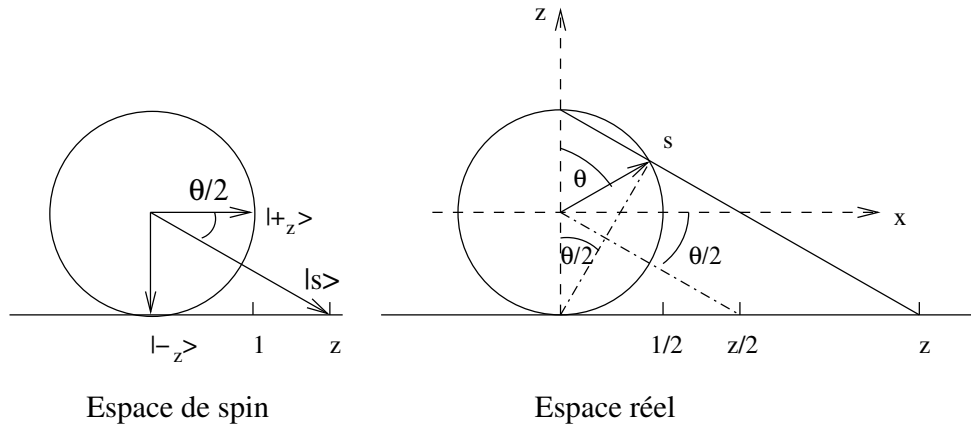


FIGURE 4.4.2 – Figure montrant que $z = \cotg(\theta/2)$ pour la projection stéréographique.

Ensuite on obtient le cas général, en effectuant une rotation autour de l'axe z grâce à l'opérateur $\hat{R}_z(\varphi)$. \square

Exercice 4.4.1. “Représentation d'un état de spin sur la sphère de Riemann”

Cette représentation a pour but de montrer la relation entre l'état de spin 1/2 dans l'espace quantique (\mathbb{C}^2 de dimension deux complexe), et sa représentation dans l'espace ordinaire $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ (de dimension 3 réel).

1. Soit un état de spin 1/2 quelconque noté :

$$|\psi\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle$$

avec $a, b \in \mathbb{C}$. Pourquoi peut-on dire que l'état physique de $|\psi\rangle$ est caractérisé seulement par le nombre complexe $z = a/b$?

2. Calculer les valeurs moyennes $s_x = \frac{\langle \psi | \hat{S}_x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$, $s_y = \frac{\langle \psi | \hat{S}_y | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$, $s_z = \frac{\langle \psi | \hat{S}_z | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ dans cet état, et les exprimer en fonction de z . On note $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z) \in \mathbb{R}^3$, et on montrera que $\|\vec{s}\| = \frac{\hbar}{2}$, donc que \vec{s} est sur une sphère de rayon $\hbar/2$, appelée **sphère de Bloch** (ou sphère de Riemann, ou $P^1 = P(\mathbb{C}^2)$ espace projectif de \mathbb{C}^2).
3. Inversement montrer que $z = \cotg(\theta/2) e^{-i\varphi}$, où (s, θ, φ) sont les coordonnées sphériques du vecteur $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z) \in \mathbb{R}^3$.
4. Montrer que z est la coordonnée stéréographique¹ du point $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$ sur la sphère.

1. Si M est un point sur la sphère, On place le plan complexe \mathbb{C} , sous la sphère, tangent au pôle sud. On considère la droite passant par le pôle nord et M . Elle intersecte \mathbb{C} au point z . On dit alors que $z \in \mathbb{C}$ est la **coordonnée stéréographique** du point M . Voir film1 de [LGA].

L'espace projectif $\mathbb{C}P^1 = P(\mathbb{C}^2)$ (*) L'association d'une sphère (ici sphère des vecteurs \vec{s}) à partir d'un espace vectoriel de dimension deux (ici \mathcal{H}_{spin}) est générale et ne se limite pas au cas du spin. Voici la construction générale dans le langage de la mécanique quantique.

Soit \mathcal{H} un espace vectoriel (espace de Hilbert quantique) de dimension n . En terme de mesure, il est impossible de distinguer le vecteur $|\psi\rangle$ du vecteur $|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle$ pour tout $\lambda \in \mathbb{C}$. Pour cette raison, on appelle **rayon quantique** l'ensemble des vecteurs proportionnels entre eux. Ainsi le rayon quantique de $|\psi\rangle$ (supposant $\psi \neq 0$), noté $[\psi]$, est :

$$[\psi] = \{|\psi'\rangle, \text{ tels que } \exists \lambda \in \mathbb{C}, |\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle\}.$$

L'ensemble des rayons est appelé l'espace projectif de \mathcal{H} , et est noté $P(\mathcal{H})$.

Par construction, un rayon est une famille à une dimension complexe (obtenu en faisant varier $\lambda \in \mathbb{C}$), et l'ensemble des rayons est donc un espace de dimension complexe $n - 1$, donc de dimension réelle $2(n - 1)$, aussi noté $\mathbb{C}P^{(n-1)}$.

Si $\mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2$ est un espace à deux états, (comme le spin), le paragraphe précédent a montré que l'espace projectif est une sphère. C'est à dire $\mathbb{C}P^1 = P(\mathbb{C}^2) = S^2$. Dans un problème à deux états, il est souvent commode de représenter l'évolution quantique sur cette sphère, aussi appelée **sphère de Riemann** ou **sphère de Bloch**.

4.5 Groupe SU(2) de rotation du spin, et relations de commutation

4.5.1 Non commutativité du groupe et relations de commutation

Si on considère deux rotations différentes autour d'axes différents, par exemple $\hat{R}_x(\alpha)$ et $\hat{R}_y(\beta)$, alors en général le résultat de la combinaison de ces deux rotations dépend de l'ordre avec lequel on les fait. En général :

$$\hat{R}_x(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \neq \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_x(\alpha)$$

Cela est évident sur l'exemple de la figure 4.5.1. On dit que les deux opérateurs ne commutent pas car $[\hat{R}_x(\alpha), \hat{R}_y(\beta)] = \hat{R}_x(\alpha)\hat{R}_y(\beta) - \hat{R}_y(\beta)\hat{R}_x(\alpha) \neq 0$.

Remarquer que $R_y(\beta)R_x(\alpha) \neq R_x(\alpha)R_y(\beta) \Leftrightarrow R_y^{-1}(\beta)R_x^{-1}(\alpha)R_y(\beta)R_x(\alpha) \neq I$. On va donc calculer $R_y^{-1}R_x^{-1}R_yR_x$. Voir figure 4.5.2.

La relation suivante est importante. Elle montre que la non commutativité de ces rotations est liée à la non commutativité de leur générateurs. Le résultat est général en théorie des groupe.

Proposition 4.5.1. *Pour des angles très petits $\alpha, \beta \ll 1$, on a*

$$(R_y(\beta))^{-1} (R_x(\alpha))^{-1} R_y(\beta) R_x(\alpha) = I - \frac{\alpha\beta}{\hbar^2} [\hat{S}_y, \hat{S}_x] + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta)$$

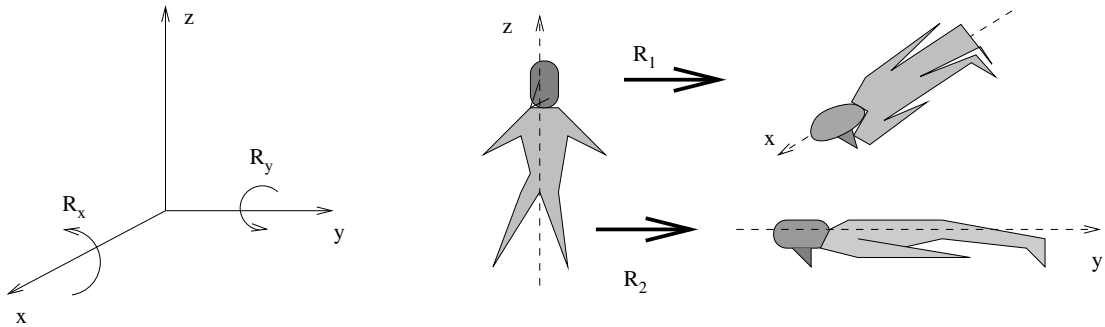


FIGURE 4.5.1 – Cet exemple montre que les deux rotations suivantes sont différentes : $R_1 = R_x(\frac{\pi}{2})R_y(\frac{\pi}{2}) \neq R_2 = R_y(\frac{\pi}{2})R_x(\frac{\pi}{2})$

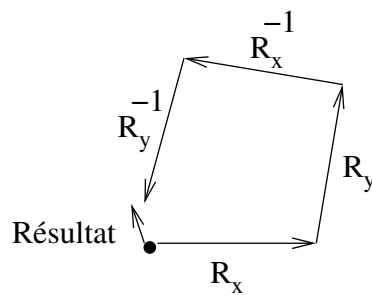


FIGURE 4.5.2 – Non commutativité : $R_y^{-1}R_x^{-1}R_yR_x \neq I$

Remarques :

- Cette dernière relation importante montre une *signification des relations de commutation en mécanique quantique* : si les générateurs commutent, alors les éléments du groupe commutent, et réciproquement. (C'est dans le cadre de l'interprétation des opérateurs auto-adjoints comme générateurs).

Démonstration. Pour simplifier les notations, on pose : $A = -i\hat{S}_x\alpha/\hbar$, $B = -i\hat{S}_y\beta/\hbar$. On a alors

$$\begin{aligned}\hat{R}_x(\alpha) &= \exp\left(-i\hat{S}_x\alpha/\hbar\right) = \exp(A) \simeq 1 + A + \frac{1}{2}A^2 + o(\alpha^2) \\ \left(\hat{R}_x(\alpha)\right)^{-1} &= \exp\left(-i\hat{S}_x(-\alpha)/\hbar\right) = \exp(-A) \simeq 1 - A + \frac{1}{2}A^2 + o(\alpha^2)\end{aligned}$$

et de même pour $\hat{R}_y(\beta)$. Alors

$$\begin{aligned}R_y R_x &= \left(1 + B + \frac{1}{2}B^2\right) \left(1 + A + \frac{1}{2}A^2\right) \\ &= 1 + A + B + BA + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2 + \dots \\ R_y^{-1} R_x^{-1} &= 1 - A - B + BA + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2 + \dots\end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned}R_y^{-1} R_x^{-1} R_y R_x &= 1 - A + A - B + B - A^2 - AB - BA - B^2 + BA + BA + A^2 + B^2 + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta) \\ &= 1 + BA - AB + \dots = 1 + [B, A] + \dots \\ &= I - \frac{\alpha\beta}{\hbar^2} [\hat{S}_y, \hat{S}_x] + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta)\end{aligned}$$

□

Il est donc important de calculer les commutateurs entre les générateurs. On trouve :

Proposition 4.5.2. *On a*

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z \quad (4.5.1)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x,$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$$

Démonstration. le calcul se fait avec les matrices, par exemple :

$$\begin{aligned}\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x &\equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv i\hbar\hat{S}_z\end{aligned}$$

Comme il n'y a pas d'axe privilégié, le résultat est identique en permutant les axes. \square

Remarque : Ainsi

$$R_y^{-1}(\beta)R_x^{-1}(\alpha)R_y(\beta)R_x(\alpha) = I + i\frac{\alpha\beta}{\hbar}\hat{S}_z + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta) = R_z(-\alpha\beta) + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta)$$

qui s'interprète en disant que au premier ordre, la suite des opérations (infinitésimales) $R_y^{-1}(\beta)R_x^{-1}(\alpha)R_y(\beta)R_x(\alpha)$ est équivalent à une rotation infinitésimale d'un angle $(-\alpha\beta)$ autour de l'axe z .

Noter que nous avons établi ces résultats pour la rotation d'un spin quantique, mais qu'ils sont valables aussi pour la rotation d'un objet solide en mécanique classique. La différence entre le groupe de rotation de spin (groupe SU(2)) et le groupe de rotation dans \mathbb{R}^3 (groupe SO(3)) ne se perçoit pas au niveau local ou infinitésimal (où les deux groupes sont isomorphes) mais globalement, comme l'a montré la section 4.2 (rotation de 2π) ; voir cours de math [Fau10b].

4.5.2 Rotation autour d'un axe \vec{u} quelconque

Nous avons défini au dessus les opérateurs de rotation du spin et les générateurs autour des axes x, y, z .

Proposition 4.5.3. Soit $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z) \in \mathbb{R}^3$ un vecteur unitaire (i.e de longueur 1) correspondant une direction quelconque. On pose :

$$\hat{S}_{\vec{u}} = \vec{u} \cdot \hat{\vec{S}} = u_x\hat{S}_x + u_y\hat{S}_y + u_z\hat{S}_z \equiv \frac{\hbar}{2}(\vec{u} \cdot \vec{\sigma}) \quad (4.5.2)$$

Soit un angle $\alpha \in \mathbb{R}$ et

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right) \quad (4.5.3)$$

$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ est l'opérateur de rotation du spin d'un angle α autour de l'axe \vec{u} , et $\hat{S}_{\vec{u}}$ est le générateur de cette rotation.

Remarques :

- L'expression de $\hat{R}_z(\theta)$ ci-dessus est un cas particulier de cette formule avec $\vec{u} = (0, 0, 1)$ pointant vers l'axe z ; et de même pour les opérateurs $\hat{R}_x(\theta)$ et $\hat{R}_y(\theta)$.
- L'opérateur $\hat{S}_{\vec{u}} = (\hat{S}_{\vec{u}})^+$ est autoadjoint et de trace nulle : $\text{Tr}(\hat{S}_{\vec{u}}) = 0$ (car $\text{Tr}(\hat{S}_x) = \text{Tr}(\hat{S}_y) = \text{Tr}(\hat{S}_z) = 0$). Donc $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ est un opérateur unitaire et de déterminant 1 : $\det(\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)) = 1$ (d'après la formule d'algèbre linéaire : $\det(e^A) = e^{\text{Tr}(A)}$) dans un espace complexe de dim 2. On dit que c'est un élément du groupe $SU(2)$.

4.5.3 (*) Algèbre de Lie des rotations

Pour mieux comprendre ce qui précède, observer que les relations de commutation ci-dessus (4.5.1), montrent que les trois générateurs $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ ne commutent pas, mais leur commutateur est encore un de ces trois opérateurs. Comme défini page 103, cela signifie que ces trois opérateurs forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 3, appelée **algèbre de Lie des rotations**, notée \mathcal{R} , formée par les combinaisons linéaires de la forme :

$$\hat{S}_{\vec{U}} = U_x \hat{S}_x + U_y \hat{S}_y + U_z \hat{S}_z = \vec{U} \cdot \vec{\hat{S}} \in \mathcal{R}, \quad \vec{U} = (U_x, U_y, U_z) \in \mathbb{R}^3$$

et (4.5.1) nous assure que $\frac{1}{i} [\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] \in \mathcal{R}$ pour tous $\vec{U}, \vec{V} \in \mathbb{R}^3$.

Exercice 11. montrer que pour $\vec{U}, \vec{V} \in \mathbb{R}^3$,

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] = \hat{S}_{\vec{U} \wedge \vec{V}}$$

4.5.4 (*) Groupe de Lie des rotations

En posant :

$$\vec{U} = \alpha \vec{u}, \quad \alpha = |\vec{U}|, \quad \vec{u} \text{ unitaire}$$

on peut écrire

$$\hat{R}_{\vec{U}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{S}_{\vec{U}}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{S}_{\vec{u}}\right) = \hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$$

qui est une rotation d'un angle α autour de l'axe \vec{u} .

On a mentionné page 125, un résultat général : en prenant l'exponentielle des éléments d'une algèbre de Lie d'opérateurs, on obtient un groupe de Lie. Ainsi, ici, les opérateurs de rotation $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ (pour différentes valeurs de \vec{u}, α) forment *un groupe* de Lie de dimension

3, noté R_{spin} (ou encore $Spin(\mathbb{R}^3)$ dans la littérature) :

$$\begin{aligned}\hat{R}_1 \hat{R}_2 &= \hat{R}_3 & : \text{loi de composition interne} \\ \hat{R}_{\vec{u}}(0) &= Id & : \text{élément neutre} \\ \left(\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)\right)^{-1} &= \hat{R}_{\vec{u}}(-\alpha) & : \text{rotation inverse}\end{aligned}$$

(la première relation signifie la chose non triviale que la composition successive de deux rotation est à nouveau une certaine rotation).

Pour spécifier la rotation $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$, il faut trois paramètres : la direction (θ, φ) de l'axe \vec{u} , et l'angle de rotation α , ou encore $\vec{U} = \alpha\vec{u} \in \mathbb{R}^3$. Pour cela on dit que c'est un groupe à trois paramètres continus, ou un **groupe de Lie de dimension trois**.

4.5.5 (*) Représentation des opérateurs de rotation dans une base : groupe des matrices $SU(2)$

Nous allons montrer que le groupe de rotation du spin 1/2 noté $Spin(\mathbb{R}^3)$ est identique à un groupe de matrices appelé groupe $SU(2)$.

Considérons un opérateur de rotation \hat{R} de spin 1/2, de la forme (4.5.3). Dans la base $(|+z\rangle, |-z\rangle)$, cet opérateur unitaire est représenté par une matrice unitaire 2×2 :

$$M_{\vec{u}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \langle +|\hat{R}|+\rangle & \langle +|\hat{R}|-\rangle \\ \langle -|\hat{R}|+\rangle & \langle -|\hat{R}|-\rangle \end{pmatrix}$$

C'est une matrice complexe 2×2 de déterminant un, et unitaire.

Par définition de telles matrices, forment un groupe appelé *le groupe Spécial Unitaire $SU(2)$* :

$$SU(2) = \{M \in Mat_2(\mathbb{C}) / \det(M) = 1, M^+ = M^{-1}\}$$

(on vérifie facilement que cet ensemble forme un groupe avec la multiplication de matrices).

Inversement, à une matrice $M \in SU(2)$, on associe un opérateur de rotation de spin \hat{R} par la même relation ci-dessus (voir preuve ci-dessous).

Ainsi le groupe des rotation du spin 1/2 exprimé dans une base orthonormée s'identifie au groupe de matrices $SU(2)$.

Exercice 12. Rotation du spin et groupe $SU(2)$

1. Montrer qu'un générateur des rotations du spin 1/2 (i.e. élément de l'algèbre de Lie \mathcal{R}_{spin}) $\hat{S}_{\vec{U}}$, avec $\vec{U} \in \mathbb{R}^3$, s'exprime dans une base o.n. par une matrice hermitienne 2×2 de trace nulle. Montrer inversement qu'une matrice hermitienne 2×2 de trace nulle détermine un générateur $\hat{S}_{\vec{U}}$.
2. Montrer que l'ensemble des matrices hermitienne 2×2 de trace nulle forme l'algèbre de Lie $su(2)$ du groupe $SU(2)$ défini ci-dessus. Montrer que les matrices de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ forment une base de cette algèbre $su(2)$.
3. Grâce à l'application exponentielle, déduire que le groupe des rotations du spin 1/2, R_{spin} , exprimé dans une base o.n., s'identifie au groupe $SU(2)$ des matrices.

4.6 (*) Espace quantique total d'une particule à 3 dimensions avec spin 1/2

L'espace de Hilbert de la fonction d'onde, décrivant l'état spatial de la particule est :

$$\mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

L'espace de Hilbert du spin, décrivant l'état de spin est lui de dimension 2 :

$$\mathcal{H}_{\text{spin}} \equiv \mathbb{C}^2$$

Alors l'espace de Hilbert total est le produit tensoriel :

$$\boxed{\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{espace}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}}$$

4.6.1 Remarques

- Pourquoi le produit tensoriel ? tout simplement, car il est possible d'envisager que la particule soit dans un état quantique comme

$$|\psi\rangle = a|x_1\rangle|+_z\rangle + b|x_2\rangle|-_z\rangle \quad (4.6.1)$$

(avec des amplitudes $a, b \in \mathbb{C}$), qui traduit un état où la position x est *corrélée* avec l'état de spin. C'est exactement le cas à la sortie de l'appareil de Stern-Gerlach, figure (4.0.1), où $|x_1\rangle$ est un état situé dans le faisceau supérieur avec spin $|+_z\rangle$, et $|x_2\rangle$ un état situé dans le faisceau inférieur avec spin $|-_z\rangle$.

- Comme décrit page 148, le produit tensoriel d'espace de Hilbert permet l'existence d'état corrélés qui sont surprenants pour le sens commun. C'est le cas de l'état eq(4.6.1), où l'état de spin est corrélé avec la position de la particule. Si on observe la particule en x_1 , elle aura le spin $|+_z\rangle$. Si on l'observe en x_2 , elle aura le spin $|-_z\rangle$. (Voir TD).

4.6.2 Une base de \mathcal{H}_{tot} et champ spinoriels

Les états $|\vec{x}\rangle, \vec{x} \in \mathbb{R}^3$, forment la base (continue) de position de l'espace $\mathcal{H}_{\text{spatial}}$.

De même les deux états $|\pm_z\rangle$ forment une base de l'espace de spin $\mathcal{H}_{\text{spin}}$.

D'après la définition du produit tensoriel, voir (3.1.5), une base de l'espace

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{espace}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$$

est formée par $|\vec{x}, +\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |+_z\rangle$ et $|\vec{x}, -\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |-_z\rangle$ avec le paramètre continu $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$. Autrement dit un état général de la particule $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{tot}}$ est caractérisé par ses composantes complexes :

$$\begin{aligned} \psi_+(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, + | \psi \rangle \\ \psi_-(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, - | \psi \rangle \end{aligned}$$

qui forme donc une fonction d'onde sur l'espace à deux composantes complexes. Cela s'appelle un champ vectoriel à valeur dans \mathbb{C}^2 ou plus précisément un **champ spinoriel**. C'est l'analogie du champ électrique $\vec{E}(\vec{x})$ qui lui est une fonction à trois composantes réelles.

Noter que les deux composantes $\psi_+(\vec{x}), \psi_-(\vec{x})$ dépendent du choix de la base $|\pm_z\rangle$, et dépendent donc du choix de l'axe z . Pour éviter de choisir une base particulière, on peut dire que $|\psi\rangle$ est une fonction d'onde à valeur² dans \mathcal{H}_{spin} .

Exercice 13. action d'une rotation

Pour une particule avec spin, décrite par la fonction d'onde à deux composantes $\psi_{\pm}(\vec{x}) = \langle \vec{x}, \pm | \psi, \vec{s} \rangle$, donner l'expression de la fonction d'onde de la même particule dans un repère \vec{x}' obtenu par une rotation $\vec{x}' = R\vec{x}$?

4.7 Autres degrés de liberté internes

On dit que le spin est un **degré de liberté interne** de la particule, contrairement au **degrés de libertés externes** que sont x, y, z . L'espace de Hilbert qui le décrit est \mathcal{H}_{spin} , est un espace autre que celui des fonctions d'ondes spatiales $\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$. L'espace total est le produit tensoriel $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}$.

Cependant *ces deux espaces ne sont pas indépendants* l'un de l'autre, puisque une transformation de l'espace comme une rotation, agit aussi sur l'espace du spin, voir (B.4.1).

En physique, il y a des espaces de degrés de libertés internes, autres que le spin, qui eux n'ont pas cet "attachement" avec l'espace ordinaire \mathbb{R}^3 .

- Par exemple, pour les champs élémentaires, que sont les quarks, il y a un espace interne dit de **couleurs** $\mathcal{H}_{coul} \equiv \mathbb{C}^3$ de dimension trois (rouge-vert-bleu). (Attention, les quarks ne sont pas des particules, dans le sens où ils n'existent pas à l'état individuel et libre. On parle plutôt de champs élémentaires, et leur description est dans le cadre de la théorie des champs, classique ou quantique).

Les trois couleurs des quarks, sont dues au fait que la théorie des champs correspondantes, la **Q.C.D.** ("**la Chromo-Dynamique Quantique**" qui décrit la **force nucléaire forte**), est une théorie de Jauge avec le groupe $SU(3)$ qui signifie qu'elle possède une symétrie (de Jauge) par rapport aux rotations dans l'espace des couleurs $\mathcal{H}_{coul} \equiv \mathbb{C}^3$. L'**interaction électro-faible** (qui décrit à la fois l'électromagnétisme et la force nucléaire faible), est décrite par la théorie de Jauge $SU(2)$, faisant donc intervenir un espace de degré liberté interne $\mathcal{H}_{faible} \equiv \mathbb{C}^2$, appelé charge faible. Ces théories de Jauge se manifestent surtout dans les collisions de particules à hautes énergies.

- Autre exemple (mais qui est relié aux quarks), en physique nucléaire, on considère le neutron et le proton comme une manifestation d'une seule particule, appelée le **nucléon**. (Car la force nucléaire ne les distinguent pas, seule la force électromagnétique qui est sensible à la charge électrique, les distingue). Ainsi le proton $|p\rangle$ et le

2. La formulation géométrique correcte est de considérer l'espace fibré de fibre isomorphe à \mathbb{C}^2 (appelé "fibré spinoriel") . ψ est une section de ce fibré.

neutron $|n\rangle$ ne sont que deux états particuliers de l'espace à deux états du nucléon appelé **espace d'isospin**, noté $\mathcal{H}_{isospin} \equiv \mathbb{C}^2$, et ayant pour base $|p\rangle, |n\rangle$. Par exemple un nucléon peut être dans l'état interne d'isospin $|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle + |p\rangle)$ qui est une superposition. Cependant cette notion d'espace d'isospin est en fait équivalente au point de vue plus conventionnel qui distingue le proton et le neutron.

4.8 Mesure de spin, application récente : la Cryptographie quantique

Nous présentons une branche de la mécanique quantique, appelée l'**information quantique** et plus précisément ici, la **cryptographie quantique**. Il y a des développements récents, à la fois du côté théorique et expérimentale.

Références : [NGWH01], dont est inspirée cette section, et une revue récente de *Pour la Science* [LS02].

L'idée de la cryptographie quantique est d'utiliser un défaut bien connu de la mécanique quantique :

“Chaque mesure perturbe le système”

comme un avantage dans l'échange de messages que l'on veut garder secrets, et d'éviter ainsi l'espionnage.

En effet la cryptographie quantique se sert de l'énoncé équivalent :

“Pas de perturbation \implies il n'y a pas eu d'espion”

pour être sûr que le message n'a pas été intercepté.

Nous allons voir précisément comment utiliser cela pratiquement. Il y a déjà des dispositifs expérimentaux de cryptographie quantique (notée C.Q.). Et la C.Q. pourrait bien être la première application commerciale de la physique quantique fonctionnant au niveau de l'état quantique individuel.

4.8.1 Cryptographie classique symétrique à clef secrète

Comme il est d'usage, considérons deux personnages Alice et Bob.

Alice veut envoyer un message à Bob. Pour cela elle écrit son message en base deux (suite de 0 et 1), et dispose aussi d'une clef qui est une suite de 0 et 1 de même longueur, et envoie à Bob le message crypté obtenu par l'opération suivante :

$$\text{message crypté} = \text{message} \oplus \text{clef}$$

où le signe \oplus est l'addition modulo 2 sans retenue :

$$0 \oplus 0 = 0, \quad 1 \oplus 0 = 1, \quad 0 \oplus 1 = 1, \quad 1 \oplus 1 = 0.$$

Exemple : message = 10100110, clef=00110111, alors message crypté=10010001.

Exercice En supposant que Bob possède aussi la clef, quelle formule doit-il utiliser pour décrypter le message ?

Solution :

$$\text{message} = \text{message crypté} \oplus \text{clef}$$

Exemple : message crypté = 10010001 , clef = 00110111, alors message = 10100110.

Remarque : cette méthode de cryptographie est la seule prouvée être sans faille. Les inconvénients sont que Alice et Bob doivent être les seuls à connaître la clef secrète, et qu'ils disposent d'une clef secrète aussi longue que le message à se transmettre. Cette méthode s'appelle "one time pad" (1926). La difficulté est donc que Alice et Bob partagent une clef secrète. C'est là qu'intervient la cryptographie quantique présentée ci-dessous.

La méthode la plus utilisée (sur internet par exemple) est cependant un encryptage asymétrique à clef publique, de type R.S.A. (1978), basé sur la factorisation de grands nombres premiers. Mais dans ce cas, il n'est pas prouvé qu'il n'existe pas d'algorithme rapide permettant de décrypter le message.

4.8.2 Le protocole B.B.84 pour partager une clef secrète

Pour appliquer la méthode dite "one time pad" (1926) présentée plus haut, Alice et Bob doivent partager une clef (suite de 0 et 1) connue d'eux seuls.

C'est là que la mécanique quantique intervient. Cette méthode a été mise au point récemment et utilise non pas des spins 1/2, mais les 2 états de polarisation de la lumière : l'échange d'une clef secrète se fait via l'échange de photons dans une fibre optique.

Pour simplifier la présentation, nous remplaçons la polarisation de la lumière par le spin 1/2 : nous supposons que Alice et Bob échangent des particules ayant deux états possibles de spin 1/2.

Alice et Bob ont chacun de leur côté un appareil de type Stern-Gerlach qui permet à Alice de polariser le spin de la particule dans l'état qu'elle veut, et à Bob de mesurer ce spin par rapport à une direction choisie. Voir figure 4.8.1.

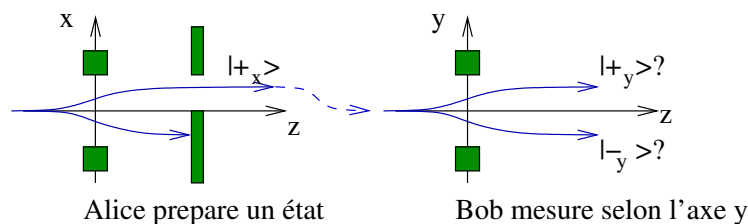


FIGURE 4.8.1 – Alice prépare un état de spin, polarisé selon x ou y . Bob ensuite détecte la polarisation avec un appareil orienté selon x ou y .

On appelle z la direction de propagation. Ils utilisent deux directions possibles pour leur appareil : x ou y , ce qui correspond à deux bases différentes du spin, notées pour

simplifier :

$$\begin{aligned} B_x : \quad & |+_x\rangle \equiv 0 \quad , \quad |-_x\rangle \equiv 1 \\ B_y : \quad & |+_y\rangle \equiv 0 \quad , \quad |-_y\rangle \equiv 1 \end{aligned}$$

(il est habituel en théorie de l'information quantique de noter une base de deux états quantiques par $|0\rangle, |1\rangle$, et de l'appeler **quantum bit** ou **qbit**).

Voici la séquence des opérations :

1. Alice envoie des particules individuelles à Bob. Pour chacune d'elle, elle choisit l'état de spin au hasard parmi les quatre ci-dessus.

Pour Alice, cela correspond à une suite de qbits (0 et 1) associée à une suite de Bases, exemple :

0	1	1	0	1	0	0
B_x	B_x	B_y	B_x	B_y	B_y	B_x

2. Pour chaque particule reçue, Bob mesure l'état de spin par rapport à une base B_x ou B_y qu'il choisit au hasard. Cela lui donne un résultat, une suite de qbits (0 et 1). Exemple :

0	1	0	0	1	1	0
B_x	B_y	B_x	B_x	B_y	B_x	B_x

Propriété :

- Si Bob a fait le même choix de base que Alice, alors il détecte le même qbit. (En effet si Alice envoie $|+_x\rangle$, et que Bob détecte dans la direction x , il mesurera à coup sûr $|+_x\rangle$).
 - Pour les qbits où Bob a fait un choix différent de base, il a en moyenne 50% d'erreurs. (En effet si Alice envoie $|+_x\rangle$, et que Bob détecte dans la direction y , on décompose $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_y\rangle + |-_y\rangle)$, ce qui donne une probabilité $P_{|+_y\rangle} = 1/2$ et $P_{|-_y\rangle} = 1/2$)
 - Au total, Bob a donc en moyenne 25% d'erreur sur sa suite de qbit.
3. Bob annonce (publiquement) à Alice la suite de base (suite $B_x, B_y \dots$) qu'il a choisit (et pas les résultats).
 4. Parmi cette suite, Alice annonce (publiquement) à Bob quelle sous suite correspond au même choix. Exemple ici :

B_x			B_x	B_y		B_x
-------	--	--	-------	-------	--	-------

5. Alice et Bob ne gardent chacun que cette sous suite de qbit, ce qui correspond en moyenne à 50% des événements. **Cette suite de 0 et 1 est finalement leur clef secrète.** Exemple ici : (0,0,1,0).

Pour être sûr que cette clef est secrète (i.e. connus d'eux seuls) il faut montrer que une tierce personne nommée Eve ne puisse intercepter leur échange de qbit sans que Bob et Alice ne s'en aperçoive (Eve est le nom habituel donné à l'espion en cryptologie, et vient de l'anglais *eavesdropper*="qui écoute aux portes").

Pour cela :

Théorème de non-clonage : “Eve ne peut pas faire une copie de qbits sans les perturber”

preuve : Supposons la possibilité d’une opération idéale de copie (i.e. sans perturbation) d’un état quantique $|\psi\rangle$ par Eve dans un registre, symbolisée par la transformation :

$$|\psi\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |\text{Eve}_0\rangle \longrightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes |\text{Eve}_\psi\rangle$$

Appliqué aux états $|+x\rangle, |-x\rangle$, cela donne :

$$|+x\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |\text{Eve}_0\rangle \longrightarrow |+x\rangle \otimes |+x\rangle \otimes |\text{Eve}_+\rangle$$

$$|-x\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |\text{Eve}_0\rangle \longrightarrow |-x\rangle \otimes |-x\rangle \otimes |\text{Eve}_-\rangle$$

et d’après le principe de superposition, on aurait pour $|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle + |-x\rangle)$

$$|+y\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |\text{Eve}_0\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle \otimes |+x\rangle \otimes |\text{Eve}_+\rangle + |-x\rangle \otimes |-x\rangle \otimes |\text{Eve}_-\rangle)$$

qui est différent du résultat qu’il faudrait : $|+y\rangle \otimes |+y\rangle \otimes |\text{Eve}_+\rangle$. □.

On peut imaginer comme parade que Eve intercepte et mesure l’état de spin, et renvoie à Bob le même état pour faire croire qu’il n’y a pas eu interception. Si elle le fait, elle ne fait pas le même choix de base que Alice dans 50% des cas ; par conséquent Alice et Bob ont 25% d’erreur sur leur clef finale. En échangeant entre eux (et publiquement) une fraction seulement de cette clef, ils peuvent se rendre compte de la présence de Eve, et décider de ne pas conserver la clef.

4.9 Interaction du spin avec le champ électromagnétique

4.9.1 Cas de l’électron

(cf Sakurai [Sak67]p78, Cohen p980)

L’interaction d’un électron de masse m , de charge $q = -e$, de spin 1/2, avec un champ électromagnétique extérieur \vec{A}, U est décrite dans l’espace de Hilbert

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}$$

par le **Hamiltonien de Pauli** :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right) \right)^2 + qU(\hat{\vec{x}}, t) \quad (4.9.1)$$

où $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sont les matrices de Pauli agissant dans l’espace du spin \mathcal{H}_{spin} .

Cet Hamiltonien s’écrit aussi sous la forme plus commode :

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2 - \vec{\mathcal{M}}_e \cdot \vec{B} + qU(\hat{\vec{x}}, t)} \quad (4.9.2)$$

avec

$$\vec{\mathcal{M}}_e = \frac{q}{m} \vec{S} \quad \text{: moment magnétique de l'électron} \quad (4.9.3)$$

Preuve : On utilise la relation (A.2.2), et $\hat{p} \wedge \vec{A} = -i\hbar \text{rot}(\vec{A}) - \vec{A} \wedge \hat{p}$ (à démontrer). \square

Remarques

- La forme (4.9.1), découle directement de l'équation de Dirac dans la limite non relativiste. L'équation de Dirac est une équation d'onde qui a une écriture assez "naturelle" et qui décrit la fonction d'onde d'un électron en théorie relativiste. (Il y a cependant des problèmes théoriques avec l'équation de Dirac, qui ne sont résolus que dans le cadre de la théorie quantique des champs).
- Le terme (4.9.3) est très semblable à l'expression du moment magnétique d'un dipôle magnétique en mécanique classique : considérons une particule classique de charge q sur une orbite circulaire de rayon r . La période de rotation est $\tau = \frac{2\pi r}{v}$. Le courant correspondant est

$$I = \frac{q}{\tau} = \frac{qv}{2\pi r}$$

et la surface du dipôle magnétique créé est $\vec{S} = \pi r^2 \cdot \vec{u}$ (\vec{u} est un vecteur normal unitaire). Par ailleurs le moment orbital³ est

$$\vec{L} = \vec{p} \wedge \vec{r} = m\vec{v} \wedge \vec{r} = mvr\vec{u}.$$

Alors le moment magnétique est :

$$\vec{\mathcal{M}}_{class} = I \cdot \vec{S} = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 \cdot \vec{u} = \frac{qv}{2} r \cdot \vec{u} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

qui est comparable à (4.9.3) mis à part le facteur 1/2. La forme (4.9.1) a donc l'avantage de donner une origine au manque de ce facteur 1/2, pas évident a priori.

4.9.2 Autres particules de spin 1/2

cf Bransden p.533, [BC89].

Pour une particule quelconque de spin 1/2, de masse m , de charge q , le Hamiltonien est semblable à (4.9.2) :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - q\vec{A}(\hat{x}, t) \right)^2 - \vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B} + qU(\hat{x}, t)$$

avec :

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{M}} &= g\mu \frac{\vec{S}}{\hbar} && \text{: moment magnétique} \\ \mu &= \frac{|e|\hbar}{2m} && \text{: magnéton} \\ &g && \text{: rapport gyromagnétique} \end{aligned}$$

3. On verra au chapitre ?? que le moment angulaire \vec{L} sont les générateurs des rotations dans \mathbb{R}^3 et joue donc un rôle analogue aux opérateurs de spin \vec{S} .

Valeurs expérimentales :

	Électron	Proton	Neutron
g	2,002319314	5,5883	-3,8263

Remarques :

- Le Hamiltonien de Pauli (4.9.1),(4.9.3), donne $g_e = 2$. La valeur expérimentale un peu différente s'explique à cause d'effets d'influences de l'électron sur le champ électromagnétique quantique que l'on peut calculer dans le cadre de l'électrodynamique quantique. Les valeurs de g pour le proton et le neutron sont dues à la structure interne des ces particules (structure de quarks et de gluons), mais on ne connaît pas à ce jour de calcul précis qui le montre.
- Le moment magnétique du neutron est anti-parallèle à son spin. (signe négatif de g_n).
- Pour le neutron ou proton, $\mu_N = e\hbar/(2m_p)$ s'appelle le **magnéton nucléaire**. Pour l'électron $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$ s'appelle le **magnéton de Bohr**.

4.9.3 Évolution du spin seul, précession de Larmor

Nous discutons ici l'évolution de l'état de spin 1/2 d'une particule, qui pourrait être un noyau nucléaire de spin 1/2, dans un matériau.

La particule est supposée être au repos, ce qui permet d'oublier l'état quantique spatial de celle-ci, et de ne traiter que l'état de spin $|s(t)\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$. (Pour être plus précis, on peut supposer que le champ \vec{B} est uniforme, et que l'état spatial de la particule est dans l'état fondamental de $\hat{H}_{espace} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t))^2 + qU(\vec{x}, t)$.)

Ainsi, $|\psi(t)\rangle = |\psi_{0,espace}\rangle \otimes |s(t)\rangle$, et on ne s'intéresse que à la dynamique de $|s(t)\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ décrite par :

$$\hat{H}_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

qui a deux valeurs propres $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega$, $\omega = \frac{g\mu}{\hbar} |\vec{B}|$. L'équation d'évolution de Schrödinger est

$$i\hbar \frac{d|s(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|s(t)\rangle$$

Nous cherchons à décrire l'évolution du vecteur spatial de spin défini eq(4.4.1) page 181 :

$$\vec{s}(t) = \langle \hat{\vec{S}} \rangle = \langle s(t) | \hat{\vec{S}} | s(t) \rangle$$

Nous rappelons que inversement le vecteur $\vec{s}(t)$ défini l'état $|s(t)\rangle$ à une phase près. Comme $\|\vec{s}(t)\| = \frac{\hbar}{2}$, cette évolution défini des trajectoires sur la sphère de Bloch.

Propriété

$\vec{s}(t)$ évolue d'après les "équations de Bloch" :

$$\frac{d\vec{s}(t)}{dt} = \frac{dH_{spin}}{d\vec{s}} \wedge \vec{s} = \left(-\frac{g\mu}{\hbar} \vec{B} \right) \wedge \vec{s} \tag{4.9.4}$$

où $H_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{B}$ est le Hamiltonien (Classique).

Les trajectoires sont donc des cercles autour du champ \vec{B} , à la fréquence

$$\omega = \frac{g\mu}{\hbar} |\vec{B}|$$

dans le sens indirect. Voir figure 4.9.1.

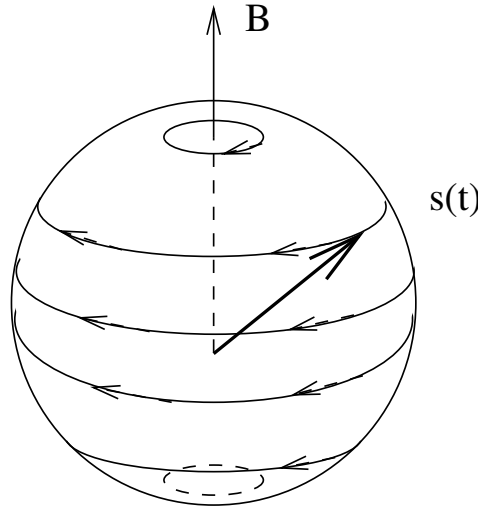


FIGURE 4.9.1 – **Précession de Larmor** du spin : rotation du vecteur $\vec{s}(t)$ autour du champ magnétique \vec{B} .

Le rapport de fréquence de précession du spin d'un proton et d'un électron est

$$\frac{\omega_p}{\omega_e} = \frac{g_p \mu_N}{g_e \mu_B} \simeq 5000$$

preuve : (TD)

- Argument rapide : lors de l'évolution, l'énergie est constante, donc $\vec{s} \cdot \vec{B}$ est constant donc l'angle $\widehat{\vec{s}\vec{B}}$ est constant, ce qui oblige le spin \vec{s} à tourner autour de \vec{B} .
- Autre preuve rapide, en coordonnées : on peut supposer que $\vec{B} = B \vec{e}_z$. Alors $\hat{H}_{spin} = -\frac{g\mu B}{\hbar} \hat{S}_z$. Il est utile de travailler dans la base $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$: si

$$|s(0)\rangle = a(0)|+_z\rangle + b(0)|-_z\rangle$$

alors

$$|s(t)\rangle = \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right) |s(0)\rangle = a(t)|+_z\rangle + b(t)|-_z\rangle$$

avec $a(t) = a(0)e^{-iEt/\hbar}$, $b(t) = b(0)e^{+iEt/\hbar}$, et $E = -\frac{g\mu B}{2}$. D'après la coordonnées stéréographiques (4.4.2) page 182,

$$z(t) = \frac{a(t)}{b(t)} = z(0) e^{-2iEt/\hbar} = z(0) e^{i\omega t}$$

donc $\varphi(t) = -\omega t + \varphi(0)$ et $\theta(t) = \theta(0) = cste$, $\omega = \frac{2|E|}{\hbar} = \frac{g\mu}{\hbar} |\vec{B}|$.

- Autre argument géométrique : le Hamiltonien $\hat{H}_{spin} = -\omega S_z$ a justement l'expression du générateur des rotations $\hat{S}_{\vec{u}}$ (4.5.2) autour de l'axe \vec{u} qui est ici l'axe \vec{B} . De cette façon on obtient directement que le mouvement est une rotation, et on obtient aussi la vitesse angulaire.

Remarques :

- L'énergie de la trajectoire classique du spin est $E_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{B}$, qui est extremum pour \vec{s} et \vec{B} parallèles. On vérifie en particulier que dans ces derniers cas, ce sont deux points fixes de la dynamique de $\vec{s}(t)$, correspondant aux deux états propres \hat{H}_{spin} .
- On a des coordonnées canoniques (q, p) sur la sphère montrant que la sphère S^2 est un espace de phase classique pour la dynamique du vecteur classique $\vec{s}(t)$ (θ, φ sont les coordonnées sphériques) :

$$\begin{aligned} q &= \cos \theta \\ p &= s \cdot \varphi \end{aligned}$$

Alors l'équation de Bloch (4.9.4) s'écrit sous la forme Hamiltonienne standard :

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H_{spin}}{\partial p} \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H_{spin}}{\partial q} \end{aligned}$$

preuve : voir [Fau10a].

@@TD : Décrire la trajectoire du neutron de spin 1/2 dans champ magnétique in-homogène. Exp. de Stern-Gerlach

4.9.4 Résonance Magnétique Nucléaire (R.M.N.) et Imagerie Magnétique Résonante (I.R.M.)

L'interaction du spin des particules avec un champ magnétique décrite ci-dessus, est très utilisée pour faire de **l'imagerie** dans beaucoup de domaines (physique des matériaux, biologie, médecine,...). Ces techniques d'imagerie se sont très développées ces dernières années et sont en particulier un outil formidable en médecine pour l'étude des tissus vivants, et a révolutionné le domaine (voir par exemple une carte précise interactive du cerveau <http://www.med.harvard.edu/AANLIB/cases/caseNA/pb9.htm>).



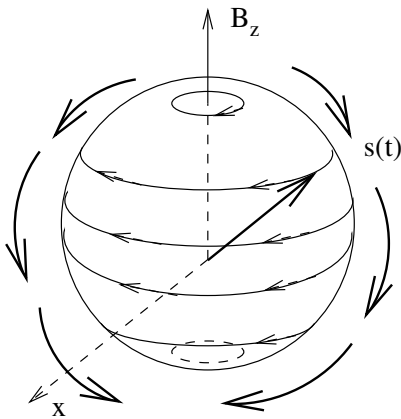
Ces techniques sont basées sur l'interaction d'un champ magnétique appelé "sonde" avec les spins des noyaux nucléaires du milieu étudié.

Voici la technique utilisée, décrite de façon très simplifiée :

1. L'échantillon est placé dans un champ magnétique constant \vec{B}_0 parallèle à l'axe z . $B_0 \simeq 2 \rightarrow 10T$. Les états d'énergie de chaque spin (pour simplifier supposé être 1/2, et considéré comme isolé) est donc $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega$. A température ambiante, $kT/\hbar\omega \simeq 10^5$, donc d'après la loi de Boltzmann, à l'équilibre, il y a une différence de population très faible entre les deux états : $N_+/N_- = e^{-\Delta E/kT} \simeq 1 - \frac{\Delta E}{kT} = 1 - 10^{-5}$. C'est cependant ces petites différences qui feront un signal observable.
2. A un moment donné, et sur une courte durée (pulse de quelques $\mu s.$), le champ magnétique appliqué est de la forme :

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 \cos(\omega_1 t) \vec{e}_x$$

où B_0 est le même, et $B_1 \ll B_0$ est faible, mais oscille à une fréquence ω_1 bien choisie. Si la fréquence ω_1 est suffisamment proche de la fréquence ω , il est montré en TD qu'il y a un phénomène de **résonance** : un spin 1/2 peut basculer vers l'état $-1/2$, si la durée du pulse est aussi bien ajustée (et inversement). (voir figure).



Ce pulse a donc pour effet d'inverser les populations N_+, N_- . Il faudra ensuite un certain temps, appelé temps de relaxation $T_2 (\simeq 1s)$, pour que les populations retrouvent leur valeurs d'équilibre selon z . Durant tout ce temps, les spins ($+1/2$ ou $-1/2$) qui sont ainsi rentrés en résonance ont **émit un champ magnétique induit** qui est détecté collectivement. Le signal temporel ainsi détecté, appelé Free Induction Decay (FID), constitue l'information de base sur l'échantillon.

3. **Ce signal recueilli dépend de plusieurs paramètres qui caractérisent le noyau nucléaire, et permettent ainsi de l'identifier :**

- (a) Il y a un signal, si il y a résonance. Il faut $\omega_1 \simeq \omega$. Or $\omega = \frac{g\mu}{\hbar} B$ dépend de g , B , qui dépendent du noyau. Par exemple $g = 2.016$ pour un spin $1/2$ de Fe^{3+} dans le composé MgO . La valeur de $B = B_0(1 - s)$ ressentie par le noyau est la valeur B_0 modifiée légèrement par l'environnement électronique du noyau (les électrons créent un champ magnétique induit, appelé diamagnétique). $s \simeq 10^{-6}$. Cet effet s'appelle le **déplacement chimique**.
 - (b) Il y a une faible interaction entre les spins de noyaux nucléaires voisins, qui dépend de la **configuration de la molécule** dans laquelle se trouve le noyau. Ces interaction, se traduisent par des décalages de fréquences ω , ou des multiplets dans le cas de noyau identiques comme dans CH_4 .
 - (c) **Le temps de relaxation T_2 dépend beaucoup du matériau**. C'est essentiellement ce signal qui est utilisé en imagerie.
 - (d) L'intensité du signal est aussi proportionnelle à la concentration des noyaux identifiés.
4. Afin de faire de l'imagerie, il faut une bonne résolution du signal en espace et en temps. Cela est possible en utilisant un champ $B_0(\vec{x})$ qui est en fait non homogène, et légèrement variable en temps (idées de P. Lanterbur's 1971 et P. Mansfield 1973, voir www.beyonddiscovery.org) . Ainsi un signal de résonance détecté, pourra être associé à une région précise de l'espace. Cela permet des **résolution spatiales $1mm \times 1mm$ et temporelles $40ms$** .

4.10 Conseils de Lecture

- Cohen-Tannoudji [CBF], chapitre IV.
- Feynman [Fey63], chapitres 6,11.

Chapitre 5

Plusieurs particules

Jusqu'à présent nous avons présenté comment décrire la dynamique d'une seule particule avec spin ou sans spin dans le cadre de la mécanique quantique.

Bien entendu, toute la complexité de la nature et de la physique vient de ce qu'elle est composée d'un grand nombre de particules qui interagissent entre elles.

Dans ce chapitre nous présentons comment décrire un système quantique constitué de plusieurs particules. Tout d'abord nous présentons le cas de particules différentes, dites **discernables**, puis le cas de particules identiques (par exemple un gaz d'électrons ou de photons, d'hydrogène,...).

5.1 Plusieurs particules discernables

Nous allons montrer et commenter le fait mathématique que **l'espace quantique total pour décrire plusieurs plusieurs particules est le produit tensoriel** des espaces quantique de chaque particule considérée individuellement.

5.1.1 Pour deux particules

Prenons l'exemple d'un système comprenant deux particules différentes, comme par exemple l'atome d'hydrogène constitué d'un proton et d'un électron.

Ce sont des particules avec spin $1/2$, et nous avons défini l'espace de Hilbert individuel de chacune des particules : \mathcal{H}_{proton} , $\mathcal{H}_{electron}$ qui permet de décrire l'état spatial de leur fonction d'onde et leur état de spin. Or dans l'atome d'hydrogène, ces deux particules interagissent, il faut donc considérer et décrire le système total.

Quel peut être un état quantique du système total ? Si $|p_i\rangle, i = 1, \dots$ est une base de \mathcal{H}_{proton} et $|e_j\rangle, j = 1, \dots$ une base de $\mathcal{H}_{electron}$, il est tout à fait possible d'imaginer un état total de la forme $|p_i, e_j\rangle$. Mais *d'après le principe de superposition*, il peut aussi y avoir des combinaisons linéaires de ces états $|p_i e_j\rangle$. Or ces états sont orthogonaux entre eux (car ils décrivent des états physiques différents, voir chapitre 1), ils forment donc une

base de \mathcal{H}_{total} . C'est justement la définition de l'espace produit tensoriel, voir eq.(3.1.5) page 148. Ainsi :

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_{proton} \otimes \mathcal{H}_{electron}$$

et une base de \mathcal{H}_{total} est $|p_i e_j \rangle = |p_i \rangle \otimes |e_j \rangle$, avec $i = 1, \dots, \quad j = 1, \dots$

Cela peut paraître un peu abstrait, et en effet cela dépasse le bon sens parfois : du fait du produit, cet espace \mathcal{H}_{total} est "gigantesque" et contient nous allons le voir des états quantiques qui défient le bon sens. Le principe de superposition est à l'origine de ce résultat (qu'il ne faut croire, que si l'expérience le confirme).

En terme de fonction d'onde : Si on oublie le spin des particules, une fonction d'onde du proton est de la forme $\psi_p(x_p, y_p, z_p)$, une fonction d'onde de l'électron est de la forme $\psi_e(x_e, y_e, z_e)$ (ce sont des fonctions à trois variables), alors qu'une fonction d'onde du système global est de la forme $\phi(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e)$, *c'est une fonction à six variables*. Nous avons déjà discuté, les corrélations qui peuvent apparaître entre ces variables, cf. figure (3.1.2) page 148. (En tant que fonction à six variables, $|\phi \rangle \in L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$ comme expliqué page 146).

5.1.2 Opérateurs de \mathcal{H}_{total}

Les opérateurs positions, impulsion, spin et autres, sont définis dans les chapitres précédents pour un état quantique à une particule. Voici comment ils opèrent dans l'espace \mathcal{H}_{tot} .

Par exemple si on note \hat{x}_p l'opérateur position x du proton, il agit de la façon suivante sur la fonction d'onde totale :

$$(\hat{x}_p \phi)(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e) = x_p \phi(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e)$$

où en terme de notation vectorielle, l'opérateur associé au proton n'agit que sur les vecteurs du proton dans les termes factorisés :

$$\hat{x}_p(|p \rangle \otimes |e \rangle) = (\hat{x}_p |p \rangle) \otimes |e \rangle \quad (5.1.1)$$

et agit comme l'opérateur identité sur l'espace de l'électron. C'est à dire

$$(\hat{x}_p)_{\mathcal{H}_{tot}} = (\hat{x}_p)_{\mathcal{H}_p} \otimes \hat{I}_e$$

5.1.3 Pour N particules

La généralisation est simple :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

mais l'espace résultant est énorme ! (sa dimension est le produit des dimensions).

5.2 Non localité de la mécanique quantique, le paradoxe E.P.R.

référence : Bransden p673 [BC89], Ballentine [L.E90] p.437.

Pour un texte court, lire : <http://www.physique.usherb.ca/attracte/08-1999/epr.html>

5.2.1 États enchevêtrés : états surprenants de l'espace total

Le principe de superposition est à l'origine de la complexité de la mécanique quantique.

Nous avons déjà vu que pour une particule, alors que son état classique est de la forme (\vec{x}, \vec{p}) , avec position et vitesse précises, la mécanique quantique permet une superposition de tels états comme : $|\vec{x}, \vec{p}\rangle + |\vec{x}', \vec{p}'\rangle$, une fonction d'onde qui serait la somme de deux paquets d'ondes gaussiens différents.

Pour deux particules, il peut y avoir des états de la forme

$$|\phi\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle$$

où $|i\rangle$ est une fonction d'onde respectivement de la particule $i = 1, 2$. Un état $|\phi\rangle$ qui peut s'écrire sous cette forme est dit **factorisable** ou **séparable**. Il n'est pas trop surprenant physiquement.

Mais la mécanique quantique permet à priori des superpositions de tels états. Par exemple :

$$|\phi\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle + |1'\rangle \otimes |2'\rangle \quad (5.2.1)$$

qui est une superposition de deux états factorisés. C'est un état non factorisable, dit **état enchevêtré** (ou "entangled state" en anglais).

De tels états sont observés expérimentalement. Les manifestations physiques de ces états défient le bon sens. On décrit ci-dessous une expérience à l'issue de laquelle deux particules sont dans un état enchevêtré, et l'on discute les conséquences mesurables.

5.2.2 Description quantique orthodoxe

Dans cette expérience, une paire de deux particules de spin 1/2 est créée en un lieu et instant précis. Nous appelons cet événement E_1 . Nous supposons que l'état quantique qui décrit le spin des deux particules est :

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle_1 \otimes |-_z\rangle_2 - |-_z\rangle_1 \otimes |+_z\rangle_2) \quad (5.2.2)$$

l'indice 1 ou 2 se réfère au numéro de la particule. L'état $|\phi\rangle$ est un état enchevêtré.

Cet état correspond à *un spin total nul*, appelé état singlet de spin, voir section 6.5.1. En effet l'observable de spin total est $\vec{S}_{tot} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, et il est aisé de calculer que $(\vec{S}_{tot})^2 |\phi\rangle = 0$.

Il y a plusieurs façons de créer un tel état, voir par exemple : <http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/french/rydberg/resonant/eprpair.html>. Ce peut être par la désintégration d'un pion π_0 qui a un spin nul, en électron et positron :

$$\pi_0 \rightarrow e^- + e^+$$

Les particules 1 et 2 partent dans des directions opposées, vers des détecteurs symbolisés par les physiciens P_1 et P_2 . Voir figure 5.2.1.

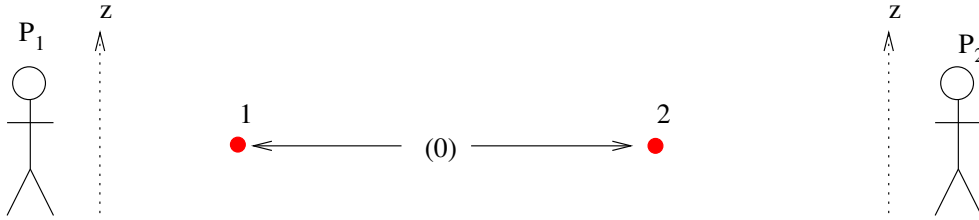


FIGURE 5.2.1 – Les deux particules 1 et 2 sont dans un état enchevêtré, et partent vers deux détecteurs P_1, P_2 .

A l'aide d'un appareil du type Stern-Gerlach, le physicien P_1 effectue une mesure de l'observable :

$$\hat{A} = \left(\frac{2}{\hbar} \right) \hat{S}_{1,z}$$

(composante du spin de la particule 1 selon l'axe z). C'est l'évènement E_2 . Les deux valeurs propres de cette observable sont ± 1 . Par conséquent d'après le postulat de la mesure, voir page 61, à l'issue d'une mesure, le physicien P_1 observera le résultat $A = +1$ ou $A = -1$, avec les probabilités respectives

$$P_{A=+1} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} |\langle +_{1,z} | \phi \rangle|^2 = \frac{1}{2},$$

$$P_{A=-1} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} |\langle -_{1,z} | \phi \rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

et si il observe $A = +1$ (respect. $A = -1$), alors juste après la mesure, l'état quantique des deux particule est $|+_{z > 1} \otimes |-_{z > 2}$, (respectivement $|-_{z > 1} \otimes |+_{z > 2}$) qui est l'état ϕ projeté sur l'espace propre de \hat{A} associé à la valeur propre $A = +1$ (respect. $A = -1$). On remarque donc que cette mesure du physicien P_1 modifie l'état quantique du système total et en particulier celui de la particule 2. C'est l'évènement E_3 sur la figure (5.2.2).

Si *juste après cette première mesure*, le physicien P_2 effectue à son tour une mesure de l'observable

$$\hat{B} = \left(\frac{2}{\hbar} \right) \hat{S}_{2,z}$$

(composante du spin de la particule 2 selon l'axe z), appelé évènement E_4 , et alors deux cas se présentent selon la valeur de A précédente :

5.2. NON LOCALITÉ DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE, LE PARADOXE E.P.R.207

1. si $A = +1$, l'état quantique réduit étant $|\phi \rangle = |+_z \rangle_1 \otimes |-_z \rangle_2$, le physicien P_2 mesure $B = -1$ avec la probabilité $P_{B=-1} = 1$ (c'est à dire certitude).
2. si $A = -1$, l'état quantique réduit étant $|\phi \rangle = |-_z \rangle_1 \otimes |+_z \rangle_2$, le physicien P_2 mesure $B = +1$ avec probabilité 1.

Cette certitude totale traduit une **corrélacion parfaite** entre les états de spin des deux particules. Remarquez que si le physicien P_2 avait effectué sa mesure le premier l'analyse aurait été analogue.

En résumé, d'après cette analyse de la situation par la mécanique quantique (et postulat de la mesure), l'état $|\phi \rangle$ est enchevêtré jusqu'à la première mesure, et subitement, dès la première détection, il est réduit instantanément dans un produit factorisé $|+_z \rangle_1 \otimes |-_z \rangle_2$, ou $|-_z \rangle_1 \otimes |+_z \rangle_2$ respectant la corrélation des deux spins opposés (on parle de "réduction" ou "collapse" de l'état quantique).

Cela est en parfait accord avec les expériences, et cette réduction qui est une sorte *d'action à distance "instantanée"*, (est même *plus rapide que la vitesse de la lumière* qui est la vitesse limite du transport d'énergie et d'information d'après la théorie de la relativité), car elle se passe même si les deux mesures sont deux événements E_2, E_3 sans relation de causalité, c'est à dire espacés par un quadri-vecteur de type espace. Voir figure 5.2.2.

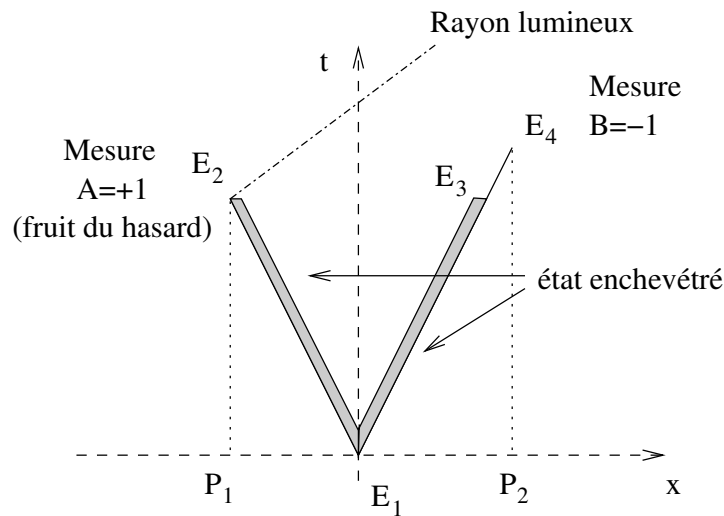


FIGURE 5.2.2 – Schéma dans l'espace temps des événements. E_1 est la création de l'état enchevêtré $|\phi \rangle$ eq.(205) représenté par la ligne grisée. Les particules 1 et 2 se séparent et restent enchevêtrées, jusqu'à ce que le spin de la particule 1 soit mesuré. C'est l'évènement E_2 . Dans cet exemple le physicien P_1 mesure $A = +1$. Au même instant (dans le référentiel x, t du laboratoire?), l'état quantique $|\phi \rangle$ est réduit, et la particule 2 se retrouve dans l'état $|-_z \rangle$. C'est l'évènement E_3 . Cet état est ensuite mesuré par le physicien P_2 , qui observe $B = -1$ (Évènement E_4). La ligne tiret-pointe est le cône de lumière qui représente le trajet le plus rapide (vitesse de la lumière) informant du résultat $A = +1$. Sur ce schéma il ne parvient pas à temps pour expliquer le résultat $B = -1$.

Remarque : Cette action instantanée à distance “plus rapide que la lumière”, **ne permet pas de transmettre de l’information**, et ne contredit pas les principe de la relativité. En effet, P_1 ne choisit pas si le résultat est $A = +1$ ou $A = -1$; il ne peut donc pas transmettre de message à P_2 de cette manière.

Cependant il y a une difficulté très visible sur la figure 5.2.2 : où se situe précisément l’évènement de réduction (E_3)? Il peut être simultané à E_1 , mais la notion de simultanéité dépend du référentiel en relativité. Quel est le référentiel privilégié ici ? La question se pose, bien qu’elle n’a pas d’impact sur le résultat observé. On peut tout de même constater que la théorie quantique et la théorie de la relativité sont inconsistantes entre elles.

Résumé Dans ce paragraphe, nous avons montré que par suite logique du principe de la superposition, la mécanique quantique entraîne des **interactions non locales** : le résultat d’une mesure “ici” dépend de façon instantanée du résultat d’une mesure qui se passe “là-bas”. Or la notion d’évènements instantanés, simultanés n’a pas de sens en théorie de la relativité.

Hubert Reeves dans “Patience dans l’azur” écrit : “Je reprends l’énoncé avec une comparaison pour le lecteur moins familier avec la physique des atomes. A deux messagers, on a donné la consigne suivante : ils devront répondre à une question par oui ou par non. Si le premier répond oui, le second devra répondre non, et vice-versa. Les choses se passent telles que prévues. Il serait raisonnable de supposer qu’ils se sont donné le mot au départ et qu’à chaque instant du trajet chacun savait ce que l’autre allait répondre. Pourtant on montre que tel n’est pas le cas. Aucun des deux n’a choisi avant l’arrivée quelle réponse il allait donner. Comment expliquer que le second connaisse la bonne réponse ?”

5.2.3 Objection de Einstein-Podolsky-Rosen (E.P.R.) sur la non localité (1935)

En 1935, l’objection de ces trois physiciens fut que même si elle ne permet pas de transmettre de l’information, cette action à distance est inacceptable, car non consistente avec la théorie de la relativité qui est locale en espace-temps ; ils étaient partisans d’une **théorie physique locale**.

Ces physiciens suggérèrent que les mêmes résultats expérimentaux peuvent s’interpréter autrement, par une théorie qui serait locale : **dès le départ l’état de spin des deux particules serait décidé**, c’est à dire que l’une ou l’autre des deux situation est déjà engagée : $|+z \rangle_1 \otimes |-z \rangle_2$ ou $|-z \rangle_1 \otimes |+z \rangle_2$ chacune se produisant en moyenne 1 fois sur 2. Le choix de l’une ou l’autre situation est le fruit du hasard, ou résulte d’un mécanisme microscopique déterministe ou non mais inconnu. Il y aurait donc des **variables dynamiques cachées**.

Ces physiciens ont donc ouvert un débat : Quelle interprétation est correcte, la mécanique quantique avec le postulat de la mesure qui est non local, ou une théorie locale à variables cachées ?

Ces deux interprétations seraient-elles équivalentes (compatibles) ?

Le résultat fondamental que nous allons établir ci-dessous est :

La théorie quantique est une théorie non locale. Cela a été confirmé expérimentalement.

5.2.4 Théories locales à variable cachées et inégalités de Bell (1964)

En 1964, J. Bell montre que les deux interprétations précédentes ne sont pas équivalentes et que des expériences pourraient trancher le débat [Bel64]. Les “inégalités de Bell” sont des relations vérifiées par toute théorie locale à variable cachée, et dans certains cas non respectées par le modèle de la mécanique quantique.

A la section suivante, nous présenterons une situation plus simple à expliquer montrant la non localité de la mécanique quantique, appelé “égalité de GHZ”, découverte en 1989. Cependant cette égalité n’a pas été observée expérimentalement.

A cause de l’importance historique de l’inégalité de Bell, et des expériences associées nous établissons une telle inégalité pour dans ce chapitre.

Pour se mettre dans un cas où l’inégalité de Bell est transgressée par la mécanique quantique, supposons que les physiciens P_1 et P_2 mesurent respectivement la composante du spin de la particule 1 (et 2) selon l’axe \vec{a} (et \vec{b}). Voir figure 5.2.3.

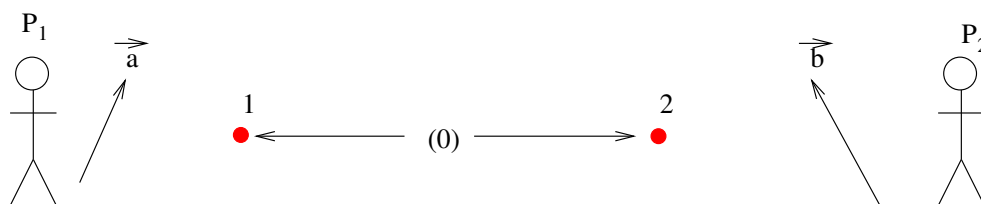


FIGURE 5.2.3 – Mesure de $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) = \hat{A}(\vec{a}) \hat{B}(\vec{b})$.

On note $\hat{A}(\vec{a}) = \left(\frac{2}{\hbar}\right) \hat{S}_{1,\vec{a}}$ et $\hat{B}(\vec{b}) = \left(\frac{2}{\hbar}\right) \hat{S}_{2,\vec{b}}$ les observables correspondantes.

Le résultat de leur mesure est $A(\vec{a}) = \pm 1$ et $B(\vec{b}) = \pm 1$.

Considérons l’observable :

$$\hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) = \hat{A}(\vec{a}) \hat{B}(\vec{b})$$

La valeur moyenne de cette observable s’obtient expérimentalement en faisant un grand nombre d’expériences successives.

Théorie locale à variable cachée Supposons que une théorie locale à variables cachées soit valide. Pour simplifier les notations mais sans perte de généralité, on note λ “la variable cachée” dont on ne saurait prévoir le comportement, et $p(\lambda) d\lambda$ la probabilité pour que lors d’une expérience, une valeur de l’intervalle $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ soit réalisée.

Le résultat de la mesure de P_1 est une certaine fonction de λ (inconnue) :

$$A(\lambda, \vec{a}) = \pm 1$$

de même pour le résultat de P_2 :

$$B(\lambda, \vec{b}) = \mp 1 = -A(\lambda, \vec{b})$$

Noter que $A(\lambda, \vec{a})$ ne dépend pas de \vec{b} d'après l'hypothèse de localité. En effet le choix de la valeur de \vec{b} se fait localement juste avant la mesure de B et ne peut pas influencer le résultat de A d'après l'hypothèse de localité. (La relation $B(\lambda, \vec{b}) = -A(\lambda, \vec{b})$ vient de ce que les deux résultats sont toujours corrélés).

D'après ce modèle, la valeur moyenne de "l'observable $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})$ " est alors :

$$E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda p(\lambda) A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{b})$$

Propriété On a l'**inégalité de Bell** : pour tous $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$,

$$\left| E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) \right| < 1 + E_{loc}(\vec{b}, \vec{c}) \quad (5.2.3)$$

Démonstration.

$$\begin{aligned} E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) &= \int d\lambda p(\lambda) \left(A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{b}) - A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{c}) \right) \\ &= - \int d\lambda p(\lambda) \left(A(\lambda, \vec{a}) A(\lambda, \vec{b}) \right) \left(1 + A(\lambda, \vec{b}) B(\lambda, \vec{c}) \right) \end{aligned}$$

donc $\left| E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) \right| \leq \int d\lambda p(\lambda) \left| 1 + A(\lambda, \vec{b}) B(\lambda, \vec{c}) \right| = 1 + E_{loc}(\vec{b}, \vec{c})$, car $\int p(\lambda) d\lambda = 1$ et $A = B = \pm 1$ donc $|1 + AB| = (1 + AB)$. □

Remarque : l'inégalité de Bell obtenue dépend du dispositif considéré. En général, on appelle **inégalité de Bell**, l'inégalité obtenue à partir de l'hypothèse de localité.

5.2.5 Violation de l'inégalité par la mécanique quantique (1976)

5.2.5.1 Modèle quantique

en mécanique quantique la valeur moyenne de l'observable $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})$ sur l'état $|\phi\rangle$ eq.(5.2.2) page 205, est :

$$\begin{aligned} E_Q(\vec{a}, \vec{b}) &= \langle \phi | \hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) | \phi \rangle = -\cos(\theta) \\ \theta &= \widehat{\vec{a}, \vec{b}} \quad \text{: angle entre } \vec{a} \text{ et } \vec{b} \end{aligned}$$

Démonstration. On peut choisir les vecteurs \vec{a}, \vec{b} dans le plan (z, x) . Montrons que l'état ϕ est invariant par rotation : $\hat{R}_\theta|\phi\rangle = |\phi\rangle$. Posant

$$|\theta\rangle = R_\theta|+_z\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+_z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-_z\rangle$$

on a :

$$\begin{aligned}\hat{R}_\theta|\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta\rangle \otimes |\theta + \pi\rangle - |\theta + \pi\rangle \otimes |\theta\rangle) \\ &= \dots = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle \otimes |-_z\rangle - |-_z\rangle \otimes |+_z\rangle) = |\phi\rangle\end{aligned}$$

On peut donc supposer que \vec{a} est selon l'axe z . Alors utilisant $\langle +|S_z|-\rangle = 0$,

$$\begin{aligned}\langle \phi|\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})\phi\rangle &= \frac{1}{2}\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 (\langle +, -|S_z S_b|+, -\rangle + \langle -, +|S_z S_b|-, +\rangle) \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{2}{\hbar}\right) (\langle -|S_b|-\rangle - \langle +|S_b|+\rangle)\end{aligned}$$

or $S_b = \left(\frac{\hbar}{2}\right) (|\theta\rangle\langle\theta| - |\theta + \pi\rangle\langle\theta + \pi|)$ donc

$$\begin{aligned}\langle \phi|\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})\phi\rangle &= \frac{1}{2} (|\langle -|\theta\rangle|^2 - |\langle -|\theta + \pi\rangle|^2 - |\langle +|\theta\rangle|^2 + |\langle +|\theta + \pi\rangle|^2) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right) = -\cos\theta\end{aligned}$$

□

Remarque : comme attendu pour $\vec{a} = \vec{b}$, les deux théories sont en accord :

$$E_Q(\vec{a}, \vec{a}) = E_{loc}(\vec{a}, \vec{a}) = -1.$$

Considérons des directions $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ coplanaires telles que $(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\pi}{3}$, $(\vec{b}, \vec{c}) = \frac{\pi}{3}$, $(\vec{a}, \vec{c}) = \frac{2\pi}{3}$. Alors

$$\left| E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c}) \right| = \left| -\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right| = \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| = 1$$

$$1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c}) = 1 - \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \frac{1}{2}$$

L'inégalité de Bell (5.2.3) n'est pas vérifiée. On dit qu'il y a "*violation de l'inégalité de Bell par la mécanique quantique*".

Conséquence : **la mécanique quantique est une théorie non locale.**

Exercice :

Fixer $(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\pi}{2}$, et poser $(\vec{b}, \vec{c}) = \alpha$, avec $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ coplanaires donc $(\vec{a}, \vec{c}) = \frac{\pi}{2} + \alpha$. Calculer et tracer $|E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c})|$ et $1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c})$ en fonction de α .

Solution :

$$|E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c})| = \left| -\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{2} + \alpha\right) \right| = |\sin(\alpha)|$$

et $1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c}) = 1 - \cos(\alpha)$. Voir figure 5.2.4. Pour $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$, on a $\sin \alpha > 1 - \cos \alpha$ donc violation de l'inégalité de Bell.

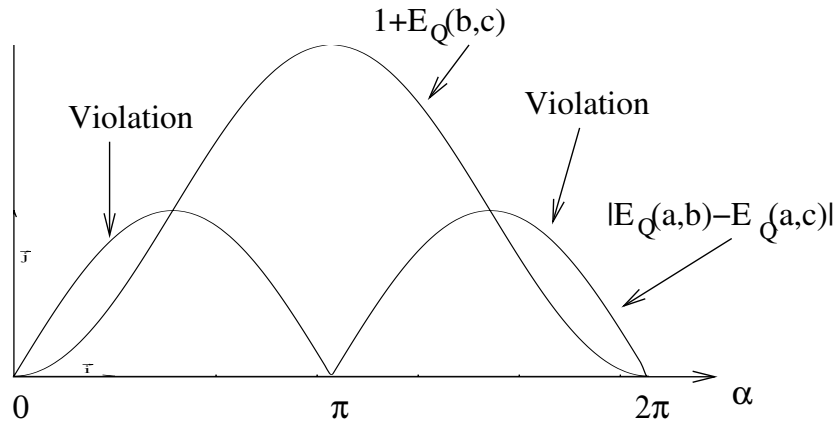


FIGURE 5.2.4 – Violation d’une inégalité de Bell par la mécanique quantique.

5.2.5.2 Non localité de la mécanique quantique, confirmation expérimentale

En 1976, les expériences de Alain Aspect utilisant des photons polarisés, (au lieu de particules avec spin 1/2) montrent la violation d’inégalités de Bell, et sont donc en faveur de la mécanique quantique [Asp76, ADR82]. Ainsi *l’interprétation par une théorie locale à variable cachée n’est pas possible. La non localité de la mécanique quantique est observée expérimentalement.*

Les résultats de l’expérience sont en parfait accord avec la mécanique quantique.

Des expériences plus récentes ont été faites où la distance entre les deux mesures est de l’ordre de 10 km. Elles sont toujours en parfait accord avec la mécanique quantique.

Une expérience peut être faite en T.P. à l’université, voir [DM02].

5.2.6 Égalité de G.H.Z. (1989)

Nous présentons ici un autre protocole expérimental qui **démontre que la théorie quantique est non locale.**

Références : article de Laloë (sur la page web du cours), page 17, et *Greenberger, Horne, Zeilinger, Am. Jour of Phys. vol 58, p1131, 1990.*

Comme auparavant, on note $|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ et $|-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ les deux états de base d'un spin 1/2. On considère 3 particules de spin 1/2. On ne décrit que les états de spin et non pas leur état spatial. L'espace quantique est donc de dimension 6, c'est :

$$\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes 3} = \mathbb{C}^6$$

Les trois particules sont séparées spatialement, et chacune est envoyée vers un détecteur capable d'observer son état de spin.

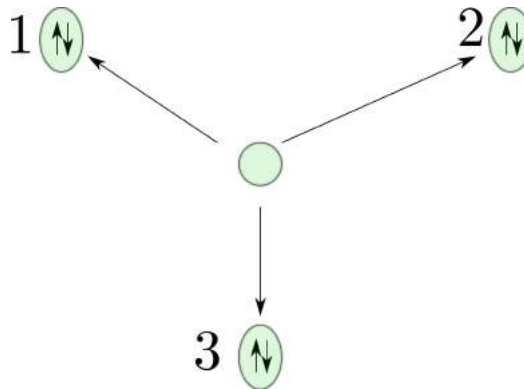


FIGURE 5.2.5 – . Schéma de l'état $\psi = |+++ \rangle - |-- \rangle$ à trois particules enchevêtré.

Supposons que les 3 particules soient dans l'état enchevêtré de spin :

$$\psi = |+++ \rangle - |-- \rangle$$

Rappel sur le processus de la mesure d'après la théorie quantique : si un physicien situé près de la particule 1 mesure l'état de son spin $\sigma_z^{(1)}$ par exemple, il observera $\sigma_z^{(1)} = \pm 1$ avec des probabilités respectives

$$\text{Proba} (\sigma_z^{(1)} = 1) = \frac{\|\mathcal{P}_{\sigma_z^{(1)}=1}(\psi)\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\| |+++ \rangle \|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{1}{2}, \quad \text{Proba} (\sigma_z^{(1)} = -1) = \frac{1}{2},$$

ou $\mathcal{P}_{\sigma_z^{(1)}}$ est le projecteur sur l'espace propre $\sigma_z^{(1)}$. Si le résultat est $\sigma_z^{(1)} = 1$ par exemple, alors l'état total de spin des trois particules juste après la mesure est "réduit" en:

$$\psi' = \mathcal{P}_{\sigma_z^{(1)}=1}(\psi) = |+++ \rangle$$

Cela signifie une modification "instantanée, non locale" de l'état de spin des particules 2 et 3. C'est le "collapse" de l'état quantique.

La question posée par Einstein-Podolsky-Rosen (EPR 1935) est (à nouveau) de savoir si cette modification non locale est réelle ou non. Ce résultat pourrait-t-il s'expliquer par une théorie locale non encore découverte ? c'est à dire une théorie qui montrerait par exemple que l'état des 3 particules $|+++ \rangle$ ou $|- - - \rangle$ est décidé en fait dès leur séparation et que la corrélation existante n'est qu'un effet de mémoire. Autrement dit que le phénomène de collapse n'est pas réel mais est seulement dû au formalisme de la mécanique quantique que l'on utilise.

5.2.6.1 Description avec la théorie quantique

On considère l'observable

$$\hat{A}_{xyy} := \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)}$$

et

$$\hat{B} := \sigma_x^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(3)}$$

où $\sigma_y^{(i)}$ est une matrice de Pauli agissant sur la particule i .

Rappel : $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ont des valeurs propres ± 1 . Observer que les matrices avec des indices (i) différents commutent entre elles car elles agissent sur des particules différentes. Le spectre de \hat{A}_{xyy} et de \hat{B} est donc ± 1 .

Etablissons d'abord le résultat suivant concernant ces opérateurs :

Lemme 5.2.1. *L'état $\psi = |+++ \rangle - |-- - \rangle$ est vecteur propre de l'opérateur \hat{A}_{xyy} de valeur propre $+1$, c'est à dire :*

$$\hat{A}_{xyy} \psi = \psi$$

et est vecteur propre de l'opérateur \hat{B} avec la valeur propre (-1) , c'est à dire :

$$\hat{B} \psi = -\psi$$

Avant de prouver ce Lemme, discutons la signification physique¹ :

1.

Remarque 5.2.2. On peut montrer cependant que aucun des termes individuels n'a une valeur sûre. Par exemple $\text{Proba}_\psi(\sigma_x^{(1)} = 1) = 0.5$, $\text{Proba}_\psi(\sigma_x^{(1)} = -1) = 0.5$.

Démonstration. On $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle + |-_z\rangle)$, et $|-_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle - |-_z\rangle)$ donc $|+_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_x\rangle + |-_x\rangle)$, $|-_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_x\rangle - |-_x\rangle)$. Donc

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_x +_z +_z\rangle + |-_x +_z +_z\rangle - |+_x -_z -_z\rangle + |-_x -_z -_z\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+_x\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z +_z\rangle - |-_z -_z\rangle) + |-_x\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z +_z\rangle + |-_z -_z\rangle) \right) \end{aligned}$$

Proposition 5.2.3. Une mesure des l'observables A_{xyy} ou A_{yxy} ou A_{yyx} dans l'état ψ donne avec certitude le résultat

$$A_{xyy} = 1, \quad A_{yxy} = 1, \quad A_{yyx} = 1. \quad (5.2.4)$$

(car par symétrie le numéro de la particule n'importe pas). De même une mesure de B dans l'état ψ donne avec certitude

$$B = -1 \quad (5.2.5)$$

Pour illustrer ce que signifie la proposition précédente, on imagine que un ensemble de 3 particules est envoyé régulièrement dans l'état ψ comme sur la figure 5.2.5. L'expérimentateur 1 mesure $\sigma_x^{(1)}$, l'exp.. 2 mesure $\sigma_y^{(2)}$ et l'exp.. 2 mesure $\sigma_y^{(3)}$. Ils collectent leur résultats et obtiennent à la fin un tableau de la forme :

	$\sigma_x^{(1)}$	$\sigma_y^{(2)}$	$\sigma_y^{(3)}$	$A_{xyy} = \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)}$
Mesure 1	1	-1	-1	1
Mesure 2	-1	1	-1	1
Mesure 3	-1	-1	1	1
Mesure 4	1	1	1	1
⋮				

De même dans une autre série d'expérience ils mesures $\sigma_y^{(1)}, \sigma_x^{(2)}, \sigma_y^{(3)}$ puis $\sigma_y^{(1)}, \sigma_y^{(2)}, \sigma_x^{(3)}$ puis $\sigma_x^{(1)}, \sigma_x^{(2)}, \sigma_x^{(3)}$ et déduisent en faisant le produit de leur résultats, A_{yxy}, A_{yyx} et B . La théorie quantique prédit que à chaque mesure les valeurs obtenues sont $A_{xyy} = A_{yxy} = A_{yyx} = 1$ et $B = -1$.

Démonstration. du Lemme. On a

$$\sigma_x|+\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle, \quad \sigma_x|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle.$$

$$\sigma_y|+\rangle = i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i|-\rangle, \quad \sigma_y|-\rangle = i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i|+\rangle.$$

donc

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)}\psi &= (|-\rangle|+\rangle|+\rangle - |+\rangle|-\rangle|-\rangle) \\ \sigma_y^{(2)}(\sigma_x^{(1)}\psi) &= i(|-\rangle|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle) \end{aligned}$$

et finalement

donc

$$\text{Proba}_\psi(\sigma_x^{(1)} = 1) = \frac{\|\text{Proj}_{+x}(\psi)\|}{\|\psi\|^2} = \frac{1}{2}$$

etc.

□

$$\hat{A}_{xyy}\psi = \sigma_y^{(3)} (\sigma_y^{(2)} \sigma_x^{(1)} \psi) = i^2 (|---\rangle - |+++ \rangle) = \psi$$

Pour $\hat{B}\psi$ on a

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} \psi &= | - ++ \rangle - | + -- \rangle \\ \sigma_x^{(2)} (\sigma_x^{(1)} \psi) &= | - - + \rangle - | + + - \rangle \\ \hat{B}\psi &= \sigma_x^{(3)} (\sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(1)} \psi) = | - -- \rangle - | + ++ \rangle = -\psi \end{aligned}$$

□

5.2.6.2 Etude (non quantique) avec une hypothèse de localité

On va maintenant essayer de prédire la valeur du résultat de la mesure de B avec **l'hypothèse d'une théorie locale**. On introduit des variables aléatoires $\sigma_x^{(i)}, \sigma_y^{(i)}, \dots$ prenant les valeurs ± 1 et représentant des résultats de mesure où $i = 1, 2, 3$ est numéro des particules. L'**hypothèse de localité** implique que lors d'une mesure, le résultat $\sigma_x^{(1)}$ ne dépend pas de $\sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}$ car les particules sont distantes les une des autres (etc pour tous les indices).

Supposons à priori que l'on a le résultat (5.2.4) c'est à dire :

$$A_{xyy} = \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)} = +1, \quad A_{yxy} = \sigma_y^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_y^{(3)} = +1, \quad A_{yyx} = \sigma_y^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_x^{(3)} = +1,$$

alors on obtient d'une part que $A_{xyy}A_{yxy}A_{yyx} = 1$ et d'autre part, utilisant $(\sigma^{(i)})^2 = +1$, $\forall i$, on obtient

$$\begin{aligned} A_{xyy}A_{yxy}A_{yyx} &= (\sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)}) (\sigma_y^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_y^{(3)}) (\sigma_y^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_x^{(3)}) \\ &= \sigma_x^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(3)} = B \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

Conclusion :

$$B = 1.$$

qui est en contradiction claire avec le résultat (5.2.5) prédit par la théorie quantique.

Conclusion : la théorie quantique n'est pas une théorie locale.

Cependant il n'y a pas d'expérience à ce jour qui vérifie (5.2.5).

Remarque 5.2.4. Insistons sur l'utilisation de l'hypothèse de localité. Dans l'équation (5.2.6), l'hypothèse de localité est introduite en supposant par exemple que le résultat $\sigma_y^{(2)}$ est le même dans la mesure collective de A_{xyy} et de A_{yyx} . En effet ce qui diffère entre ces deux mesures est l'orientation des appareils de détection des particules (1) et (3), et ce choix ne peut pas influencer le résultat de la mesure sur (2), d'après l'hypothèse de localité. Cela nous a alors permis de simplifier le produit en utilisant $(\sigma_y^{(2)})^2 = 1$. Autrement dit, dans le cadre de la théorie quantique (non locale), le résultat $\sigma_y^{(2)}$ dépend du choix des orientations des appareils (1) et (3) qui peuvent pourtant être situés très loin de (2)! Dans une expérience les physiciens prennent soin de faire ces choix au dernier moment, de façon à être sûr qu'aucun signal causal (i.e. avançant à une vitesse inférieure à $c = 3.10^8 m/s$) puisse informer (2) de ces choix. Cela est délicat et rend l'expérience difficile à réaliser.

5.3 Plusieurs particules identiques

Dans le cas de plusieurs particules *identiques*, une différence importante apparaît par rapport au cas de plusieurs particules *discernables* décrit dans la section 5.1.

5.3.1 Deux particules identiques

5.3.1.1 Particules de spins demi-entier, les Fermions

L'électron est une particule élémentaire de spin 1/2. Si deux électrons sont respectivement dans les états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, on pourrait penser que l'ensemble est décrit par le vecteur $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Déjà on peut remarquer que expérimentalement, il serait impossible de distinguer l'état $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ de l'état $|\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle$, ou de toute combinaison linéaire de ces états, puisque l'échange des deux électrons passerait inaperçue.

Principe : L'expérience montre que dans la nature, chaque paire de particule identique élémentaire de spin 1/2 (ou demi-entier 3/2, 5/2, 7/2) est dans un état de la forme dite **antisymétrique**, notée :

$$|\psi_1\rangle \wedge |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle) \quad (5.3.1)$$

ou toute combinaison linéaire (i.e. superposition) de tels états antisymétrique. Les autres combinaisons sont donc interdites.

Remarques :

- Les particules élémentaires de spin 1/2 soumises à ce principe s'appellent des **Fermions**. Ce sont les quarks, électrons, neutrinos, leptons, et particules analogues d'antimatière ...)
- Ce principe appelé **principe spin-statistique** se justifie en théorie quantique relativiste. Mais il manque actuellement une explication simple de cette correspondance.
- (*) Le symbole “ \wedge ” s'appelle le **produit extérieur**. L'espace des états quantique décrivant deux électrons contient donc les vecteurs de la forme (5.3.1). C'est un espace vectoriel, qui est le produit extérieur des espaces à un électron (ou l'antisymétrisé), et noté

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_e \wedge \mathcal{H}_e = \hat{\mathcal{A}}(\mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_e)$$

- le facteur $1/\sqrt{2}$ est pour la **normalisation** dans le cas où $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ sont chacun orthogonaux et normalisés. En effet dans ce cas

$$\| |\psi_1\rangle \wedge |\psi_2\rangle \|^2 = \frac{1}{2} (2 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle) = 1$$

- On a

$$(|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle) = -(|\psi_2 \rangle \wedge |\psi_1 \rangle)$$

- Conséquence de l'anti-symétrie : **deux électrons ne peuvent être dans le même état quantique**. En effet

$$|\psi \rangle \wedge |\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi \rangle \otimes |\psi \rangle - |\psi \rangle \otimes |\psi \rangle) = 0$$

qui est le vecteur nul et ne peut donc pas décrire un état physique. C'est le **principe d'exclusion de Pauli** formulé en 1925 pour expliquer la structure des atome.

- (*) Cette anti-symétrie se reflète au niveau de la fonction d'onde des deux particules. Si les deux particules ont le même état de spin, disons $|+\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$, et dans des états spatial différents, $|\varphi_1 \rangle, |\varphi_2 \rangle \in \mathcal{H}_{spatial}$ posons :

$$\begin{aligned} |\psi_1 \rangle &= |\varphi_1 \rangle \otimes |+\rangle \\ |\psi_2 \rangle &= |\varphi_2 \rangle \otimes |+\rangle \end{aligned}$$

alors

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle = (|\varphi_1 \rangle \wedge |\varphi_2 \rangle) \otimes (|+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2)$$

Noter donc que la partie spatiale est antisymétrique, alors que la partie spin est symétrique.

La fonction d'onde (spinorielle) est défini par :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= (\langle x_1 | \otimes \langle x_2 |) (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle x_1 | \varphi_1 \rangle \otimes \langle x_2 | \varphi_2 \rangle - \langle x_1 | \varphi_2 \rangle \otimes \langle x_2 | \varphi_1 \rangle) \otimes (|+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(\vec{x}_1) \varphi_2(\vec{x}_2) - \varphi_2(\vec{x}_1) \varphi_1(\vec{x}_2)) \otimes (|+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2) \end{aligned}$$

qui vérifie donc :

$$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = -\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

- (*) Si au contraire les deux particules ont des états de spin différents, elles peuvent être dans le même état spatial. Prenons l'exemple des deux électrons de l'atome d'hélium, qui sont dans l'orbitale spatiale $|S \rangle \in \mathcal{H}_{spatial}$, et ont des états de spins différents, disons $|+\rangle, |-\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$

Alors $|\psi_1 \rangle = |S \rangle \otimes |+\rangle, |\psi_2 \rangle = |S \rangle \otimes |-\rangle$, et

$$\begin{aligned} |\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle &= (|S \rangle_1 \otimes |S \rangle_2) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2 - |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2) \\ &= (|S \rangle_1 \otimes |S \rangle_2) \otimes (|+\rangle \wedge |-\rangle) \end{aligned}$$

Cette fois ci, la partie spatiale est symétrique, alors que la partie spin est anti-symétrique.

- En particulier, deux particules ayant le même état de spin, ne peuvent être au même endroit \vec{x} , car d'après ci-dessus,

$$\psi(\vec{x}, \vec{x}) = -\psi(\vec{x}, \vec{x}) \quad \text{donc} \quad \psi(\vec{x}, \vec{x}) = 0$$

Ce principe d'exclusion agit donc comme une répulsion, bien qu'il ne s'agisse pas d'une force à proprement parler (il n'y a pas de particule qui transmet la force, comme le photon transmet la force électromagnétique).

- Les **particules composées** d'un nombre impair de fermions sont approximativement des fermions en régime de faible concentration. Par exemple le neutron est composé de 3 quarks (u, d, d) est approximativement un fermion (de même pour le proton).
- Ce principe d'antisymétrie des fermions a des conséquences observables très claires en physique. Elle explique :
 - pour les neutrons et protons, la structure des **noyaux nucléaires**.
 - pour les électrons, les règles de remplissage des niveaux d'énergie électronique des atomes ou molécules.
 - le remplissage des états électroniques dans les solides cristallins. Ce remplissage est à l'origine des propriétés isolantes ou conductrices de ces matériaux, et finalement de la "solidité" et "impénétrabilité" de la matière solide à notre échelle.
 - Elle explique la taille, et les propriétés des étoiles "naines blanches", où les électrons sont soumis à ce principe d'exclusion (et de même la taille des étoiles à neutron).

5.3.1.2 Particules de spins entier, les Bosons

Principe : L'expérience montre que dans la nature, chaque paire de particule identique élémentaire de spin entier $0, 1, 2, \dots$ est dans un état de la forme dite **symétrique**, notée :

$$|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle + |\psi_2 \rangle \otimes |\psi_1 \rangle) \quad (5.3.2)$$

ou toute combinaison linéaire (i.e. superposition) de tels états symétriques. Les autres combinaisons sont donc interdites.

Remarques

- Les particules soumises à ce principe sont appelées des **Bosons**. C'est le cas du photon, des gluons, et autres particules de Jauge Z, W et Boson de Higgs, ...
- C'est aussi le cas pour les particules composées de spin entier (contenant un nombre pair de fermions) mais seulement dans l'approximation des faibles concentration. Par exemple les mésons $K, \pi = (q, \bar{q})$ (contenant un nombre pair de quarks), les atomes et molécules de spin entier comme $He_4 = (p, p, n, n, e, e)$, contenant un nombre pair de protons, neutrons et électrons, atome hydrogène $H = (p, e)$, noyau

deuterium $d = (p, n)$. référence : [MR90, §2.1.6]. Il est curieux que dans [CBF]p.1387 ce problème ne soit pas abordé.

- Cette correspondance appelée **spin-statistique** se justifie en théorie quantique relativiste.
- L'espace total des combinaisons linéaires d'états symétriques est noté :

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H} \vee \mathcal{H} = \hat{\mathcal{S}}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$$

- Si les deux particules ont le même état de spin, disons $|+\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$, la fonction d'onde des deux particules est symétrique :

$$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

Il n'y a pas de propriété d'exclusion comme dans le cas des fermions. Au contraire, il est "favorable" que deux particules soient dans le même état, ou au même endroit \vec{x} . Cela amène au phénomène de **condensation de Bose** à basse température (voir Cours de physique Statistique à ce sujet, [DGLR89]).

- Un **faisceau laser** contient un grand nombre de photons ($n \simeq 10^{20}$) qui sont tous (idéalement) dans le même état quantique, correspondant à un mode d'onde électromagnétique précis. Cela est possible car le photon est un boson.

5.3.2 Plusieurs particules identiques

Nous présentons le formalisme pour décrire l'état quantique de N fermions ou N bosons. Notons π un opérateur qui permute les N états. Par exemple pour $N = 3$:

$$\pi(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle) = (|\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle \otimes |\psi_3\rangle)$$

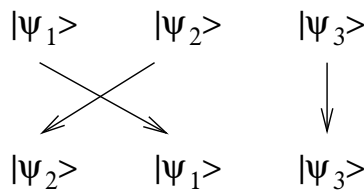


FIGURE 5.3.1 – Une permutation π de trois états, de signature $\sigma(\pi) = (-1)$.

Il y a $N!$ façons de permuter N états. Les opérateurs π correspondants forment le **groupe symétrique** S_N (voir [Bac]).

La **signature d'une permutation** notée $\sigma(\pi)$, vaut $(+1)$ ou (-1) selon que le nombre de croisements est pair ou impair dans le diagramme de correspondance (figure 5.3.1).

5.3.2.1 Cas des bosons

Un état de N **bosons** est une combinaison linéaire (i.e. superposition) de toutes les permutations possibles, de la forme :

$$|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{\pi \in S_N} \pi (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle) \right)$$

appelé **état totalement symétrique**.

Par exemple pour $N = 2$, on retrouve (5.3.2), et pour $N = 3$, cela donne :

$$\begin{aligned} |\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee |\psi_3 \rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{6}} (|\psi_1 \psi_2 \psi_3 \rangle + |\psi_1 \psi_3 \psi_2 \rangle + |\psi_3 \psi_2 \psi_1 \rangle + |\psi_2 \psi_1 \psi_3 \rangle + |\psi_3 \psi_1 \psi_2 \rangle + |\psi_2 \psi_3 \psi_1 \rangle) \end{aligned}$$

On note aussi l'opérateur **symétriseur** :

$$\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \pi \quad (5.3.3)$$

qui agit sur l'espace $\mathcal{H}^{\otimes N} = \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$. (c'est un projecteur orthogonal, voir proposition 5.3.1 plus bas pour l'explication du facteur $1/N!$). Ainsi :

$$|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle = \sqrt{N!} \hat{S} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle) \quad (5.3.4)$$

5.3.2.2 Cas des fermions

Un état de N **fermions** est une combinaison linéaire de toutes les permutations possibles affectée de leur signature, de la forme :

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{\pi \in S_N} \sigma(\pi) \pi (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle) \right)$$

appelé **état totalement antisymétrique**.

Par exemple pour $N = 2$, on retrouve (5.3.1), et pour $N = 3$, cela donne :

$$\begin{aligned} |\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge |\psi_3 \rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{6}} (|\psi_1 \psi_2 \psi_3 \rangle - |\psi_1 \psi_3 \psi_2 \rangle - |\psi_3 \psi_2 \psi_1 \rangle - |\psi_2 \psi_1 \psi_3 \rangle + |\psi_3 \psi_1 \psi_2 \rangle + |\psi_2 \psi_3 \psi_1 \rangle) \end{aligned}$$

On note aussi l'opérateur **anti-symétriseur** :

$$\hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \sigma(\pi) \pi \quad (5.3.5)$$

qui agit sur l'espace $\mathcal{H}^{\otimes N} = \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$. Ainsi :

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle = \sqrt{N!} \hat{A} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle)$$

Propriété : Si π est un opérateur de permutation, alors pour un état de N bosons :

$$\pi (|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle) = + (|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle)$$

et pour un état de N fermions :

$$\pi (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle) = \sigma(\pi) (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle)$$

par exemple pour une **transposition**, qui est une permutation échangeant seulement deux particules, on a $\sigma(\pi) = -1$.

Ainsi les états à N bosons sont des vecteurs propres des opérateurs de transpositions, avec la valeur propre $(+1)$. Et les états à N fermions, sont des vecteurs propres des opérateurs de transpositions, avec la valeur propre (-1) .

Démonstration. ([CBF] Cohen p1379) montrons que $\pi \hat{S} = \hat{S}$ et $\pi \hat{A} = \sigma(\pi) \hat{A}$:

$$\pi \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi' \in S_N} \pi \pi' = \frac{1}{N!} \sum_{\pi'' = \pi \pi' \in S_N} \pi'' = \hat{S}$$

où on a effectué le changement de variable $\pi'' = \pi \pi'$, et utilisé le fait que $\pi(S_N) = S_N$. De même :

$$\pi \hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi' \in S_N} \sigma(\pi') \pi \pi' = \frac{1}{N!} \sum_{\pi'' \in S_N} \sigma(\pi^{-1} \pi'') \pi'' = \sigma(\pi) \frac{1}{N!} \sum_{\pi'' \in S_N} \sigma(\pi'') \pi'' = \sigma(\pi) \hat{A}$$

où on a utilisé le fait que $\sigma(\pi^{-1} \pi'') = \sigma(\pi^{-1}) \sigma(\pi'')$ (morphisme de groupes) et donc $\sigma(\pi^{-1}) = \sigma(\pi)$. □

Exercice Considérons un électron (fermion) qui peut être dans M états distincts, $|e_1 \rangle, |e_2 \rangle, \dots, |e_M \rangle$. L'espace de Hilbert \mathcal{H}_1 à un électron correspondant est donc de dimension M .

1. D'abord dans le cas simple $M = 3$, supposons qu'il y a un deuxième électron. Donner alors une base de l'espace à deux électrons $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \wedge \mathcal{H}_1$, et déduire sa dimension.
2. Donner une base de \mathcal{H}_2 et sa dimension, pour M quelconque.
3. Généraliser, pour N électrons, donner une base de \mathcal{H}_N et sa dimension, pour N et M quelconques.

4. Même question pour des bosons.

Proposition 5.3.1. Notons $\mathcal{H}^{\otimes N} := \underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_N$ l'espace à N particules "discernables"

(sans symétrie). Considérons les opérateurs linéaires de symétrisation $\hat{\mathcal{S}} : \mathcal{H}^{\otimes N} \rightarrow \mathcal{H}^{\otimes N}$ défini en (5.3.3) et $\hat{\mathcal{A}} : \mathcal{H}^{\otimes N} \rightarrow \mathcal{H}^{\otimes N}$, défini en (5.3.5). Alors

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{S}}^2 &= \hat{\mathcal{S}}, & \hat{\mathcal{S}}^+ &= \hat{\mathcal{S}} \\ \hat{\mathcal{A}}^2 &= \hat{\mathcal{A}}, & \hat{\mathcal{A}}^+ &= \hat{\mathcal{A}},\end{aligned}$$

qui signifie que $\hat{\mathcal{S}}$ et $\hat{\mathcal{A}}$ sont des projecteurs orthogonaux sur les sous espaces respectivement des états totalement symétriques (ou "**espace bosonique**") $\hat{\mathcal{S}}(\mathcal{H}^{\otimes N})$ et antisymétriques (ou "**espace fermionique**") $\hat{\mathcal{A}}(\mathcal{H}^{\otimes N})$. De plus

$$\text{si } N \geq 2 \text{ alors } \hat{\mathcal{S}}\hat{\mathcal{A}} = 0,$$

$$\text{si } N = 2, \text{ alors } \hat{\mathcal{S}} + \hat{\mathcal{A}} = \hat{\text{Id}}.$$

Remarque 5.3.2.

- A propos du facteur $\sqrt{N!}$: si les vecteurs $\psi_j \in \mathcal{H}$ sont normalisés alors $\Psi := \psi_1 \otimes \psi_2 \dots \otimes \psi_N \in \mathcal{H}^{\otimes N}$ est normalisé, $\|\Psi\| = 1$. Par contre $\hat{\mathcal{S}}\Psi$ est symétrique mais pas normalisé (un projecteur orthogonal ne peut que diminuer la norme du vecteur) :

$$\begin{aligned}\|\hat{\mathcal{S}}\Psi\|^2 &= \langle \hat{\mathcal{S}}\Psi, \hat{\mathcal{S}}\Psi \rangle = \langle \Psi, \hat{\mathcal{S}}^2\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi, \hat{\mathcal{S}}\Psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \langle \Psi, \pi\Psi \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \|\Psi\|^2 = \frac{1}{N!}.\end{aligned}$$

On a utilisé que $\langle \Psi, \pi\Psi \rangle = 0$ si $\pi \neq \text{Id}$. Ainsi

$$\|\sqrt{N}\hat{\mathcal{S}}\Psi\| = 1$$

et le vecteur symétrique (5.3.4) est normalisé. Noter cependant que $\Psi := \psi_1 \otimes \psi_2 \dots \otimes \psi_N \in \mathcal{H}^{\otimes N}$ est un vecteur très particulier appelé "état produit". En général il est plus "naturel" de considérer l'opérateur $\hat{\mathcal{S}}$ (qui est un projecteur) plutôt que $\sqrt{N}\hat{\mathcal{S}}$.

- L'étude des représentations du groupe de permutation S_N et l'utilisation des tableaux de Young permet de généraliser ces résultats.

Démonstration. On a $\hat{\mathcal{A}} := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \sigma(\pi)\pi$. Donc

$$\hat{\mathcal{A}}^2 = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\pi, \pi' \in S_N} \sigma(\pi)\sigma(\pi')\pi \circ \pi' = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\pi, \pi' \in S_N} \sigma(\pi \circ \pi')\pi \circ \pi'.$$

car $\sigma : S_N \rightarrow \{-1, 1\}$ est un morphisme de groupe. Posons $\pi'' = \pi \circ \pi'$ et faisons le changement de variable $(\pi, \pi') \rightarrow (\pi, \pi'')$ avec $\pi' = \pi^{-1} \circ \pi''$. On a

$$\hat{\mathcal{A}}^2 = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\pi, \pi'' \in S_N} \sigma(\pi'')\pi'' = \frac{1}{N!} \left(\sum_{\pi \in S_N} 1 \right) \hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}$$

car il y a $N!$ éléments dans S_N donc $(\sum_{\pi \in S_N} 1) = N!$. On a $\pi^+ = \pi$ donc $\hat{\mathcal{A}}^+ = \hat{\mathcal{A}}$. De même on montre que $\hat{\mathcal{S}}^2 = \hat{\mathcal{S}}$ et $\hat{\mathcal{S}}^+ = \hat{\mathcal{S}}$. \square

5.3.2.3 Fonction d'onde à plusieurs particules, Déterminant de Slater.

@@

5.4 Aperçu sur les particules élémentaires et forces élémentaires (*)

Nous donnons cet aperçu très succinct, mais incontournable, car la mécanique quantique s'applique avant tout aux particules élémentaires et à ses composés.

La théorie actuelle en accord avec les expériences (le "modèle standard") date des années 1970-80.

Référence : http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/TutorialWelcome_fr.html,
<http://www-pdg.lbl.gov>.

5.4.1 Liste des particules élémentaires

5.4.1.1 La matière

6 quarks

			charge électrique (en e)
"up" u	"charm" c	"Top" t	+2/3
"down" d	"Strange" s	"Beauty or Bottom" b	-1/3

ces quarks n'existent que par groupes de deux ($q\bar{q}$) ou trois (qqq), où q dénote un quark, et \bar{q} dénote un anti-quark. Ce phénomène s'appelle **le confinement** ; c'est un fait expérimental pas entièrement compris au niveau théorique.

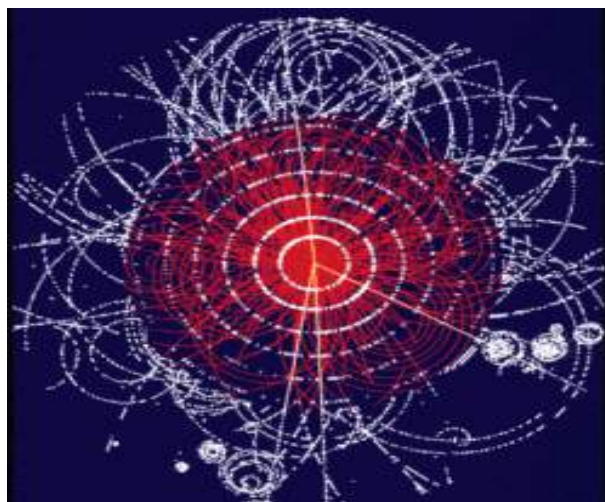


FIGURE 5.4.1 – Trajectoires de particules après une collision au CERN.

6 Leptons On indique la masse en MeV/c^2 .

			charge électrique (en e)
électron : e (0.5)	Muon : μ (105)	Tau : τ (1777)	+1
Neutrino électronique ν_e	Neutrino Muonique ν_μ	Neutrino Tau ν_τ	0

5.4.1.2 L'antimatière

Chaque particule a sa particule "image" d'anti-matière. Il y a donc 6 antiquarks, et 6 anti-leptons, de **même masse** que leur image, de **charge électrique opposée**, notés avec une barre. Exemple : $e^+ = \bar{e}^-$ est l'anti-électron, aussi appelé le positron.

Remarque : une particule de matière rencontrant une particule d'anti-matière peut s'annihiler et donner de l'énergie sous forme de rayonnement :

$$matiere + antimatiere \rightarrow energie$$

Ce processus a été très important au début de l'univers. Après une importante phase d'annihilation mutuelle, il est resté de la matière car elle était en excédent de 1%.

5.4.1.3 Les bosons de Jauge

Ce sont des particules qui transmettent les forces élémentaires.

- Le **photon** γ , de masse nulle, transmet la force électromagnétique entre les particules ayant une charge électrique.
- 8 **gluons** g , de masse nulle, transmettent la force nucléaire forte entre les quarks.

- Les **bosons W et Z** : W_0, W_+, W_- de masse $m = 80 \text{ GeV}/c^2$, et Z_0 de masse $m = 91 \text{ GeV}/c^2$, transmettent la force nucléaire faible entre les particules de matière et d'anti-matière. (quarks et leptons).
- Le boson de Higgs $m = 125 \text{ GeV}/c^2$.

Remarques :

- Les neutrinos ne sont sensibles que à la force nucléaire faible, et n'interagissent donc que très peu. Ils peuvent traverser la Terre facilement. Il y en a 200 par m^3 , provenant d'un reste "fossile" du Big Bang. Réf : Pour la science, juillet 2010.
- L'interaction gravitationnelle est aussi une force élémentaire, mais on ne sait pas si la théorie quantique s'applique pour elle. Autrement dit, on ne sait pas si il y a une particule de Jauge associée que l'on appellerait le **graviton**.

5.4.1.4 Particules élémentaires stables

Il y a donc peu de particules élémentaires. Surtout que la plupart cités ci-dessus sont instables : elles ont une durée de vie très courte. Elles apparaissent lors de collisions énergétiques, et se désintègrent très rapidement. Les particules élémentaires stables sont

$$e^-, \text{neutrinos}, \gamma$$

les quarks q et les gluons g n'existent pas à l'état individuel.

5.4.2 Les particules composées

La richesse et la diversité de la nature vient que ces particules élémentaires s'assemblent pour former des "particules composées" très variées.

5.4.2.1 Les mésons :

les mésons sont composés de deux quarks $q\bar{q}$ avec des gluons qui les lient. Par exemple le méson appelé "pion π_0 " est une superposition quantique :

$$\pi_0 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|d\bar{d}\rangle - |u\bar{u}\rangle)$$

de masse $m = 140 \text{ MeV}/c^2$, de charge 0.

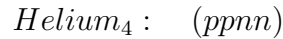
5.4.2.2 Les baryons :

Les baryons sont composés de trois quarks qqq avec des gluons qui les lient. Par exemple :

$$\begin{aligned} \text{Proton } p : & \quad (uud) \quad \text{masse} = 939 \text{ MeV}/c^2, \quad \text{charge} +1 \\ \text{Neutron } n : & \quad (udd) \quad \text{masse} = 940 \text{ MeV}/c^2, \quad \text{charge } 0 \end{aligned}$$

5.4.2.3 Noyau nucléaire

Un noyau nucléaire est composé de protons et neutrons. Par exemple



Il faut une proportion de neutron et protons adéquate pour former un noyau.

5.4.2.4 Composés plus élaborés : atomes, molécules, matériaux,...

Ensuite, les noyaux s'entourent d'électrons pour former des atomes, les atomes s'assemblent pour former des molécules, des matériaux, des fluides...

5.4.2.5 Particules composées stables

Les particules composées stables sont : le proton p , les noyaux nucléaires légers (He, C, O, \dots) les atomes, les matériaux,...

Remarque :

- le neutron isolé est instable, avec une durée de vie moyenne de 15mn (887 s. précisément).
- L'antimatière serait stable sans l'environnement de la matière. On a fabriqué des atomes d'anti-Hydrogène composés de \bar{p}^- et \bar{e}^+ .
- Le LHC au CERN, étudie depuis 2010 des collisions $p + \bar{p}$ à hautes énergies. On espère de nouvelles découvertes.

Deuxième partie
Outils et méthodes

Chapitre 6

Symétries et règles de conservation

Ce chapitre entame une deuxième partie du cours où l'on présente des méthodes spécifiques pour résoudre des problèmes de mécanique quantique. Dans le chapitre 8 "méthodes d'approximation", on présente différentes techniques standard d'approximation.

Dans le chapitre 6 "Symétries", il s'agit d'exploiter les symétries du problème.

6.1 Propriétés et méthodes de base

6.1.1 Spectre commun de deux opérateurs qui commutent

Jusqu'à présent nous avons discuté le spectre d'un seul opérateur à la fois. La propriété suivante qui concerne deux opérateurs est très utile pour la suite.

Propriété *Supposons que deux opérateurs auto-adjoints ayant du spectre discret \hat{A} et \hat{B} , commutent, c'est à dire que*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

Alors il existe une base propre commune des deux opérateurs. C'est à dire qu'il existe une famille de vecteurs $|V_i\rangle$ formant une base de \mathcal{H} , tels que

$$\hat{A}|V_i\rangle = a_i|V_i\rangle \quad \text{et} \quad \hat{B}|V_i\rangle = b_i|V_i\rangle$$

Géométriquement, les espaces propres de \hat{A} sont invariants par l'action de \hat{B} , et inversement.

Plus généralement on peut énoncer une propriété similaire pour N opérateurs qui commutent deux à deux.

Démonstration. (cf Bransden p205).

Considérons tout d'abord un opérateur \hat{A} seul, et son spectre. On note a les différentes valeurs propres de \hat{A} . Chaque valeur propre peut avoir une certaine multiplicité $d_a \geq 1$, et l'espace propre correspondant noté \mathcal{H}_a est de dimension d_a . Ainsi on décompose :

$$\mathcal{H} = \bigoplus_a \mathcal{H}_a$$

Considérons l'opérateur \hat{B} . Soit un vecteur $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_a$. Par définition, $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Notons $|\psi'\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$, alors

$$\hat{A}|\psi'\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle = a|\psi'\rangle$$

donc $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}_a$ aussi. On dit que **l'espace propre \mathcal{H}_a de \hat{A} est globalement invariant par l'opérateur \hat{B}** . On peut alors chercher le spectre de \hat{B} dans chaque l'espace \mathcal{H}_a . Un tel vecteur propre $|V_i\rangle$ vérifiera donc $\hat{B}|V_i\rangle = b_i|V_i\rangle$ et $\hat{A}|V_i\rangle = a|V_i\rangle$, car $|V_i\rangle \in \mathcal{H}_a$. □

6.1.2 Application : recherche du spectre de \hat{H}

L'application habituelle de cette propriété est la suivante :

Si \hat{A} est un opérateur dont le spectre est connu, et si l'on a $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, alors la propriété ci-dessus permet de simplifier la recherche du spectre de \hat{H} dans un espace \mathcal{H} . Il suffit :

1. Chercher les espaces propres \mathcal{H}_a de l'opérateur \hat{A} qui décomposent l'espace $\mathcal{H} = \bigoplus_a \mathcal{H}_a$
2. Chercher le spectre de \hat{H} dans chaque espace propre \mathcal{H}_a .

On a vu que la dynamique générée par \hat{H} est interne à chaque espace \mathcal{H}_a .

Exemples simples Voici des exemples (simples ; on verra des exemples plus compliqués plus loin, montrant l'intérêt de la méthode).

1. Pour une particule libre dans (x, y, z) , on a $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, et donc $[\vec{p}, \hat{H}] = 0$, c'est à dire $\hat{A}_1 = \hat{p}_x$, et $\hat{A}_2 = \hat{p}_y$, et $\hat{A}_3 = \hat{p}_z$. L'espace propre commun de valeur propre (p_x, p_y, p_z) correspond à une onde plane $|p_x, p_y, p_z\rangle$ (Il est de dimension 1). Par conséquent les états propres de \hat{H} sont des ondes planes.
2. Pour une particule à une dimension, dans un double puits de potentiel *symétrique*, cad $V(x) = V(-x), \forall x$, le Hamiltonien est $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$. Considérons **l'opérateur de parité $\hat{\mathcal{P}}$** défini par :

$$\hat{\mathcal{P}} : \psi(x) \rightarrow \psi(-x)$$

C'est un opérateur unitaire. On a $\hat{\mathcal{P}}^2 = I$, et donc ses valeurs propres sont ± 1 . L'espace propre associé à la valeur propre $+1$ noté \mathcal{H}_+ est constitué par toutes les fonctions paires. L'espace propre associé à la valeur propre -1 , noté \mathcal{H}_- , est constitué par toutes les fonctions impaires. Ce sont des espaces de dimension infinie, et l'on a $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$.

On a $^1 [\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$, et la propriété ci-dessus, permet de chercher les fonctions d'ondes stationnaires (spectre de \hat{H}), parmi les fonctions paires puis impaires. cf TD.

6.1.3 Loi de conservation et groupe de symétrie dynamique

Dans un espace de Hilbert \mathcal{H} , supposons encore que $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, et que \hat{A} soit un opérateur auto-adjoint.

Rappelons que l'opérateur auto-adjoint \hat{A} peut s'interpréter comme étant une **observable physique**, ou encore comme le **générateur d'un groupe à un paramètre de transformations unitaires** :

$$\hat{G}(\lambda) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{A}\lambda\right), \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

De même pour l'opérateur \hat{H} qui génère les opérateurs unitaires d'évolution :

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \quad t \in \mathbb{R}$$

Les quatre relations suivantes sont alors *équivalentes* :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= 0 \\ [\hat{U}(t), \hat{A}] &= 0 \quad , \forall t \\ [\hat{H}, \hat{G}(t)] &= 0 \quad , \forall t \\ [\hat{U}(t), \hat{G}(t)] &= 0 \quad , \forall t \end{aligned}$$

en effet, par exemple si $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, alors $[\hat{U}(t), \hat{A}] = \left[\exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right), \hat{A}\right] = \left[\sum_n \frac{1}{n!} \left(-i\hat{H}t/\hbar\right)^n, \hat{A}\right] = 0$ car $[\hat{H}^n, \hat{A}] = 0, \forall n$.

Nous allons voir maintenant que chacune de ces quatre relations a une interprétation ou une conséquence physique spécifique.

Tout d'abord la relation $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ a été exploitée au paragraphe précédent.

Ensuite :

1. preuve : Considérons $\mathcal{P} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ défini par $\mathcal{P}(x) = -x$. Alors l'opérateur de parité est $\hat{\mathcal{P}}\psi = \psi \circ \mathcal{P}$. Or $(\psi \circ \mathcal{P})' = (\psi' \circ \mathcal{P})\mathcal{P}' = -(\psi' \circ \mathcal{P})$ donc $\hat{p}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{\mathcal{P}}\hat{p}$. Donc $\hat{p}^2\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}\hat{p}^2$. On a $V(\hat{x})\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}V(\hat{x})$ donc finalement $\hat{H}\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}\hat{H}$.

6.1.3.1 Loi de conservation :

De la relation $[\hat{U}(t), \hat{A}] = 0$ on déduit que quelque soit l'état initial $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, la valeur moyenne de l'observable \hat{A} sur l'état $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$ est constante au cours du temps :

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \frac{\langle \psi(t) | \hat{A} \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} = \text{constante}_{/t} \quad (6.1.1)$$

Plus précisément, toute la distribution de probabilité de l'observable \hat{A} sur l'état $\psi(t)$, voir (1.6.1), est conservée.

preuve : pour la valeur moyenne,

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle (t) &= \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) \hat{A} | \psi(0) \rangle = \langle \hat{A} \rangle (0) \end{aligned}$$

, car $\hat{U}^\dagger \hat{U} = I$. Et plus généralement, si $\hat{\mathcal{P}}_a$ est le projecteur spectral de \hat{A} sur la valeur propre A_a , la probabilité à la date t est (on utilise que $\hat{U}(t)$ est unitaire, et que $[\hat{\mathcal{P}}_a, \hat{U}(t)] = 0$)

$$P_a(t) = \frac{\|\mathcal{P}_a \psi(t)\|^2}{\|\psi(t)\|^2} = \frac{\|\mathcal{P}_a \hat{U}(t) \psi(0)\|^2}{\|\hat{U}(t) \psi(0)\|^2} = \frac{\|\hat{U}(t) \mathcal{P}_a \psi(0)\|^2}{\|\psi(0)\|^2} = \frac{\|\mathcal{P}_a \psi(0)\|^2}{\|\psi(0)\|^2} = P_a(0)$$

Exemples simples

1. Pour une particule libre dans (x, y, z) , on a $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, et donc $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$. Alors $\langle \hat{p} \rangle (t) = cste$, c'est à dire que l'impulsion moyenne est conservée au cours du temps.
2. Pour une particule à une dimension, dans un double puits de potentiel *symétrique*, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, si l'état $|\psi(0)\rangle$ est une fonction paire (respect. impaire) à la date $t = 0$, alors elle reste une fonction paire (respect. impaire) à tout instant t .
3. On a $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ naturellement. Donc $\langle \hat{H} \rangle (t) = cste$: l'énergie moyenne est conservée. (Attention, on a supposé que l'opérateur \hat{H} ne dépend pas du temps).

Remarques :

- Sur la brisure spontanée de symétrie, qui fait que certains états observés ne respectent pas la symétrie de H . Ex : le crayon qui tombe, une particule dans un double puits, ou la vie qui a la chiralité droite (on assimile pas le sucre "gauche"). @@
- Non conservation de la parité par l'interaction faible. (1956) @@. Toutes les autres forces connues conservent la parité.

6.1.3.2 Groupe de symétrie dynamique

De la relation $[\hat{U}(t), \hat{G}(\lambda)] = 0, \forall t, \lambda,$ on déduit que la dynamique est invariante par les opérations de symétrie $\hat{G}(\lambda)$. En effet le diagramme de la figure (6.1.1)(a) commute. On dit que le groupe d'opérateurs $\hat{G}(\lambda)$ est un **groupe de symétrie dynamique**.

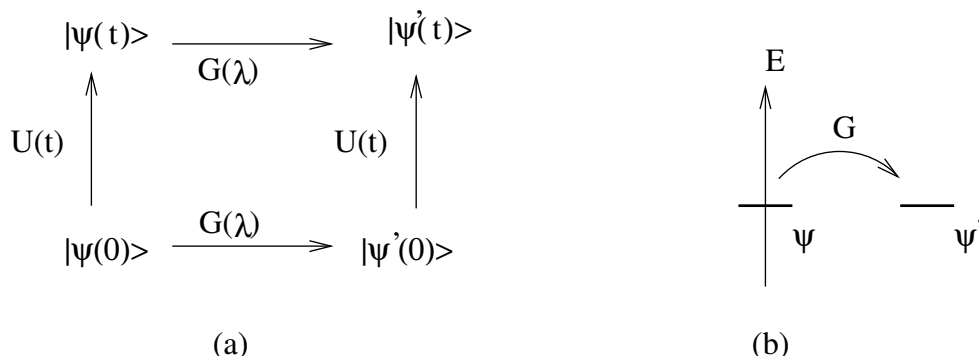


FIGURE 6.1.1 – (a) La relation de commutation $[\hat{U}(t), \hat{G}(\lambda)] = 0, \forall t, \lambda,$ signifie que partant d'un état $|\psi(0)\rangle$, il est équivalent de le transformer et le faire évoluer ensuite, ou l'inverse. (b) La relation $[\hat{H}, \hat{G}(\lambda)] = 0$ montre que si $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ alors $|\psi'\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$ est aussi vecteur propre de même énergie.

La relation $[\hat{H}, \hat{G}(\lambda)] = 0$ a pour conséquence que si $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, et si on transforme $|\psi'\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$, alors

$$\hat{H}|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{G}|\psi\rangle = \hat{G}\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{G}|\psi\rangle = E|\psi'\rangle \quad (6.1.2)$$

donc $|\psi'\rangle$ est aussi vecteur propre de \hat{H} , de même valeur propre E . Voir figure 6.1.1(b).

Autrement dit l'espace propre d'énergie E est invariant par l'action du groupe.

Si $|\psi'\rangle$ n'est pas colinéaire à $|\psi\rangle$, on déduit que la valeur propre E est dégénérée. Mais il se peut que $|\psi'\rangle$ soit colinéaire à $|\psi\rangle$. On verra plus loin une règle générale à ce sujet (selon que le groupe de symétrie est commutatif ou non).

Exemples simples

1. Pour une particule libre dans (x, y, z) , on a $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, et donc $[\vec{p}, \hat{H}] = 0$. Or \vec{p} est le générateur des translations en espace. Il y a donc invariance de la dynamique par translation spatiale. En termes plus simples, une particule libre aura la même évolution indépendamment de son point de départ.
2. On a $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ naturellement. Or \hat{H} est le générateur des translations en temps. Il y a donc invariance de la dynamique par translation temporelle. En termes plus simples, une particule aura la même évolution indépendamment de sa date de départ.

Exercice (TD) : réflexion d'un paquet d'onde sur un mur.

6.1.4 Impulsion totale et conservation

Considérons deux particules en **interaction mutuelle**, (comme un électron et un proton dans un atome d'hydrogène). Supposons que cette interaction soit décrite par une force dérivant de l'énergie potentielle $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ qui ne dépend que de la position relative $(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$.

L'espace de Hilbert total est

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$$

et le Hamiltonien total est l'opérateur :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$$

L'énergie ne dépend donc que de la distance mutuelle $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$ des deux particules.

Le système est donc invariant par translation de l'ensemble des deux particules, dont l'opérateur (de translation de $\vec{\lambda}$) agissant dans \mathcal{H}_{tot} est :

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{\lambda}} &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1 \cdot \vec{\lambda}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_2 \cdot \vec{\lambda}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_{tot} \cdot \vec{\lambda}\right) \end{aligned}$$

montrant que le générateur des translation de l'ensemble du système est l'opérateur **impulsion totale** :

$$\boxed{\vec{p}_{tot} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad : \text{impulsion totale}}$$

(rappel : il s'agit en fait de $\vec{p}_{tot} = \vec{p}_1 \otimes Id_2 + Id_2 \otimes \vec{p}_2$, voir eq.5.1.1).

2. Plus généralement, ce calcul montre que le générateur \hat{G}_{tot} d'une transformation dans $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \dots \otimes \mathcal{H}_N$ est la somme des générateurs $\hat{G}_{tot} = \hat{G}_1 \oplus \hat{G}_2 \dots \oplus \hat{G}_N$.

L'invariance par translation se traduit par les relations de commutation :

$$\left[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{\lambda}} \right] = 0 \quad (6.1.3)$$

$$\left[\hat{H}, \hat{p}_{tot} \right] = 0 \quad (6.1.4)$$

et ont pour conséquence que *l'impulsion totale est conservée, que le système total est invariant par translation spatiale.*

$$\left\langle \hat{p}_{tot} \right\rangle (t) = \text{constante}_{/t}$$

(Par exemple un atome d'hydrogène aura le même comportement quel que soit sa position globale initiale).

Plus généralement en physique, l'invariance par translation d'un ensemble de particules isolées est une propriété fondamentale qui est même un principe en physique des particules élémentaires (mais n'a plus de sens en relativité générale, car l'espace est courbe, et d'admet pas d'isométrie en général).

Exercice 6.1.1. On considère 2 particules en interaction mutuelle. Le Hamiltonien est

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)$$

1. Poser $M = m_1 + m_2$. On considère le changement d'opérateurs $(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2) \rightarrow (\vec{x}, \vec{p}, \vec{X}, \vec{P})$ définis par

$$\begin{aligned} \text{rel.} : & \begin{cases} \vec{x} & := \vec{x}_2 - \vec{x}_1 \\ \vec{p} & := \frac{1}{M} (m_1 \vec{p}_2 - m_2 \vec{p}_1) \end{cases} \\ G : & \begin{cases} \vec{X} & := \frac{1}{M} (m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2) \\ \vec{P} & := \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \end{cases} \end{aligned}$$

Noter que \vec{X} est la position du barycentre G , que \vec{P} est l'impulsion totale et \vec{x} la position relative des 2 particules. Montrer que les nouveaux opérateurs sont canoniques (i.e. $[x, p_x] = i\hbar \hat{I}$, etc.). Dédurre que l'espace total s'écrit

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{rel.} \otimes \mathcal{H}_G$$

2. Montrer que

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_{rel} + \hat{H}_G \\ \hat{H}_{rel} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{x}) \\ \hat{H}_G &= \frac{\hat{P}^2}{2M} \end{aligned}$$

avec $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ appelée la **masse réduite**. Noter que \hat{H}_{rel} agit dans \mathcal{H}_{rel} seulement, que \hat{H}_G décrit le mouvement libre du barycentre et agit dans \mathcal{H}_G seulement. On peut de manière analogue ramener un problème à N corps en interaction à la description du barycentre G libre découplé de $(N - 1)$ corps. Plus généralement, pour un groupe de symétrie, cette simplification s'appelle "la réduction symplectique".

6.2 Groupe de symétrie dynamique commutatif : électron dans un potentiel périodique cristallin, spectre en bandes.

ref : Sakurai p265. [J.J85].

Pour modéliser la dynamique des électrons dans un cristal, une approche simplificatrice (approximative) et de négliger tout d'abord, l'interaction répulsive entre électrons. Cela permet d'étudier la dynamique d'un électron individuellement.

Cet électron subit les forces électrostatiques exercées par les noyaux du cristal. Les noyaux sont rangés de façon périodique. On modélise donc ces forces par un potentiel $V(\vec{x})$ périodique, selon les trois translations élémentaires du cristal (voir figure 6.2.1) :

$$V(\vec{x} + \vec{l}_1) = V(\vec{x} + \vec{l}_2) = V(\vec{x} + \vec{l}_3) = V(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3,$$

Noter que la position d'un noyau se répète comme $\vec{x}_{a,b,c} = a\vec{l}_1 + b\vec{l}_2 + c\vec{l}_3$ avec $a, b, c \in \mathbb{Z}^3$ entiers. Cela forme le réseau cristallin.

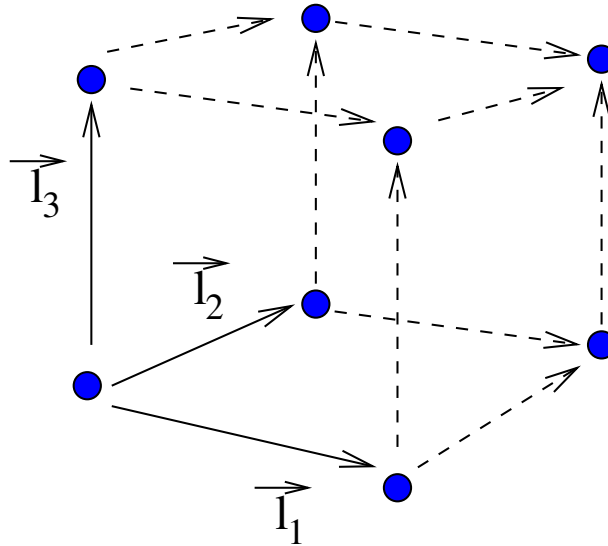


FIGURE 6.2.1 – Dans un cristal les atomes sont répartis de façon périodique. On note $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{l}_3$ les côtés d'une maille élémentaire.

6.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

La dynamique d'un électron est décrite par le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (6.2.1)$$

6.2.1 Explication qualitative de la formation de bandes

Sans calcul, il y a une façon simple de deviner la structure des niveaux d'énergies électronique dans un potentiel périodique :

Rappel : le potentiel Coulombien créé par un atome de charge $+Z$ est

$$V(r) = -\frac{(eZ)e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Le potentiel créé par la structure régulière d'atomes est la superposition de ces potentiels individuels, voir figure 6.2.2.

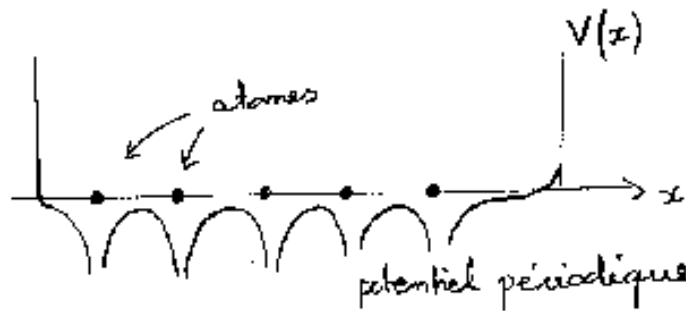


FIGURE 6.2.2 –

Pour un électron dans le potentiel d'un atome pris individuellement, le spectre a basse énergie est discret (comme l'atome H). Les états stationnaires (orbitales atomiques) sont **localisées**.

Mais à cause de la symétrie par rotation et du spin, les niveaux sont (quasi) dégénérés.

Rappel : pour l'atome H les niveaux d'énergie sont

$$E_n = -\frac{\varepsilon_1 Z^2}{n^2}$$

avec $\varepsilon_1 = me^4/(2\hbar^2) = 13,6 \text{ eV}$. et ensuite les autres nombres quantiques sont $0 \leq l \leq n-1$, $l \leq m \leq l$, $spin = \pm 1/2$. On appelle états s, p, d, f, \dots pour respectivement $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Au total :

orbitales	1s	2s	2p	3s	3p
nombre de niveaux	2	2	6	2	6

On s'intéresse maintenant à un **état discret donné pour l'atome seul**. cad $(n, l, m, \text{spin} = \pm \frac{1}{2})$ fixés.

- Si **2 atomes** identiques voisins : Les orbitales atomiques sont réparties sur les 2 atomes (liante-anti-liante) donnant 2 niveaux serrés
- Si **3 atomes** identiques : on a de même 3 niveaux serrés. chaque fonction est répartie sur les trois atomes.
- Si N atomes identiques (pour une mole, $N \approx 10^{23}$), il y aura N niveaux serrés \approx **bande d'énergie** et une fonction d'onde stationnaire est répartie sur tout le cristal appelée **onde de Bloch**.

Voir figure 6.2.3.

La **largeur de la bande** dépend du recouvrement des orbitales atomiques. Donc **bandes étroites pour le niveau 1s** et bandes plus larges au dessus.

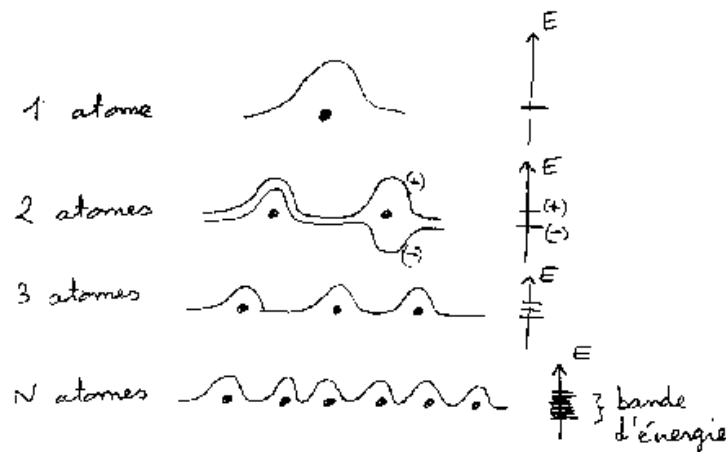


FIGURE 6.2.3 –

Schéma parlant :

Par l'imagination, on **ressère les atomes** (distance inter-atomes $a : \infty \rightarrow 0$). Les orbitales se recouvrent de plus en plus, alors les bandes passent de largeur 0 (dégénérés) à très larges (car recouvrement)

Par ex : Sodium qui a 11 électrons par atome, et un écart entre atomes $a = 3.7$, voir figures 6.2.4. Le remplissage des niveaux par les électrons donne la figure 6.2.5.

6.2.2 Ondes de Bloch

Reprenons maintenant le problème qui est de calculer le spectre de l'opérateur 6.2.1, en utilisant les symétries du problème.

Le but est de montrer que les symétries par translations sont responsables de la structure en bande du spectre.

Considérons les trois opérateurs unitaires de translations d'une maille élémentaire,

6.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

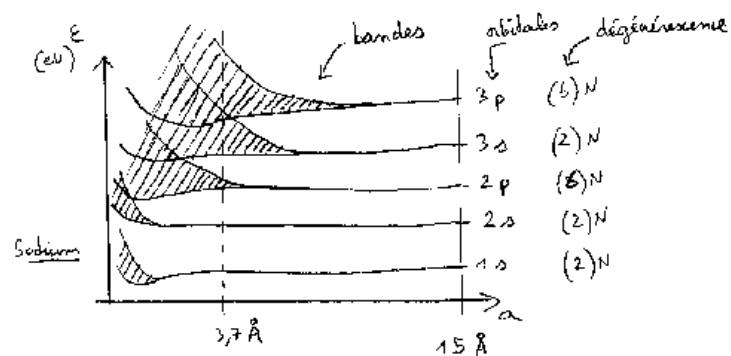


FIGURE 6.2.4 -

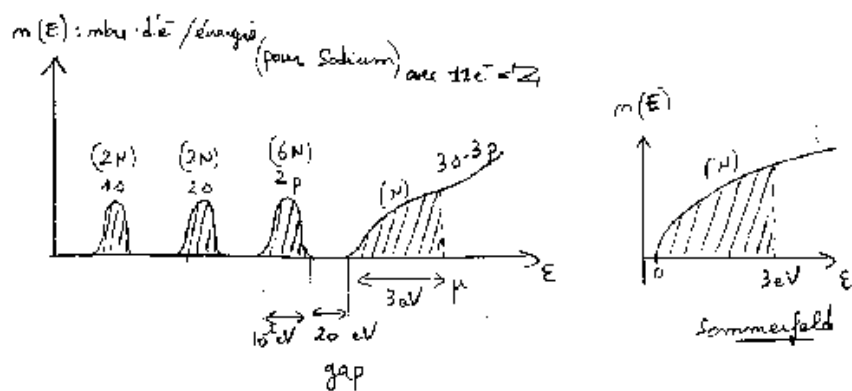


FIGURE 6.2.5 -

$\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$:

$$\boxed{\hat{T}_1 = \exp\left(-i\frac{\hat{p}\cdot\vec{l}_1}{\hbar}\right), \quad \text{etc...}}$$

La périodicité du potentiel se traduit par les relations de commutations :

$$\left[\hat{H}, \hat{T}_i\right] = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

On a aussi :

$$\left[\hat{T}_i, \hat{T}_j\right] = 0, \quad \forall i, j = 1, 2, 3$$

Montrant que **le groupe de symétrie dynamique sont les translations discrètes du réseau, et que c'est un groupe commutatif.**

Démonstration. la relation $\left[\hat{T}_i, \hat{T}_j\right] = 0$ découle de $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ (car les opérations de dérivation commutent). Pour montrer $\left[\hat{H}, \hat{T}_i\right] = 0$, il faut utiliser :

$$\hat{x}\hat{T}_i = \hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i) \quad (6.2.2)$$

Cela découle de $\hat{x}|x\rangle = x|\vec{x}\rangle$, et $\hat{T}_i|\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$, obtenu en eq. (2.1.11). Ainsi pour tout état $|\vec{x}\rangle$, on a $\hat{x}\hat{T}_i|\vec{x}\rangle = \hat{x}|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$. Et de même $\hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i)|\vec{x}\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)\hat{T}_i|\vec{x}\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$. Donc $\hat{x}\hat{T}_i = \hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i)$. On déduit progressivement, que cela est aussi vrai pour toute fonction $V(x)$, (d'abord sur les monômes, puis polynômes,...) c'est à dire :

$$V(\hat{x})\hat{T}_i = \hat{T}_i V(\hat{x} + \vec{l}_i)$$

dans notre cas, $V(\hat{x} + \vec{l}_i) = V(\hat{x})$; par ailleurs $[\hat{T}_i, \hat{p}] = 0$ donc $[\hat{H}, \hat{T}_i] = 0$. □

Ensuite, d'après la propriété de base page 231, afin d'étudier le spectre en énergie de \hat{H} ,

on cherche d'abord les vecteurs propres communs de $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$.

Ces trois opérateurs sont unitaires, et donc leur valeurs propres sont des nombres complexes de module 1, que l'on peut donc écrire sous la forme $e^{-i\varphi_k}$, $k = 1, 2, 3$.

En effet si $\hat{T}_1|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, alors $|\psi\rangle = \hat{T}_1^{-1}\hat{T}_1|\psi\rangle = \hat{T}_1^+\hat{T}_1|\psi\rangle = \bar{\lambda}\lambda|\psi\rangle$, donc $|\lambda| = 1$.

On note :

$$\boxed{\hat{T}_k|\psi\rangle = e^{-i\varphi_k}|\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3}$$

et l'espace de Hilbert des vecteurs propres communs de $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$, de valeur propre respectives $(e^{-i\varphi_1}, e^{-i\varphi_2}, e^{-i\varphi_3})$ sera noté $\mathcal{H}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$. C'est à dire

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \Leftrightarrow \hat{T}_k|\psi\rangle = e^{-i\varphi_k}|\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3$$

6.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

Cette dernière équation est équivalente à :

$$\boxed{\psi(\vec{x} + \vec{l}_k) = e^{i\varphi_k} \psi(\vec{x}), \quad k = 1, 2, 3} \quad (6.2.3)$$

En effet, (voir aussi eq.2.1.9) :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x} - \vec{l}_1) &= \langle \vec{x} - \vec{l}_1 | \psi \rangle = \langle x | \hat{T}_1 | \psi \rangle = e^{-i\varphi_1} \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= e^{-i\varphi_1} \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Ainsi, à $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \in [0, 2\pi]^3$ fixés, la fonction d'onde ψ est déterminée par sa valeur qu'elle prend dans une cellule du cristal, voir figure (6.2.1).

L'équation (6.2.3) est appelée **conditions de Bloch**, montrant que la fonction d'onde $|\psi\rangle$ est périodique à une phase près.

Une telle fonction d'onde est appelée **onde de Bloch**.

6.2.2.1 Spectre en bandes

Pour $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \in [0, 2\pi]^3$ fixés, c'est à dire dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}(\vec{\varphi})$, il suffit ensuite de résoudre l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\psi_{\vec{\varphi},n} = E_{\vec{\varphi},n}\psi_{\vec{\varphi},n} \quad (6.2.4)$$

La résolution de cette équation, donne pour $\vec{\varphi}$ fixé, un spectre d'énergie discret :

$$E_{\vec{\varphi},n}, \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

et $\psi_{\vec{\varphi},n}$ est une fonction d'onde vérifiant les conditions de Bloch (6.2.3).

Noter que grâce à la périodicité, au lieu de résoudre l'équation de Schrödinger dans tout le cristal, on est ramené à la résoudre dans une cellule seulement. Si il n'y a pas de symétrie supplémentaire, on ne peut rien dire de plus. Le spectre est discret en effet car une cellule est compacte (comme un puits de potentiel). Voir argument de la figure 1.5.2. (Les conditions de périodicité peuvent s'interpréter en disant que grâce à la périodicité, l'espace de configuration est devenu un tore \mathbb{T}^3).

A n fixé, et pour différent $\vec{\varphi}$, la valeur $E_{\vec{\varphi},n}$ parcourt un ensemble d'énergies appelée **bande d'énergie**. Chaque bande est indiquée par la valeur de n .

La figure 6.2.6, montre l'allure des bandes d'énergie ainsi obtenues.

Un intervalle d'énergie n'appartenant à aucune bande est appelé **bande interdite**.

Réseau réciproque : les trois vecteurs $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{l}_3$ caractérisent le réseau cristallin et forment une base de \mathbb{R}^3 . Le **réseau dual** (au sens de l'algèbre linéaire, voirs cours de M1 [Fau10b]), noté $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3 \in (\mathbb{R}^3)^* \equiv \mathbb{R}^3$ est défini par

$$\vec{k}_i \cdot \vec{l}_j = \delta_{ij}$$

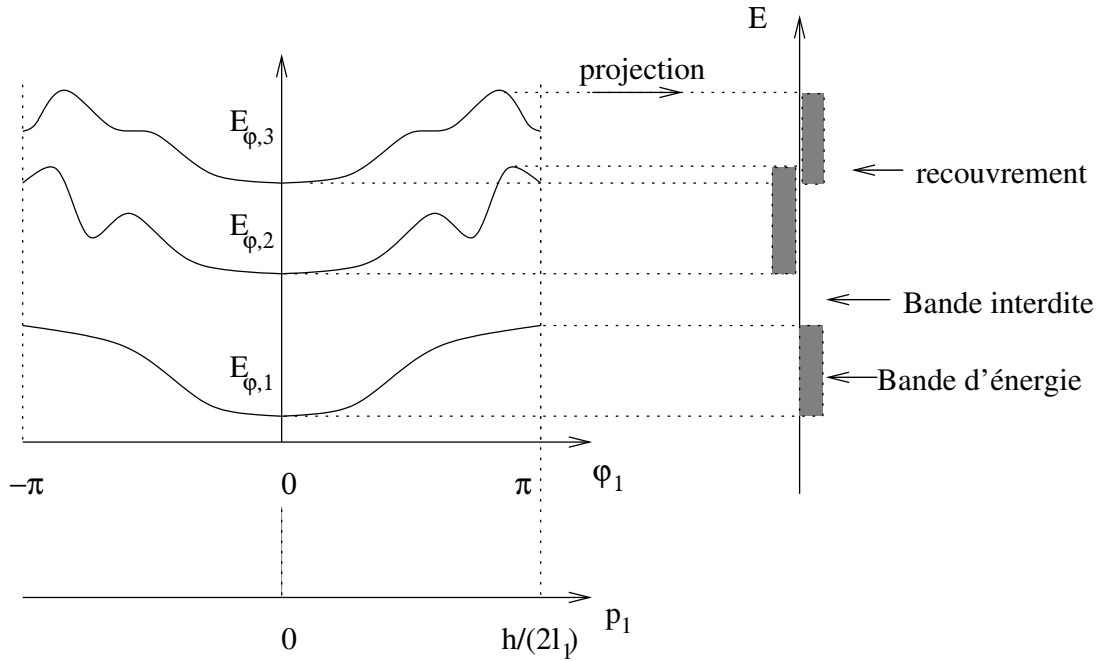


FIGURE 6.2.6 – Allure du spectre d'énergie d'un électron dans un potentiel périodique. On a représenté seulement la dépendance en $\varphi_1 \in [-\pi, \pi]$.

C'est donc la base duale dans l'espace dual. Les angles de Bloch sont les composantes d'un vecteur dual $\vec{k} \in (\mathbb{R}^3)^*$ par rapport à ce réseau réciproque :

$$\vec{k} = \varphi_1 \vec{k}_1 + \varphi_2 \vec{k}_2 + \varphi_3 \vec{k}_3$$

On associe aussi $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. Ainsi :

$$\vec{p} \cdot \vec{l}_j = \hbar \vec{k} \cdot \vec{l}_j = \hbar \varphi_j, \quad j = 1, 2, 3$$

On peut écrire la fonction d'onde sous la forme :

$$\psi(\vec{x}) = e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} u_{\vec{p}}(\vec{x})$$

avec $u_p(\vec{x})$ qui est périodique (périodicité du réseau et sans phase), car :

$$\begin{aligned} u_p(\vec{x} + \vec{l}_1) &= \psi(\vec{x} + \vec{l}_1) e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_1}{\hbar}} = \psi(\vec{x}) e^{i \varphi_1} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_1}{\hbar}} \\ &= u_p(\vec{x}) \end{aligned}$$

ainsi $\psi(\vec{x})$ est comme une onde plane $e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}}$, modulée périodiquement par $u_p(\vec{x})$. Pour ces raisons de forte similarité avec l'impulsion, le paramètre \vec{p} est appelée **la quasi-impulsion**.

6.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

Remarques

- Eq 6.2.3 s'écrit aussi :

$$\hat{T}_k |\psi\rangle = \exp\left(-i \frac{\hat{\vec{p}} \cdot \vec{l}_k}{\hbar}\right) |\psi\rangle = \exp\left(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_k}{\hbar}\right) |\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3$$

montrant aussi l'analogie entre la quasi-impulsion \vec{p} et une impulsion.

- Noter aussi que si le cristal a une symétrie de parité @@, alors $E_{-p,n} = E_{p,n}$, qui se traduit par une symétrie des bandes.
- Près du minimum d'énergie d'une bande, avec un développement limité, on peut approximer $E_n(\vec{p})$ par une parabole, et écrire :

$$E_n(p_1) = E_0 + \frac{p_1^2}{2m^*}$$

la coefficient m^* s'appelle **la masse effective** de l'électron. En effet un paquet d'onde électronique situé près du bas de la bande, aura les mêmes propriétés dynamiques qu'une particule libre de masse m^* .

- Par exemple dans le Germanium, $m^* = 0,6 m_e$.
- En fait, comme \vec{p} a trois composantes, m^* est un tenseur symétrique de rang 3. (voir formule sur le développement limité @@).
- Près du maximum d'énergie d'une bande, on peut aussi approximer $E_n(\vec{p})$ par une parabole, et écrire :

$$E_n(p_1) = E_0 - \frac{p_1^2}{2m_t^*}$$

la coefficient m_t^* s'appelle **la masse effective** des trous. (voir cours de physique du solide).

Résumé Il faut retenir le double aspect d'une onde de Bloch décrivant un électron dans un cristal :

- **nature d'électron libre** car étendu sur tout le cristal, comme une onde plane, et le spectre est continu dans une bande.
- **nature d'électron lié** : car modulation de l'onde autour de chaque atome et caractère discret de l'indice de bande n .

En d'autres termes, le spectre d'énergie en bande a une partie discrète (l'indice n), liée à des écarts d'énergie ΔE grands, car reliés à la dynamique à une petite échelle de temps τ au sein d'une cellule du cristal (relation d'incertitude $\tau \Delta E \simeq \hbar$), et une partie continue (indice φ ou p) lié à la dynamique balistique à plus grande échelle de temps à travers le cristal.

En termes simples, l'aspect discret des différentes bandes est lié au détail du potentiel dans une cellule du cristal, alors que l'aspect continu des bandes est relié à l'invariance par translation des cellules dans le cristal.

Manifestation physique de la structure en bandes Comment expliquer que certains matériaux sont isolants comme le soufre, avec une résistivité énorme :

$$\rho_{\text{soufre}} \simeq 10^{17} \Omega.cm$$

et que d'autres sont conducteurs comme le cuivre :

$$\rho_{\text{cuivre}} \simeq 1,7 \cdot 10^{-6} \Omega.cm$$

et d'où vient une telle différence (23 ordres de grandeurs!) ?

Pour ces matériaux qui sont des cristaux, la structure en bandes d'énergies est essentielle pour expliquer l'existence de matériaux isolants et matériaux conducteurs. Il y a un grand nombre d'électrons dans un cristal, et ils sont soumis au principe d'exclusion de Pauli. Ainsi ces électrons occupent les états de plus basse énergie des bandes, à raison de un électron par état, voir figure 6.2.7.

Lorsque ces électrons remplissent entièrement certaines bandes (dites de valence) et laisse les suivantes complètement vides, cela donne un matériau isolant. En effet les électrons sont figés dans leur état quantique, et ne peuvent changer d'état car les états voisins sont déjà occupés. Il n'ont pas assez d'énergie pour atteindre la bande supérieure qui est vide. Ils peuvent cependant l'atteindre mais avec une probabilité $\simeq \exp(-\Delta E/kT)$ où ΔE est la largeur du gap. Noter que $kT \simeq 1/40 eV$ à température ambiante, et que ΔE peut atteindre plusieurs eV. Cela explique la très faible valeur de la conductivité des isolants.

Au contraire si la dernière bande (dites de conduction) est partiellement remplie, cela donne un matériau conducteur (conducteur du courant et de la chaleur), comme dans le cas du Sodium, figure 6.2.5, car il y a des états quantiques inoccupés près des électrons qui sont au seuil du remplissage. Le moindre champ électrique appliqué permet à ces électrons de changer d'état et de se déplacer, engendrant un courant électrique. (Voir cours de physique du solide).

Le spectre en bande d'un cristal est à l'origine de la technologie des 1/2 semi-conducteurs. (Voir cours de physique du solide).

Exercices :

- déterminer la densité de niveaux dans certains cas @@.
- Problème sur le spectre de Hofstadter, voir examen novembre 2002.
- TD : Modèle de potentiel périodique avec faible couplages @@.

6.3 Groupe non commutatif : les rotations et le moment angulaire

Dans le paragraphe précédent nous avons vu comment utiliser une symétrie associée à un groupe commutatif (le groupe des translations en espace), pour trouver le spectre de \hat{H} .

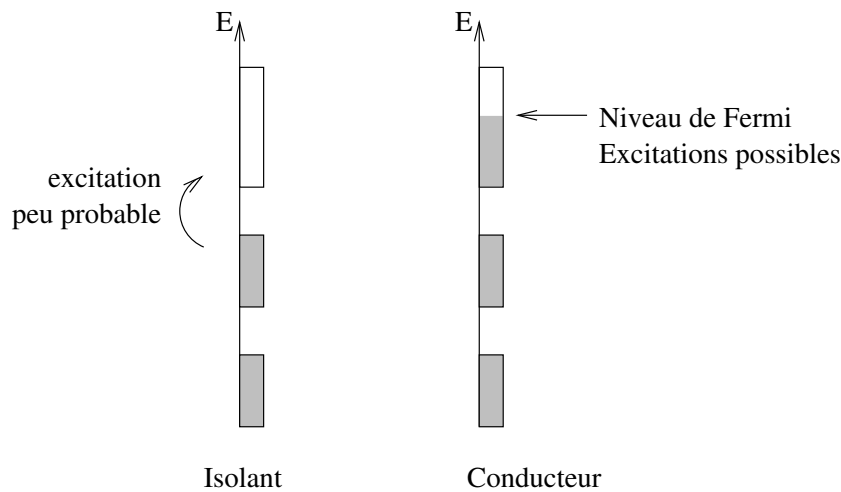


FIGURE 6.2.7 – Schéma du remplissage des bandes, expliquant la différence isolant-conducteurs.

Dans ce paragraphe, on considère des problèmes qui ont une symétrie par rotation, comme c'est le cas pour un électron en orbite autour du proton dans l'atome d'hydrogène.

On va aussi appliquer les propriétés générales énoncées ci-dessus, mais comme nous l'avons vu en page 185, *le groupe des rotations est non commutatif, et cela apporte quelque chose de nouveau.*

Supposons donc que \hat{H} est invariant par rotations, ce qui se traduit par :

$$\left[\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha), \hat{H} \right] = 0, \quad \forall \vec{u}, \alpha \quad (6.3.1)$$

ou

$$\left[\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha), \hat{U}(t) \right] = 0, \quad \forall \vec{u}, \alpha, t$$

où $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ est l'opérateur de rotation d'un angle α , autour de l'axe \vec{u} .

Exemple Un exemple simple et important est le cas d'une particule dans un potentiel central, c'est-à-dire ne dépendant que de la distance r à l'origine, et non de la direction :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r), \quad \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

C'est le cas par exemple pour l'atome d'hydrogène où $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, mais cela peut aussi concerner un électron libre dans une sphère métallique de rayon R , ($V(r) = 0$ à l'intérieur, $r < R$, et $V = \infty$ à l'extérieur, $r > R$).

6.3.1 Générateurs du groupe de rotation dans $\mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$

Réf : Sakurai p196. [J.J85].

Un système quantique général peut être composé de plusieurs particules ayant des degrés de liberté spatiaux et de spin.

Nous avons vu l'expression de l'opérateur rotation $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ dans l'espace quantique du spin \mathcal{H}_{spin} . Ses générateurs ont été défini en eq.(187).

Intéressons nous maintenant à la partie spatiale, par exemple à une particule sans spin. Son état quantique est donc spécifié par sa fonction d'onde $\psi \in \mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$. On va chercher l'expression des opérateurs rotation et de ses générateurs.

La rotation d'un angle α autour de l'axe z de la fonction d'onde ψ s'exprime en coordonnées sphériques (r, θ, φ) par :

$$\psi'(r, \theta, \varphi) = \left(\hat{R}_z(\alpha) \psi \right) (r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha) \quad (6.3.2)$$

voir figure 6.3.1.

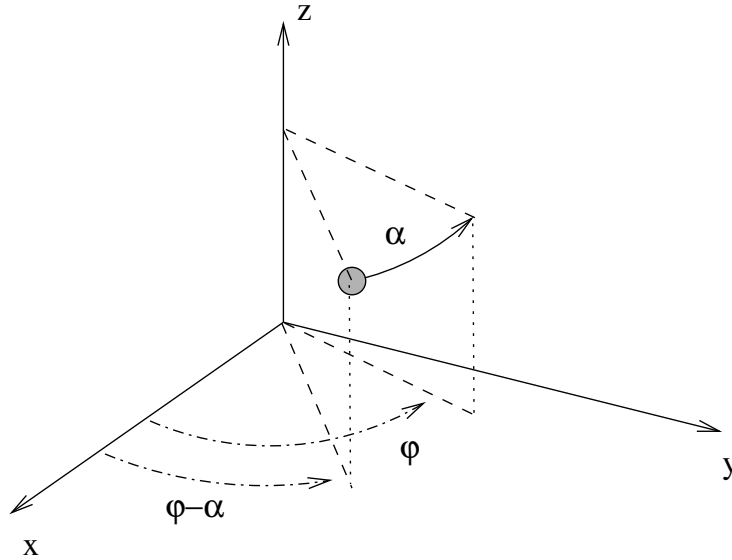


FIGURE 6.3.1 – Rotation d'un angle α autour de z , montrant que $\psi'(r, \theta, \varphi) = \left(\hat{R}_z(\alpha) \psi \right) (r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha)$.

Or par définition du générateur \hat{L}_z on doit avoir :

$$\hat{R}_z(\alpha) = \exp \left(-i \frac{\hat{L}_z}{\hbar} \alpha \right)$$

on peut trouver alors \hat{L}_z en dérivant (6.3.2) par rapport à α (et posant $\alpha = 0$) :

$$\left(-i \frac{\hat{L}_z}{\hbar} \psi \right) = -\frac{\partial \psi}{\partial \varphi}$$

donnant :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Remarquer que ce résultat est analogue à $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ obtenu figure 2.1.1, générateur des translations.

6.3.1.1 Écriture vectorielle indépendante des coordonnées

Propriété

les générateurs des rotations dans $\mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$, noté $\hat{\vec{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ est donné par :

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}} = \begin{cases} L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \\ L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases}$$

L'opérateur de rotation d'une fonction d'onde d'un angle α autour de l'axe \vec{u} , $\|\vec{u}\| = 1$, est donné par

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(-i\frac{\hat{\vec{L}} \cdot \vec{u}}{\hbar}\alpha\right)$$

Démonstration. On écrit d'après les lois de changement de variable dans les dérivées partielles

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

or $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$, donc $\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -r \sin \theta \sin \varphi = -y$, etc, donnant

$$L_z = -i\hbar \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

etc.

Preuve graphique : on vérifie dans le cas particulier $\hat{L}_z = \left(\hat{\vec{L}} \right)_z = \left(\hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}} \right)_z = \rho \cdot \hat{p}_\varphi$, voir figure 6.3.2, avec $\rho = r \sin \theta$, et $\hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{du}$, et $du = \rho d\varphi$, donnant bien $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$. La relation valable pour l'axe z est en fait valable pour toute direction, car il n'y a pas de direction privilégiée. \square

Remarques :

- L'expression du générateurs des rotations $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ est identique en mécanique classique. (Le vérifier dans le cas de L_z avec les équations de Hamilton).

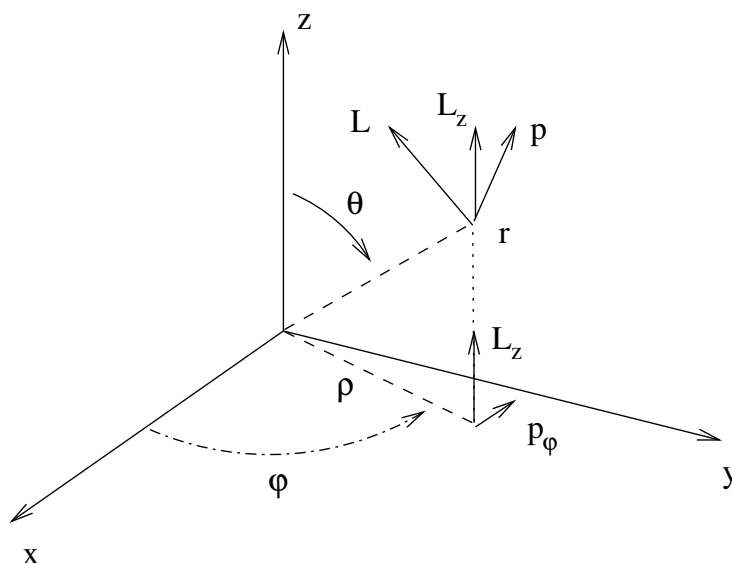


FIGURE 6.3.2 –

- Pour une expression en coordonnées sphériques, voir Cohen [CBF] p.667. Cette expression montre comme attendu que la variable r n'intervient pas.
- Une rotation de 2π d'une fonction d'onde la laisse inchangée, donc, (contrairement aux rotations du spin $1/2$ dans l'espace \mathcal{H}_{spin}), on a pour les rotations dans l'espace \mathbb{R}^3 :

$$\hat{R}_{\vec{u}}(2\pi) = Id \quad (6.3.3)$$

Ici pour la rotation de la fonction d'onde spatiale, une rotation dans l'espace (x, y, z) est caractérisée par une matrice 3×3 , Orthogonale, de déterminant 1, car conserve l'orientation (dite Spéciale), il s'agit donc du groupe de matrices **noté $SO(3)$** , voir Sakurai p169.

Rappel : Le groupe de rotation du spin est identifié au groupe **$SU(2)$** , voir page 189, et vérifiait. $\hat{R}_{\vec{u}}(2\pi) = -Id$.

6.3.1.2 Relations de commutations

On a

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (6.3.4)$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Ce sont les "relations de commutation de l'algèbre de Lie du groupe de rotation $SO(3)$ ".

preuve (TD) : ces relations ont déjà été calculées pour le groupe de rotation du spin, voir eq.4.5.1. Elle traduisent la non commutativité du groupe de rotation. Mais on peut les calculer à nouveau directement ici :

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= yp_x [p_z, z] + p_y x [z, p_z] \\ &= i\hbar (xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

car $[z, p_z] = i\hbar$.

6.3.2 Moment angulaire total et conservation

Considérons un système quelconque constitué de plusieurs particules ayant chacune un spin 1/2 ou non.

En général, il peut y avoir des interactions entre ces particules et des interactions entre le mouvement des particules et leur spin (en effet une particule chargée en mouvement crée un champ \vec{B} qui agit sur le moment magnétique de spin), et aussi des interactions entre les spins, pour la même raison.

Cependant on suppose que le **système total est isolé**, et par conséquent qu'il est **invariant par une rotation globale du système**.

Voir figure 6.3.3. Dans cet exemple, l'espace de Hilbert total est (en supposant les particules discernables)

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace1} \otimes \mathcal{H}_{spin1} \otimes \mathcal{H}_{espace2} \otimes \mathcal{H}_{spin2}$$

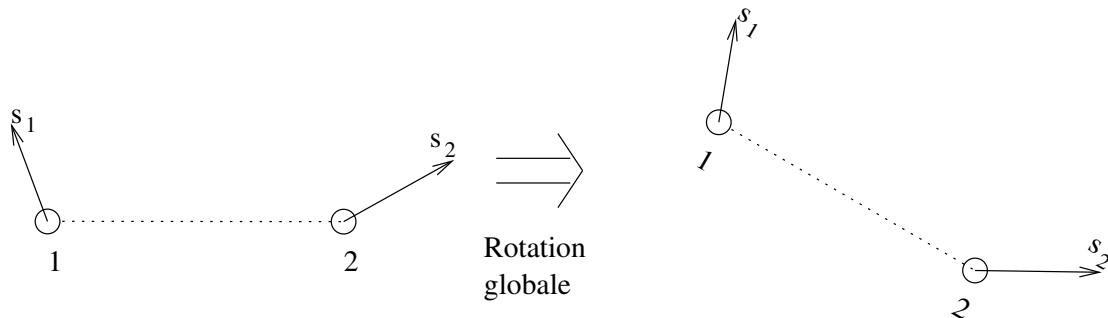


FIGURE 6.3.3 – Une rotation globale s’applique sur la position et aussi le spin de chaque particule.

6.3.2.1 Exemples de termes d’interaction invariants par une rotation globale

Entre le mouvement d’une particule et un spin il peut y avoir le couplage dit “**spin-orbite**” :

$$\hat{H}_{spin-orbite} = A \vec{S}_1 \cdot \vec{L}_1$$

où A est une constante avec la bonne dimension.

Entre deux spins, il peut y avoir un couplage de type “**spin-spin**” :

$$\hat{H}_{spin-spin} = B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

6.3.2.2 Moment angulaire total

L’opérateur de rotation du système total d’un angle α autour de l’axe \vec{u} est :

$$\begin{aligned} \hat{R}_{tot,\vec{u}}(\alpha) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_1 \cdot \vec{u} \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{S}_1 \cdot \vec{u} \alpha\right) \\ &\quad \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_2 \cdot \vec{u} \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{S}_2 \cdot \vec{u} \alpha\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_{tot} \cdot \vec{u} \alpha\right) \end{aligned}$$

avec

$$\boxed{\hat{\vec{L}}_{tot} = \vec{L}_1 + \vec{S}_1 + \vec{L}_2 + \vec{S}_2 \quad : \text{moment angulaire total}} \quad (6.3.5)$$

Montrant que le **moment angulaire total (la somme des générateurs) est le générateur des rotation globales du système.**

L’invariance par rotation globale du système, s’écrit :

$$\left[\hat{H}, \hat{\vec{L}}_{tot} \right] = 0$$

ou de façon équivalente :

$$\left[\hat{U}(t), \hat{\vec{L}}_{tot} \right] = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{R}_{tot,\vec{u}}(\alpha) \right] = 0, \quad \left[\hat{U}(t), \hat{R}_{tot,\vec{u}}(\alpha) \right] = 0,$$

pour tous t, \vec{u}, α .

La loi de conservation qui en découle est la conservation du moment angulaire total :

$$\left\langle \hat{\vec{L}}_{tot} \right\rangle (t) = \text{constante}/t$$

(et plus généralement la conservation de la distribution de L_{tot} d’après page 234).

De façon équivalente, on a la relation

$$\forall \vec{u}, \alpha, \quad \left[\hat{H}, \hat{R}_{tot,\vec{u}}(\alpha) \right] = 0, \quad \hat{R}_{tot,\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{u} \cdot \hat{\vec{L}}_{tot}\right)$$

qui s’interprète en disant que les **espaces propres de \hat{H} sont invariants par les rotations globales.**

Remarquer finalement que les opérateurs $\left(\hat{L}_{tot,x}, \hat{L}_{tot,y}, \hat{L}_{tot,z} \right)$ vérifient les relations de l’algèbre de rotation (6.3.4).

6.3.3 Espace de représentation réductible et irréductible d'un groupe

En termes mathématiques, un espace vectoriel invariant par les transformations d'un groupe d'opérateurs, est appelé **espace de représentation du groupe**.

Par exemple, ci-dessus, l'espace total \mathcal{H}_{tot} est un espace de représentation du groupe de rotation. Si \hat{H} possède une symétrie de rotation alors d'après eq.(6.1.2), page 235, les espaces propres de \hat{H} sont aussi des espaces de représentation du groupe.

Définition *Un espace vectoriel \mathcal{H} qui est espace de représentation d'un groupe est dit **réductible** si il se décompose :*

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$$

où \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 sont des espaces aussi invariants par le groupe.

*Si non, on dit que \mathcal{H} est un espace de représentation **irréductible** du groupe.*

Pour illustrer simplement cette notion, considérons le groupe de rotation autour de l'axe z , qui agit dans l'espace (de représentation) \mathbb{R}^3 . On observe que le plan (x, y) est invariant et de même pour l'axe z seul. Ainsi pour ce groupe de rotation, l'espace \mathbb{R}^3 est réductible :

$$\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}_{\text{plan } x,y}^2 \oplus \mathbb{R}_{\text{axe } z}$$

Mais le plan (x, y) et l'axe z sont eux irréductibles. Voir figure 6.3.4.

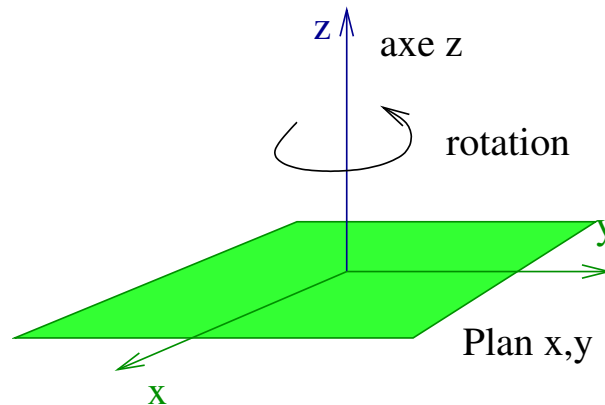


FIGURE 6.3.4 –

Nous allons voir dans la suite, page 268, que cette notion d'espace irréductible est très importante : nous allons montrer que les espaces propres d'énergie d'un Hamiltonien invariant par rotation sont des espaces de représentation irréductible dans le cas général.

Mais avant cela, nous allons caractériser précisément ces espaces de représentation irréductibles.

6.3.4 Espace de représentation irréductible d'un groupe commutatif

Propriété : Pour un groupe **commutatif** unitaire sur un espace de Hilbert complexe, les espaces de représentations irréductibles sont de dimension 1.

Démonstration. Si les opérateurs de groupes $\hat{G}_1, \hat{G}_2 \dots$ (ou générateurs d'un groupe commutatif) vérifient $[\hat{G}_i, \hat{G}_j] = 0$, alors les vecteurs propres communs (qui existent et forment une base d'après page 231) sont une décomposition de l'espace total en espaces de dimension 1. Chacun de ces vecteurs propres engendre un espace qui est invariant et de dimension 1 donc irréductible. □

Remarques Sur un espace vectoriel réel, ce n'est pas vrai car un opérateur même symétrique, n'est pas toujours diagonalisable. Il peut y avoir des espaces irréductibles de dimension 2 comme sur la figure 6.3.4.

6.3.5 Espaces de représentation irréductibles des groupes de rotation SU(2) et SO(3)

Ref : Sakurai [J.J85] p. 188, Cohen [CBF] p. 653.

Nous allons voir maintenant que l'aspect non commutatif du groupe de rotation étudié page 185, joue donc un rôle important, car il "permet" aux espaces irréductibles notés \mathcal{D}_j d'avoir une dimension supérieure à 1.

(Ce paragraphe est un peu technique. Mais on aura besoin de ses résultats dans la suite.)

On s'intéresse ici à des opérateurs unitaires de rotations qui agissent dans un espace de Hilbert donné \mathcal{H} . On s'intéresse d'abord aux générateurs des rotations unitaires agissant dans cet espace.

Propriété Soient des opérateurs autoadjoints $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ dans un espace de Hilbert \mathcal{H} , vérifiant l'algèbre de Lie du groupe de rotation :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \text{etc...}$$

alors $\hat{J}^2 := \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ commute avec tous les éléments de l'algèbre de Lie :

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

Le spectre commun des opérateurs \hat{J}_z et \hat{J}^2 est de la forme

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \quad (6.3.6)$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad (6.3.7)$$

ou j est entier ou demi-entier ($j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$) et

$$m = -j, -j+1, \dots, +j \quad : \text{ prend } (2j+1) \text{ valeurs}$$

On définit les opérateurs d'échelle

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

(noter que $(\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$), vérifiant :

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z \quad (6.3.8)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$$

et :

$$\hat{J}_+|j, m\rangle = [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} \hbar|j, m+1\rangle$$

$$\hat{J}_-|j, m\rangle = [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \hbar|j, m-1\rangle$$

Voir figure 6.3.5.

A j fixé, les vecteurs $|j, m\rangle, m = -j, -j+1, \dots, +j$ forment donc une base orthonormée d'un espace noté \mathcal{D}_j , de dimension $(2j+1)$. L'espace \mathcal{D}_j est un **espace de représentation irréductible** du groupe de rotation.

Tout espace de représentation du groupe des rotations peut se décomposer comme la somme d'espaces irréductibles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{D}_{j_1} \oplus \mathcal{D}_{j_2} \oplus \dots$$

(avec des indices qui peuvent se répéter).

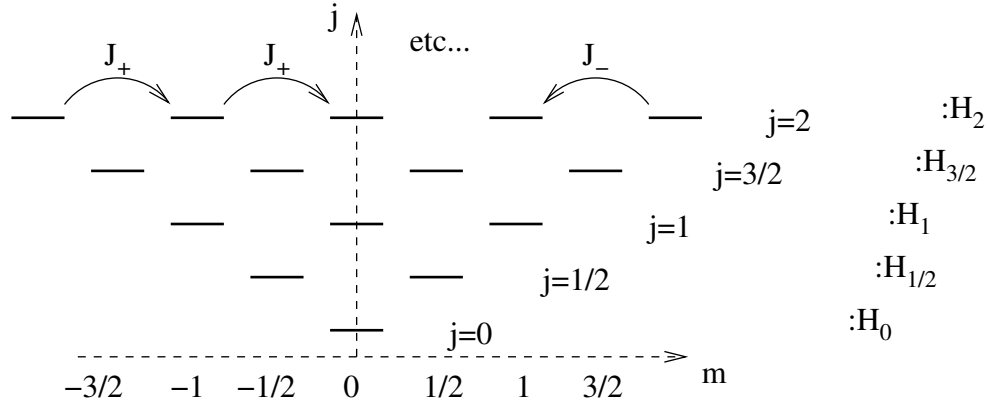


FIGURE 6.3.5 – Schéma des vecteurs propres communs de \hat{J}_z et \hat{J}^2 , notés $|j, m\rangle$, et action des opérateurs d'échelle \hat{J}_\pm . Les vecteurs $|j, m\rangle$ de la ligne j , avec $m = -j \rightarrow +j$, forment une base de l'espace \mathcal{H}_j .

Démonstration. (*) Noter que la situation est très similaire au spectre de l'oscillateur Harmonique, avec les opérateur a, a^+, \hat{N} , voir page 106. En général pour 3 opérateurs A, B, C on a

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC - CAB = A([B, C] + CB) - CAB \\ &= A[B, C] + [A, C]B \end{aligned}$$

En particulier pour 2 opérateurs, $[A^2, B] = A[A, B] + [A, B]A$ donc

$$[J^2, J_z] = [J_x^2, J_z] + [J_y^2, J_z] = i\hbar(-J_x J_y - J_y J_x + J_y J_x + J_x J_y) = 0$$

. De même on peut montrer que $[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = 0$. Comme \hat{J}^2 et J_z commutent, ils possèdent une base de vecteurs propres communs. Notons $|a, m\rangle$ un vecteur propre commun des opérateurs \hat{J}^2 et \hat{J}_z :

$$\begin{aligned} \hat{J}^2|a, m\rangle &= \hbar^2 a|a, m\rangle, & a \in \mathbb{R} \\ \hat{J}_z|a, m\rangle &= \hbar m|a, m\rangle, & m \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Noter que

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= \left[(\hat{J}_x + i\hat{J}_y), (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \right] \\ &= -i [\hat{J}_x, \hat{J}_y] + i [\hat{J}_y, \hat{J}_x] = 2\hbar\hat{J}_z \end{aligned}$$

et

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_y \pm i(-i\hbar\hat{J}_x) = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

et

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$$

Remarque : Les trois générateurs $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ forment une base de l'algèbre de Lie (espace vectoriel de dimension trois), dite algèbre de Lie $so(3)$ ou $su(2)$. Les trois générateurs $\hat{J}_z, \hat{J}_+, \hat{J}_-$ forment une

autre base de cette même algèbre, qui est plus intéressante, pour les relations de commutations (Cette base s'appelle la **décomposition de Cartan** de l'algèbre $\mathfrak{su}(2)$ complexifiée. Voir page 103).

On a :

$$\begin{aligned}\hat{J}_z (\hat{J}_\pm |a, m\rangle) &= (\pm \hbar \hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm \hat{J}_z) |a, m\rangle \\ &= \hbar (\pm 1 + m) (\hat{J}_\pm |a, m\rangle)\end{aligned}$$

et

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_\pm |a, m\rangle) = \hat{J}_\pm \hat{J}^2 |a, m\rangle = \hbar^2 a (\hat{J}_\pm |a, m\rangle)$$

donc on pose :

$$|a, m' = m \pm 1\rangle = \frac{1}{c_\pm} (\hat{J}_\pm |a, m\rangle)$$

où c_\pm est une constante réelle positive, de normalisation, à déterminer.

Ainsi à partir du vecteur $|a, m\rangle$, on construit un vecteur $|a, m \pm 1\rangle$, etc.... Cette construction s'arrête lorsque le vecteur $(\hat{J}_\pm |a, m\rangle)$ est nul.

On a

$$\begin{aligned}a - m^2 &= \langle a, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 |j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle a, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ |a, m\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\|\hat{J}_- |a, m\rangle\|^2 + \|\hat{J}_+ |a, m\rangle\|^2 \right) \geq 0\end{aligned}$$

(on a utilisé $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_z^2$)

donc

$$a \geq m^2$$

donc la construction ci-dessus s'arrête forcément à disons $m_{min} \leq m \leq m_{max}$, c'est à dire :

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ |a, m_{max}\rangle &= 0, \\ \hat{J}_- |a, m_{min}\rangle &= 0.\end{aligned}$$

et m_{max} et m_{min} sont séparés par un entier :

$$m_{max} = m_{min} + n, \quad n \in \mathbb{N}$$

On a

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) \\ &= \hat{J}_z^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z \\ &= \hat{J}_z^2 + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_z\end{aligned}$$

Cette relation appliquée à $|a, m_{max}\rangle$ et $|a, m_{min}\rangle$ donne

$$\begin{aligned}a &= m_{max}^2 + m_{max} \\ a &= m_{min}^2 + m_{min}\end{aligned}$$

donnant :

$$\begin{aligned} (m_{min} + n)^2 + (m_{min} + n) &= m_{min}^2 + m_{min} \\ \Leftrightarrow n^2 + 2n m_{min} + m_{min} + n + m_{min} &= 0 \\ \Leftrightarrow n(n + 1) + 2m_{min}(n + 1) &= 0 \\ \Leftrightarrow m_{min} &= -\frac{n}{2} \end{aligned}$$

Donc $m_{max} = m_{min} + n = \frac{n}{2}$, et on pose

$$j = m_{max} = \frac{n}{2} : \text{ entier ou demi - entier}$$

alors

$$a = j(j + 1)$$

et

$$m = -j, \dots, +j : (2j + 1) \text{ valeurs}$$

Normalisation, choix de c_{\pm} :

si $|j, m\rangle$ est normalisé, on a

$$\begin{aligned} |c_{+,jm}|^2 \| |j, m + 1\rangle \|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 (j(j + 1) - m(m + 1)) \end{aligned}$$

et de même pour c_- .

D'après ci-dessus, chaque espace \mathcal{D}_j est de dimension $(2j + 1)$, et les opérateurs \hat{J}_{\pm}, \hat{J}_z agissent à l'intérieur de chaque espace \mathcal{D}_j . Il en est de même par conséquent, pour les opérateurs $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ qui s'obtiennent par combinaisons linéaires, et pour les opérateurs de rotation $\hat{R}_x(\alpha) = \exp(-i\hat{J}_x\alpha/\hbar)$, \hat{R}_y, \hat{R}_z . Donc chaque espace \mathcal{D}_j est invariant par le groupe de rotation : c'est un espace de représentation du groupe de rotation. Chaque espace \mathcal{D}_j ne peut se décomposer en somme de deux espaces invariants par le groupe de rotation (i.e. $\mathcal{D}_j \neq \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, avec \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 invariants). On le devine en effet, car à partir de tout vecteur $|j, m\rangle$, on peut obtenir $|j, m'\rangle$ par actions répétées de \hat{J}_{\pm} . Donc \mathcal{D}_j est un espace de représentation irréductible du groupe de rotation. □

Représentations irréductibles des groupes de rotation $\text{SO}(3)$ (Rotation de l'espace) et $\text{SU}(2)$ (Rotation du spin).

On a d'après (6.3.6)

$$\begin{aligned} \hat{R}_z(2\pi) |j, m\rangle &= \exp\left(-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}2\pi\right) |j, m\rangle = \exp(-im2\pi) |j, m\rangle \\ &= \begin{cases} |j, m\rangle & \text{si } m \text{ entier} \\ -|j, m\rangle & \text{si } m \text{ demi - entier} \end{cases} \end{aligned}$$

par conséquent :

- Si \mathcal{D}_j est une représentation **du groupe de rotation $SO(3)$** , il faut que $\hat{R}(2\pi) = \hat{I}$, (voir 6.3.3), et donc il faut que j (et donc m) soit entier. Dans ce cas, on note :

$$l = j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Les espaces de représentations irréductibles du groupe $SO(3)$ sont donc seulement les espaces \mathcal{D}_l caractérisées par l'entier l . Remarquer que \mathcal{D}_l est de dimension impaire $(2l + 1)$.

- Si \mathcal{D}_j est une représentation **du groupe de rotation du spin 1/2 (groupe $SU(2)$)**, il faut que $\hat{R}(4\pi) = Id$, et donc toutes les valeurs de j sont permises :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

Les espaces de représentations irréductibles du groupe $SU(2)$ sont tous les espaces \mathcal{D}_j , caractérisées par l'entier ou demi-entier j .

Remarques

- De la relation $[\vec{J}^2, \vec{J}] = 0$, on déduit que $[\vec{J}^2, \hat{R}] = 0$ pour tout opérateur de rotation $\hat{R}_{\vec{u}, \theta} = \exp(-i\vec{J} \cdot \vec{u}\theta/\hbar)$. On dit alors que \vec{J}^2 est **un opérateur de Casimir** du groupe de rotation. Il en résulte que un espace de représentation irréductible \mathcal{D}_j est un espace propre de \vec{J}^2 (voir page 231), et comme le montre la relation (6.3.6) : la valeur propre associée est $\hbar^2 j(j + 1)$. Les espaces irréductibles \mathcal{D}_j sont donc caractérisés (et classifiés) par la valeur propre $\hbar^2 j(j + 1)$ de \vec{J}^2 (directement relié à l'indice j). C'est le grand intérêt des opérateurs de Casimir. Cela se généralise pour d'autres groupes. Voir par exemple page 286, pour le groupe de Poincaré en relativité.
- Les vecteurs $|j, m\rangle$, $m = -j, \dots, +j$ forment une base de l'espace \mathcal{D}_j . Ces vecteurs sont vecteurs propres de \hat{J}_z , et le choix de cette base dépend donc du choix de l'axe z .

Exemples déjà rencontrés d'espaces irréductibles \mathcal{D}_j

1. **Pour décrire le spin 1/2**, l'espace $\mathcal{H}_{spin} \equiv \mathbb{C}^2$ de dimension 2 et les opérateurs \hat{S} introduit à la section 4.3, s'identifie avec l'espace $\mathcal{D}_{1/2}$ pour $j = 1/2$, et aux opérateurs \hat{J} introduits ici.
2. **L'espace ordinaire \mathbb{R}^3** est naturellement un espace de représentation irréductible du groupe de rotation $SO(3)$. On devine alors que \mathbb{R}^3 **s'identifie à l'espace $\mathcal{D}_{l=1}$** . Il reste à identifier les 3 vecteurs de base $|l = 1, m = -1, 0, +1\rangle$, dans ce cas, à partir des 3 vecteurs de base de \mathbb{R}^3 , notés ici $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$.
 - (a) Première étape : on se permet de considérer des vecteurs à composantes complexes, comme $|V\rangle = \alpha|x\rangle + \beta|y\rangle + \gamma|z\rangle$, $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$. On considère donc \mathbb{C}^3 (l'espace complexifié de \mathbb{R}^3).

(b) 1ere solution : l'expression de la matrice de rotation $R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{-\frac{i\theta}{\hbar}L_z}$ donne

$$L_z = i\hbar \left(\frac{dR_z(\theta)}{d\theta} \right)_{\theta=0} = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Les 3 valeurs propres de cette matrice sont $m\hbar$ avec $m = -1, 0, +1$ et les vecteurs propres associés sont $|l=1, m=1\rangle = |x\rangle + i|y\rangle$, $|l=1, m=0\rangle = |z\rangle$, $|l=1, m=-1\rangle = |x\rangle - i|y\rangle$.

(c) Remarque : d'après l'étude des harmoniques sphériques, faite plus loin, voir tableau page 264, on retrouve ce résultat (d'après $x = \sin \theta \cos \varphi, y = \sin \theta \sin \varphi, z = \cos \theta$)

$$|l=1, m=1\rangle = Y_{1,1} \propto \sin \theta e^{i\varphi} \propto |x\rangle + i|y\rangle \quad (6.3.9)$$

$$|l=1, m=0\rangle = Y_{1,0} \propto \cos \theta \propto |z\rangle$$

$$|l=1, m=-1\rangle = Y_{1,-1} \propto \sin \theta e^{-i\varphi} \propto |x\rangle - i|y\rangle$$

6.3.6 Application : calcul du spectre du rotateur rigide

Nous avons dit plus tôt que grâce aux symétries d'un problème, ici l'invariance par rotation, il était plus aisé de calculer le spectre d'énergie.

Prenons dans ce paragraphe, l'exemple d'un *molécule diatomique rigide, ou rotateur rigide*. (On ignore ici les mouvement de vibrations de la molécule car on considère qu'ils sont trop rigides). Seul le mouvement de rotation de la molécule est considéré.

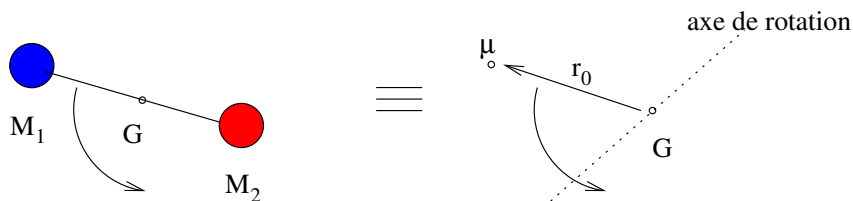


FIGURE 6.3.6 – Schéma d'une molécule diatomique rigide, et de l'équivalence par une masse réduite $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$. Le mouvement de la particule réduite est sur une sphère de rayon $r_0 = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

(ref Bransden p272 [BC89], Cohen p720 [CBF]).

6.3.6.1 L'espace de Hilbert des états quantiques

Le mouvement de la particule réduite est sur la sphère S^2 , voir figure (6.3.6), et l'espace quantique de Hilbert est donc

$$\mathcal{H} = L^2(S^2)$$

constitué par les fonctions d'onde $\psi(\theta, \varphi)$ dépendant d'un point (θ, φ) sur la sphère. La sphère est en effet **l'espace de configuration**.

On note par :

$$|\theta, \varphi\rangle$$

la "fonction d'onde" de position (distribution de Dirac) localisée au point (θ, φ) . Autrement dit pour $\psi \in \mathcal{H}$,

$$\psi(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \psi \rangle.$$

La relation de fermeture en position (sur la sphère) s'écrit alors :

$$\hat{I} = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\varphi |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| = \iint |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| d\Omega \quad (6.3.10)$$

avec $d\Omega = d\theta \sin(\theta) d\varphi$ qui est l'élément d'angle solide sur la sphère S^2 .

6.3.6.2 L'opérateur Hamiltonien

En mécanique classique, l'énergie (cinétique) de la molécule est

$$H = \frac{1}{2}\mu v^2 = \frac{1}{2}\mu r_0^2 \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

avec le moment d'inertie $I = \mu r_0^2$, et le moment angulaire $L = r_0 p = r_0 \mu v_0 = r_0 \mu r_0 \omega = I\omega$.

En mécanique quantique nous considérons donc l'opérateur Hamiltonien suivant agissant dans l'espace $\mathcal{H} = L^2(S^2)$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

où

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Nous cherchons le spectre d'énergie discret de \hat{H} .

6.3.6.3 Spectre de \hat{H}

(cf Cohen p725 [CBF]).

On utilisera le résultat mathématiques suivant.

Théorème 6.3.1. Dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(S^2)$, chaque espace de représentation irréductible \mathcal{D}_l , $l = 0, 1, 2, \dots$ apparaît une fois et une seule :

$$\mathcal{H} = L^2(S^2) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{D}_l$$

Démonstration. Voir [Fau10b] (ou [Seg95] qui montre que cela découle du théorème de Peter-Weyl du groupe $SO(3)$).

On notera $|l, m\rangle$, $m = -l, \dots, +l$ les vecteurs de base de \mathcal{D}_l . On a $[\hat{H}, \hat{L}_x] = 0$, $[\hat{H}, \hat{L}_y] = 0$, $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$, mais $[L_x, L_y] = i\hbar L_z \neq 0$, donc on ne peut pas chercher les vecteurs propres communs de L_x et L_y . Par contre $[L^2, L_z] = 0$ donc $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ sont trois opérateurs qui commutent entre eux. On peut donc appliquer la propriété page 231, et s'intéresser aux vecteurs propres communs de \hat{L}^2 et L_z . \square

Il s'agit ici du groupe $SO(3)$, et ces vecteurs propres communs, sont justement donnés par la propriété page 255, avec $l = j$ entier. Ces vecteurs sont notés :

$$|l, m\rangle, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, +l$$

et appelés **Harmoniques sphériques**. On obtient ainsi le spectre du rotateur rigide (utilisant $L^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$) :

$$\hat{H}|l, m\rangle = E_l|l, m\rangle, \quad E_l = \frac{1}{2I} \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, +l \quad (6.3.11)$$

(remarque : le théorème 6.3.1 nous garanti qu'il n'y a pas d'autres niveaux).

L'écart entre les premiers niveaux est donc de l'ordre

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2I} = 1,3 \cdot 10^{-3} eV$$

La valeur numérique est donnée ici pour la molécule HCl, montrant que les écarts correspondent à des transitions dans l'infra-rouge. Voir figure 6.3.7.

Remarques

- Comme attendu dans le cas général, (figure 6.1.1), chaque espace propre d'énergie E , est un espace invariant par le groupe de rotation, ici \mathcal{D}_l .
- Le fait que le groupe de rotation soit non commutatif permet que les espaces de représentations irréductibles soient de dimension supérieure à 1, et donc que les espaces propres soient de dimension supérieure à 1.

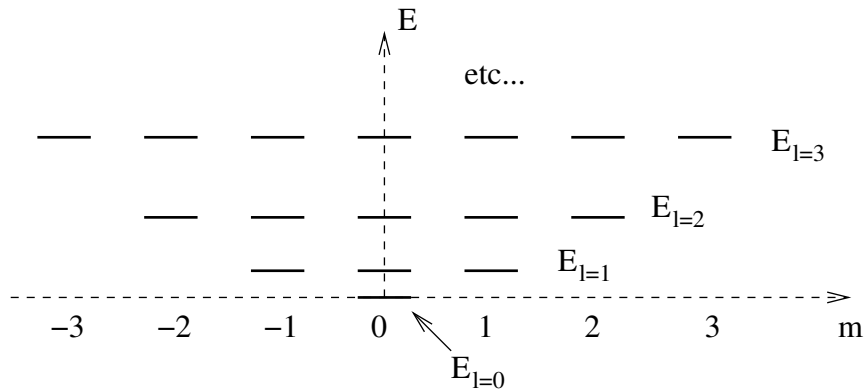


FIGURE 6.3.7 – Spectre $E_l = \frac{1}{2I} \hbar^2 l(l+1)$ du rotateur rigide.

Ainsi la dégénérescence du spectre du rotateur rigide est d'une part due à *la symétrie par rotation*, et d'autre part due à *la non commutativité des rotations*. (On verra la propriété générale ci-dessous, page 266).

- Voir les conséquences expérimentales observables du spectre du rotateur rigide, cf Cohen p728 [CBF]. (TD ?)

6.3.6.4 Les Harmoniques sphériques

cf Cohen p668 [CBF]. @@ Ré-écrire ce paragraphe, voir Stenberg p.185 [Ste94] @@.

Il nous reste à déterminer la fonction d'onde de chaque état stationnaire harmonique sphérique $|l, m\rangle$.

La fonction d'onde de l'harmonique sphérique $|l, m\rangle$ est notée :

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

Leurs propriétés découlent directement de l'étude générale des vecteurs $|j, m\rangle$, faite page 255 :

Propriétés

- La relation de fermeture (6.3.10), donne la relation de normalisation :

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\varphi |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

- On a (Bransden p265)

$$Y_{l,m=l}(\theta, \varphi) = (-1)^l \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} \right]^{1/2} \sin^l(\theta) e^{il\varphi}$$

en effet, on vérifie : $\hat{L}_z Y_{l,l} = \hbar l Y_{l,l}$ et $\hat{L}_+ Y_{l,l} = 0$.

- L'expression analytique des autres fonctions $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ s'obtient par application de l'opérateur \hat{L}_- sur $Y_{l,l}$. Voir tableau, et figure 6.3.8.

l	m	Harmonique sphérique $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$
0	0	$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
1	0	$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$
	± 1	$Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$Y_{2,\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
	± 2	$Y_{2,\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Les fonctions $Y_{l,m}(\theta, \varphi), l = 0, 1, \dots, m = -l, -l + 1, \dots, +l$ forment bien une base de l'espace de Hilbert $L^2(S^2)$.

6.3.6.5 Parité des harmoniques sphériques

remarquons ici une symétrie que possède les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ par rapport à la transformation par **parité** ou par **inversion** :

$$\mathcal{P} : \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2 \mapsto (-\vec{x}) \quad : \text{parité (ou inversion)}$$

correspondant au groupe $\mathbb{Z}_2 = \{I, -I\}$.

En coordonnées sphériques, si $\vec{x} \equiv (r, \theta, \varphi)$, alors $\mathcal{P}(\vec{x}) = (-\vec{x}) \equiv (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$. On a donc

$$\left(\hat{\mathcal{P}}Y_{lm}\right)(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\mathcal{P}(\theta, \varphi)) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.3.12)$$

(pour la dernière égalité, voir [BC89] p.265, par exemple. @@ faire ici @@).

Donc Y_{lm} est de parité $(-1)^l$ (paire ssi l est paire) .

6.4 Importance des représentations irréductibles en physique

Il ressort des études précédentes, une propriété générale très utile dans l'étude des spectres d'énergie des systèmes quantiques :

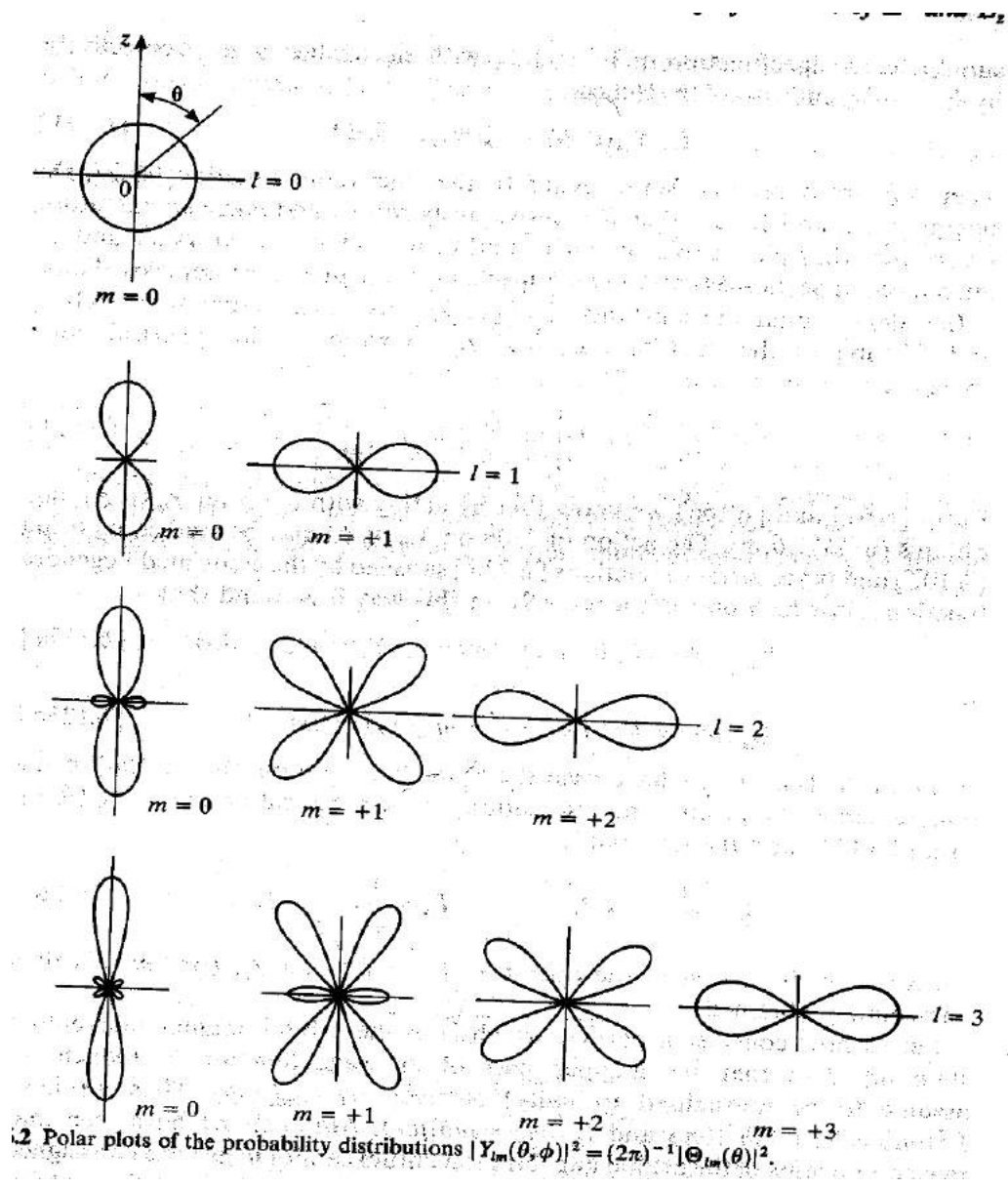


FIGURE 6.3.8 – Dessin en polaire des distributions de probabilités $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$.

6.4.1 Propriétés fondamentales : le Lemme de Schur et le théorème de Wigner

Le lemme de Schur a plusieurs versions. Nous donnons ici la version la plus utile en mécanique quantique. D'autres versions sont données dans la preuve. Nous verrons ensuite des applications directes en mécanique quantique.

Lemme 6.4.1. “Le Lemme de Schur”. Soit $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un opérateur qui agit sur un espace de Hilbert. On suppose que cet espace est somme d'espaces irréductibles d'un groupe G , prenons pour simplifier l'exemple de 2 espaces irréductibles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k \quad (6.4.1)$$

que ces représentations sont non équivalentes $\mathcal{D}_j \not\cong \mathcal{D}_k$ (cad $j \neq k$) et que pour toute transformation $\hat{G} \in G$ du groupe :

$$[\hat{A}, \hat{G}] = 0$$

(cad que G est un groupe de symétrie de \hat{A}). Alors l'opérateur \hat{A} s'écrit, par rapport à la décomposition (6.4.1) :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_j \hat{I} & 0 \\ 0 & a_k \hat{I} \end{pmatrix}, \quad a_j, a_k \in \mathbb{C}$$

(et plus généralement si \mathcal{H} est somme de plusieurs espaces irréductibles non équivalents).

Remarque : autrement dit, si l'opérateur \hat{A} possède la symétrie du groupe G alors l'opérateur \hat{A} est caractérisé par seulement des facteurs λ, μ pour chaque repres. irréductible. Ces facteurs sont d'ailleurs les valeurs propres de \hat{A} . Nous verrons l'utilité de ce Lemme de Schur en pratique pour l'opérateur Hamiltonien \hat{H} , à la section @@ (et dans le TD 12).

Démonstration. Nous effectuons la preuve en deux étapes. Avec deux lemmes A,B intermédiaires.

Lemme 6.4.2. (“Lemme de Schur A”). Si $\hat{A} : \mathcal{D}_j \rightarrow \mathcal{D}_k$ est un opérateur linéaire entre deux espaces de représentation irréductibles du groupe G et que $[\hat{A}, \hat{G}] = 0, \forall \hat{G} \in G$ alors $\hat{A} = 0$ ou \hat{A} est un isomorphisme. Dans ce dernier cas, on dit que **les représentations sont équivalentes**, $\mathcal{D}_j \cong \mathcal{D}_k$.

- On a supposé que le schéma suivant commute :

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{D}_j & \xrightarrow{\hat{A}} & \mathcal{D}_k \\ \downarrow \hat{R}_j & & \downarrow \hat{R}_k \\ \mathcal{D}_j & \xrightarrow{\hat{A}} & \mathcal{D}_k \end{array}$$

- Dans le cas du groupe des rotations, $\mathcal{D}_j \cong \mathcal{D}_k$ ssi $j = k$).

Démonstration. (du “lemme de Schur A”). Le noyau $\text{Ker}\hat{A} \subset \mathcal{D}_j$ est invariant par G (en effet si $\psi \in \text{Ker}\hat{A}$, cad si $\hat{A}\psi = 0$ alors soit $\psi' = \hat{G}\psi$. On a $\hat{A}\psi' = \hat{A}\hat{G}\psi = \hat{G}\hat{A}\psi = 0$ donc $\psi' \in \text{Ker}\hat{A}$). Comme \mathcal{D}_j est supposé irréductible, cela implique que $\text{Ker}\hat{A} = 0$ (\hat{A} injectif) ou $\text{Ker}\hat{A} = \mathcal{D}_j$ ($\hat{A} = 0$).

De même $\text{Im}\hat{A} \subset \mathcal{D}_k$ est invariant par G (en effet si $\psi \in \text{Im}\hat{A}$, $\psi = \hat{A}\varphi$, alors soit $\psi' = \hat{G}\psi = \hat{G}\hat{A}\varphi = \hat{A}\hat{G}\varphi = \hat{A}\varphi'$. Donc $\psi' \in \text{Im}\hat{A}$). Comme \mathcal{D}_k est supposé irréductible, cela implique que $\text{Im}\hat{A} = 0$ ($\hat{A} = 0$) ou $\text{Im}\hat{A} = \mathcal{D}_k$ (\hat{A} surjectif). Au final, on a obtenu que $\hat{A} = 0$ ou \hat{A} est un isomorphisme (cad injectif et surjectif). \square

Lemme 6.4.3. (“Lemme de Schur B”). Si $\hat{A} : \mathcal{D}_j \rightarrow \mathcal{D}_j$ est un opérateur linéaire dans un espace de représentation irréductible du groupe G et que $[\hat{A}, \hat{G}] = 0, \forall \hat{G} \in G$ alors $\hat{A} = a\hat{I}$ avec $a \in \mathbb{C}$.

Démonstration. Les espace propres de \hat{A} , notés $\mathcal{H}_a \subset \mathcal{D}_j$ sont invariants par G . Or on a supposé \mathcal{D}_j irréductible. Donc il n’y en a qu’un seul. \square

Remarque : on a fait il y a la réciproque du Lemme B : si $(\forall \hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, ([\hat{A}, \hat{G}] = 0, \forall \hat{G}) \Rightarrow \hat{A} = a\hat{I}$) alors \mathcal{H} est irréductible. La preuve de cela est simplement que si $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ est réductible, on construit $\hat{A} = a_1\hat{I}_{\mathcal{H}_1} + a_2\hat{I}_{\mathcal{H}_2}$ avec $a_1 \neq a_2$, qui vérifie $[\hat{A}, \hat{G}] = 0$ mais pas $\hat{A} = a\hat{I}$.

On peut maintenant faire la preuve du “Lemme de Schur” initial. On suppose $\hat{A} : \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k \rightarrow \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k$. On introduit les opérateurs de projection $\hat{P}_j = \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k \rightarrow \mathcal{D}_j$ et $\hat{P}_k = \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k \rightarrow \mathcal{D}_k$. Par rapport à cette somme directe, on peut écrire \hat{A} comme une matrice d’opérateurs en blocs :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{A}_{j,j} & \hat{A}_{k,j} \\ \hat{A}_{j,k} & \hat{A}_{k,k} \end{pmatrix}$$

avec $\hat{A}_{j,k} = \hat{P}_k\hat{A}\hat{P}_j : \mathcal{D}_j \rightarrow \mathcal{D}_k$, etc. On a naturellement $[\hat{P}_j, \hat{G}] = 0$. On suppose $[\hat{A}, \hat{G}] = 0$ pour tout $\hat{G} \in G$. Donc $[\hat{A}_{j,k}, \hat{G}] = 0$. D’après le Lemme A, et le Lemme B, cela implique que $\hat{A}_{j,k} = 0$ si $j \neq k$ et $\hat{A}_{j,j} = a_j\hat{I}$ avec $a_j \in \mathbb{C}$. Ainsi

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_j\hat{I} & 0 \\ 0 & a_k\hat{I} \end{pmatrix}.$$

□

Théorème de Wigner : (Voir [HB], chap. 7)

Si le Hamiltonien \hat{H} a un spectre discret, et admet une symétrie par un groupe d'invariance dynamique G discret ou continu, cad si

$$[\hat{H}, \hat{G}] = 0, \quad \forall \hat{G} \in G$$

alors génériquement (c'est à dire résultat stable par toute perturbation respectant cette symétrie), les espaces propres de \hat{H} sont des représentations irréductibles de G .

En particulier, si le groupe G est commutatif, ses représentations irréductibles sont de dimension 1 (page 254), et on s'attend à aucune dégénérescence (générique) dans le spectre, i.e. les niveaux d'énergie sont tous différents.

Si le groupe G est non commutatif, il admet des représentation irréductibles de dimension $d \geq 1$, et on s'attend à des dégénérescences dans le spectre, de multiplicité d . (i.e. différents états de même énergie).

Idée de la Preuve On a déjà montré que les espaces propres de \hat{H} sont des espaces représentation du groupe \hat{G} . Considérons un tel espace propre. Si il est réductible, il se décompose comme somme d'espaces de repr. irréductibles, par exemple $\mathcal{H} = \mathcal{D}_j \oplus \mathcal{D}_k$. On a $\hat{H} = \begin{pmatrix} E\hat{I} & 0 \\ 0 & E\hat{I} \end{pmatrix}$ d'après le Lemme de Schur. Il est aisé d'imaginer une perturbation de \hat{H} de la forme $\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} E_1\hat{I} & 0 \\ 0 & E_2\hat{I} \end{pmatrix}$, avec $E_1 \neq E_2$, proches de E , donc respectant la symétrie. Pour cet opérateur perturbé \hat{H}_2 , les espaces propres sont des espaces de représentations irréductibles. Le cas $E_2 = E_1$ est exceptionnel (non générique).

Remarques et commentaires

- La propriété montre que “sauf cas exceptionnel”, **une dégénérescence dans un spectre traduit la présence d'une symétrie**, et plus précisément la présence d'un groupe de symétrie non commutatif.
- Cette propriété est très utile en physique moléculaire par exemple, car connaissant les représentations irréductibles des différents groupes (il y a 230 groupes finis de l'espace tous catalogués et observés dans la nature, voir [Ste94] page 41), et observant le spectre d'une molécule, on déduit le groupe d'invariance, et ainsi on peut déduire la forme géométrique de la molécule :

Spectre \Rightarrow Groupe de symétrie \Rightarrow Forme de la molécule

Cela montre l'importance des représentations irréductibles de groupes en physique.

- Dans l'énoncé de la propriété, le terme **générique** signifie "sauf exceptions". (Il a un sens mathématique précis, en terme de mesures).
Si l'espace propre d'énergie est réductible, cela signifierait que l'on a mal identifié le groupe de symétrie. Il y aurait une symétrie supplémentaire oubliée, et donc un groupe G' plus important pour lequel l'espace propre est bien irréductible. Nous allons illustrer cela avec l'exemple de l'atome Hydrogène, cf ci-dessous.
Si on est dans un tel cas, et si l'on rajoute une perturbation à \hat{H} qui préserve seulement la symétrie de G , alors la symétrie supplémentaire serait brisée, et le gros espace propre se décomposerait en espaces irréductibles de G , d'énergies différentes, conformément à la propriété ci-dessus. C'est le cas des corrections relativistes dans le spectre de l'atome H.
- **Exemple du double puits symétrique à 1D** : il y a l'invariance par parité qui est un groupe commutatif. Le spectre est bien non dégénéré.
- **Exemple d'une particule dans un potentiel périodique**. Le groupe de symétrie est celui des translations. Dans ce cas le spectre en bandes a des dégénérescences mais qui sont dues à l'aspect continu du spectre. La propriété ci-dessus où l'on a supposé spectre de \hat{H} discret, ne s'applique plus.

6.4.2 Exemple : Spectre de l'atome d'hydrogène

Pour illustrer la propriété générale précédente, considérons le cas très connu de l'atome d'hydrogène.

6.4.2.1 Rappels du spectre :

(@@ résoudre le spectre ici, cf Taylor T2 p.113, Sternberg p.190 @@)

Le Hamiltonien décrivant la dynamique de l'atome H (particule réduite) est

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{r}|} \quad (6.4.2)$$

(Dans ce paragraphe on ne parle pas du spin 1/2 des protons et électrons.)

Il y a invariance par rotation, se traduisant par $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$. On calcule que le spectre de \hat{H} est :

$$\hat{H}|\psi_{n,l,m}\rangle = E_n|\psi_{n,l,m}\rangle$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, +l$$

avec les vecteurs propres qui sont produit d'une harmonique sphérique et d'une fonction radiale :

$$\langle \vec{x} | \psi_{n,l,m} \rangle = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

et les niveaux énergies :

$$E_n = -\frac{\varepsilon_1}{n^2} \quad (6.4.3)$$

avec

$$\varepsilon_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV.}$$

On remarque que l'espace propre de chaque niveau d'énergie est

$$\mathcal{H}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \mathcal{D}_l$$

Cet espace est dimension n^2 (car $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$).

Ce n'est pas un espace de représentation irréductible du groupe de rotation, puisqu'il se décompose en espaces irréductibles \mathcal{D}_l .

Voir figure 6.4.1.

6.4.2.2 Symétrie supplémentaire de Pauli, et dégénérescence en l

(Voir Sternberg [Ste94] p.244., ou Taylor Tome 2 p.119 [Tay96b]). @@ Le faire ici @@
La situation semble contredire le théorème de Wigner.

En fait non, due à la forme particulière du potentiel central en $1/r$, il y a une symétrie supplémentaire, (découverte par Pauli en 1925), dont le générateur est :

$$\hat{A} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} \wedge \hat{L} - \hat{L} \wedge \hat{p} \right) - mK \frac{\hat{x}}{|\vec{x}|}$$

appelé **vecteur de Runge et Lenz**, (où $K = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$)

On peut vérifier que

$$\left[\hat{A}, \hat{H} \right] = 0$$

et que le groupe de symétrie est maintenant $SO(4)$ qui est de dimension 6, et que chaque espace propre \mathcal{H}_n est irréductible pour cette symétrie.

(en particulier on obtient ainsi directement les niveaux d'énergie (6.4.3)).

(Cette symétrie est aussi vraie en mécanique classique dans le problème de Kepler, avec le potentiel gravitationnel en $1/r$ entre deux corps, et est relié au fait que les orbites bornées de Kepler sont fermées, ce sont des ellipses, ce qui n'est pas vrai en général pour un potentiel central).

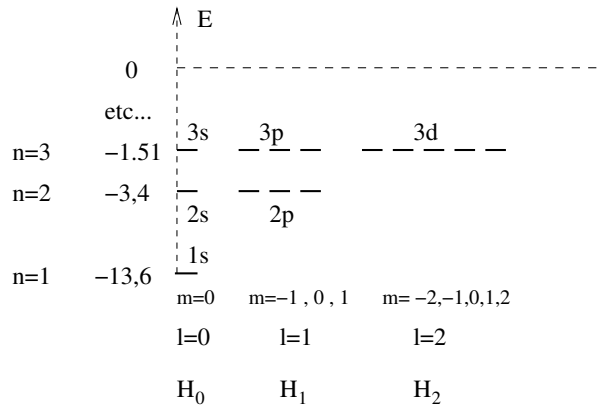


FIGURE 6.4.1 – Spectre de l’atome H.

6.4.2.3 Exemple de la correction relativiste, brisant cette symétrie.

La symétrie particulière de Runge et Lenz ci-dessus, est brisée par la moindre perturbation, qui tout en gardant l’invariance par rotation, du problème modifie la forme particulière du Hamiltonien eq.(6.4.2).

Considérons par exemple la correction relativiste. En relativité, la relation

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 - \vec{p}^2 = (mc)^2$$

donne à basse impulsion $p \ll mc$:

$$E = mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc}\right)^2} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + o(p^4)$$

. (on a utilisé $(1 + x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) x^2 + o(x^2)$ avec $\alpha = 1/2$.)

En régime faiblement relativiste, l’énergie cinétique $p^2/2m$ a donc un terme correctif :

$$H'_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}$$

Les niveaux d’énergie E_n , eq. (6.4.3) sont alors modifiés de ΔE qui se calcule en théorie des perturbations. On obtient :

$$\Delta E = -E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + 1/2} \right)$$

la dépendance en l montre que **la dégénérescence entre différents espaces propres \mathcal{D}_l est en effet levée, conformément au théorème de Wigner.**

Bien sûr la dégénérescence liée à l’invariance par rotation demeure (cela se traduit par le fait que des états avec m différents ont la même énergie). Voir figure 6.4.2.

Exercice 6.4.4. Calculer ΔE ci-dessus, au premier ordre en théorie des perturbations stationnaires.

6.4.2.4 Atome à plusieurs électrons

Réf : Sternberg [Ste94]p.198, et J.L. Rivail “Chimie quantique” ,

Le spectre de l’atome d’hydrogène est aussi similaire au spectre des atomes à un électron, comme He^+ , Li^{2+} , (sauf qu’il faut remplacer la charge du noyau par Ze , avec $Z = +2$ pour He, $Z = +3$ pour Li, et utiliser une masse réduite différente).

Pour des atomes à plusieurs électrons, le problème est bien plus compliqué. Il n’y a pas de solution exacte du spectre, mais des méthodes approchées (comme la méthode variationnelle ou autres) donnent des résultats très satisfaisants. En particulier la méthode de champs moyen, consiste à considérer que **chaque électron est indépendant**, et subit un **potentiel moyen** $V(r)$, créé par toutes les autres charges (Ze du noyau, et $-(Z-1)e$ des autres électrons). Ce potentiel a **une symétrie sphérique**, qui est une symétrie exacte de l’atome, mais **diffère légèrement du potentiel en $1/r$** . Cette différence **brise donc la symétrie supplémentaire de Pauli, et lève donc la dégénérescence entre états avec l différents**.

L’ordre habituel obtenu est :

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 3d \simeq 4s < 4p < 5s \simeq 4d, \quad \text{etc...}$$

Voir figure 6.4.2.

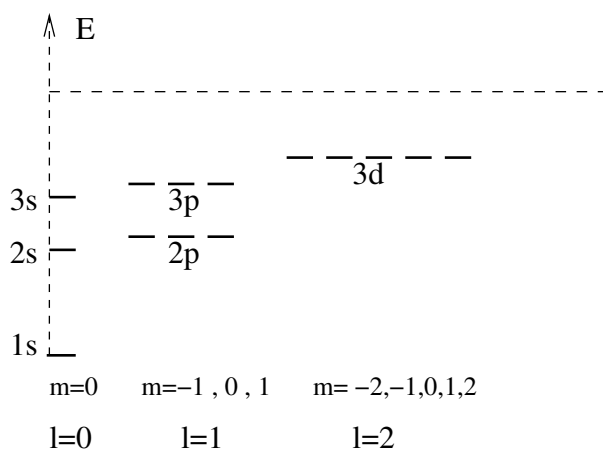


FIGURE 6.4.2 – Spectre d’un atome à plusieurs électrons (orbitales atomiques).

6.4.2.5 Effet d’un champ magnétique extérieur

Si en plus un champ magnétique extérieur \vec{B} est appliqué, il brise la symétrie par rotation, car il privilégie une direction particulière (direction de \vec{B}). Ainsi la dégénérescence en m est levée, et **le spectre est alors non dégénéré** : C’est l’**effet Zeeman**.

Si le champ magnétique est constant selon l’axe z , il subsiste une symétrie de rotation autour de l’axe z .

Cependant cette symétrie ne suffit pas à donner des dégénérescences dans le spectre, car **les rotations autour de z forment un groupe commutatif** :

$$\hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_z(\beta) = \hat{R}_z(\beta) \hat{R}_z(\alpha)$$

Exercice 6.4.5. Calculer au premier ordre en théorie des perturbations, les modifications des niveaux d'énergie de l'atome d'Hydrogène, soumis à un faible champ magnétique B .

6.4.2.6 Structure fine et hyperfine de l'atome hydrogène

ref : Bransden p370, 376 [BC89]. Cohen T [CBF].

Le spectre de l'atome d'hydrogène isolé décrit figure (6.4.1) n'est pas tout à fait correct. En effet il y a de nombreux effets physiques que l'on a négligé et qui modifient ce spectre. Des expériences de spectroscopie permettent d'obtenir les niveaux d'énergie avec une grande précision, et il est donc important de tenir compte de toutes ces corrections. Ces corrections sont natures différentes.

Comme il s'agit de petites corrections, la théorie des perturbations est tout à fait adaptée. Les corrections seront très inférieures à $\epsilon_1 = 13,6 eV$. Mais comme le spectre de l'atome H est dégénéré, il faut utiliser la théorie des perturbations pour niveaux dégénérés.

Structure fine :

- Une **correction relativiste** portant sur l'énergie cinétique et potentielle de l'électron (provenant de l'équation de Dirac) :

$$\hat{H}'_1 = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{\pi\hbar^2}{2(mc)^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \delta(\vec{x})$$

- Une **correction "spin-orbite"** due à l'interaction entre le mouvement orbital de l'électron et son spin :

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2(mc)^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Noter que ces corrections respectent la symétrie par rotation de l'atome. La correction \hat{H}'_2 couple la position au spin. Par conséquent seul le moment angulaire total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ est conservé. Au résultat, les valeurs propres obtenues dépendent de n et j et l , correspondant aux valeurs propres des opérateurs \hat{L}^2 , \hat{J}^2 qui commutent entre eux et qui commutent aussi avec \hat{H} (d'après $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right)$).

L'écart obtenu entre les niveaux (2p3/2-2p1/2) est $\Delta E \simeq 4.10^{-5} eV$.

Structure hyperfine : Il provient du couplage entre les moments magnétiques intrinsèques du proton et de l'électron. Voir une étude page 277, pour son effet sur l'état 1s. L'écart obtenu entre les niveaux E1-E0 de l'état 1s est $\Delta E \simeq 4.10^{-6} eV$

Ref : Cohen T. p1209. chap XII.

Déplacement de Lamb : Il provient du couplage de l'électron avec le vide quantique du champ électromagnétique, que nous avons introduit page 116.

L'écart obtenu entre les niveaux ($2s_{1/2}$ - $2p_{1/2}$) est $\Delta E \simeq 4.10^{-6} eV$. Voir [CTDRG88].

6.5 Composition des moments angulaires

6.5.1 Particule composée de deux particules de spin 1/2

références : Feynman 12-1, 12-2, 12-5 [Fey63]

C'est par exemple le noyau de Deutérium composé de proton et neutron :

$$\text{Deutérium} = (\text{proton}, \text{neutron})$$

ou du pion π_0 formé de deux quarks u, \bar{u} .

Ou finalement de l'atome d'hydrogène formé de électron + proton.

L'espace de Hilbert du spin total est :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2}$$

où $\mathcal{D}_{1/2} \equiv \mathcal{H}_{spin} \equiv \mathbb{C}^2$ est l'espace quantique du spin étudié au chapitre 4, de base $|+_z\rangle, |-_z\rangle$.

Dans l'espace \mathcal{H}_{tot} on note $|++\rangle = |+_z\rangle_1 \otimes |+_z\rangle_2$, etc... Une base de \mathcal{H}_{tot} est formée par les quatre vecteurs :

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$$

Si le système de deux particules est isolé dans l'espace, alors il est invariant par rotation de l'ensemble, dont le générateur est le moment angulaire total (voir (6.3.5) page 252) :

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$$

Et le Hamiltonien commute avec \hat{S} :

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0$$

Par exemple :

$$\hat{H} = K \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

est bien invariant par rotation globale des deux spins.

Dans cet exemple on peut vérifier directement que $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$, en écrivant :

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

donnant :

$$\hat{H} = \frac{K}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

et utilisant $[\hat{S}^2, \hat{S}] = 0$.

De l'invariance par rotation, on déduit :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{S}^2] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{S}_z] &= 0 \\ [\hat{S}^2, \hat{S}_z] &= 0 \end{aligned}$$

Pour trouver le spectre de \hat{H} , on cherche donc d'abord les vecteurs propres communs de \hat{S}^2, \hat{S}_z .

D'après (6.3.6), ces vecteurs propres peuvent être noté $|J, M\rangle$ et vérifient :

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |J, M\rangle &= M\hbar |J, M\rangle \\ \hat{S}^2 |J, M\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle \end{aligned}$$

et forment une base orthonormée de l'espace \mathcal{H}_{tot} . On veut leur expression dans la base $|\pm, \pm\rangle$.

Propriété Voici la décomposition de l'espace $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2}$ en vecteurs $|J, M\rangle$ orthonormés :

$$\begin{aligned} \text{Singlet} & : |J=0; M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \\ \text{Triplet} & : \begin{cases} |J=1; M=+1\rangle = |++\rangle \\ |J=1; M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |J=1; M=-1\rangle = |--\rangle \end{cases} \end{aligned} \quad (6.5.1)$$

Montrant que l'espace $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2}$ se décompose en somme deux représentations irréductibles du groupe de rotation :

$$\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=0} \oplus \mathcal{D}_{J=1} \quad (6.5.2)$$

appelée **décomposition de Clebsch-Gordan**. Les dimensions de ces espaces sont :

$$2 \times 2 = 1 + 3$$

Remarquer que les valeurs de J possibles de la particule composée sont la somme $J = |\frac{1}{2} + \frac{1}{2}| = 1$ et la différence $J = |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| = 0$ des deux spins $\frac{1}{2}$ individuels. Les coefficients devant les états $|\pm, \pm\rangle$ dans les expressions des états triplets et singlet ci-dessus, s'appellent coefficients de **Clebsch-Gordan**.

Démonstration. On va utiliser :

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 &= \left(\hat{S}_{1,x} \hat{S}_{2,x} + \hat{S}_{1,y} \hat{S}_{2,y} + \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z} \right) \\ &= \left(\frac{1}{2} \hat{S}_{1,+} \hat{S}_{2,-} + \frac{1}{2} \hat{S}_{1,-} \hat{S}_{2,+} + \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z} \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 \\ &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \left(\hat{S}_{1,+} \hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-} \hat{S}_{2,+} + 2\hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z} \right)\end{aligned}$$

on va aussi utiliser :

$$\begin{aligned}\hat{S}_1^2 | - - \rangle &= \hbar^2 \frac{3}{4} | - - \rangle, & \hat{S}_{1,+} | - - \rangle &= \hbar | - + \rangle \\ \hat{S}_{1,-} | - - \rangle &= 0, & \hat{S}_{1,z} | \pm \pm \rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} | \pm \pm \rangle\end{aligned}$$

On calcule :

$$\begin{aligned}\hat{S}_z | - - \rangle &= (-1)\hbar | - - \rangle \\ \hat{S}^2 | - - \rangle &= \hbar^2 \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2\frac{1}{4} \right) | - - \rangle = 2\hbar^2 | - - \rangle\end{aligned}$$

donc :

$$| - - \rangle = | J = 1, M = -1 \rangle$$

Ensuite, on crée $| J = 1, M = 0 \rangle$ par action de \hat{S}_+ :

$$\begin{aligned}| J = 1, M = 0 \rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_+ | J = 1; M = -1 \rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \left(\hat{S}_{1,+} + \hat{S}_{2,+} \right) | - - \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (| + - \rangle + | - + \rangle)\end{aligned}$$

et on crée $| J = 1, M = 1 \rangle$ par action à nouveau de \hat{S}_+ :

$$\begin{aligned}| J = 1, M = 1 \rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_+ | J = 1; M = 0 \rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \left(\hat{S}_{1,+} + \hat{S}_{2,+} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} (| + - \rangle + | - + \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (| + + \rangle + | + + \rangle) = | + + \rangle\end{aligned}$$

On a donc obtenu trois vecteurs $| J = 1, M = -1, 0, +1 \rangle$ de l'espace \mathcal{H}_{tot} qui lui est de dimension 4. Le complémentaire orthogonal est de dimension 1, et engendré par le vecteur :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| + - \rangle - | - + \rangle)$$

En effet, on vérifie que $\langle \psi | J = 1, M \rangle = 0$ pour $M = -1, 0, 1$. On calcule de même :

$$\hat{S}^2 |\psi\rangle = \dots = 0, \quad \hat{S}_z |\psi\rangle = 0$$

donc $|\psi\rangle = | J = 0, M = 0 \rangle$. Le spectre de \hat{H} s'obtient en écrivant :

$$\hat{H} = \frac{K}{2} \left(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2 \right)$$

□

Table de Clebsh-Gordan de $\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2}$ On note $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$, et $m_1 = \pm 1/2, m_2 = \pm 1/2$ les valeurs respectives des spins individuels. Par exemple l'état $|+ -\rangle$ est $m_1 = 1/2, m_2 = -1/2$. Alors les coefficients des formules (6.5.1) sont tabulées de la façon suivante :

		J=1	1	0	1
m_1	m_2	M=1	0	0	-1
1/2	1/2	1			
1/2	-1/2		$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$	
-1/2	1/2		$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/2}$	
-1/2	-1/2				1

TABLE 6.5.1 – Table des Coefficients de Clebsch-Gordan, pour $\mathcal{D}_{j_1=1/2} \otimes \mathcal{D}_{j_2=1/2} = \mathcal{D}_{J=0} \oplus \mathcal{D}_{J=1}$

Conséquence, spectre de \hat{H} : Les niveaux d'énergie de la particule composée est donnée par le spectre de \hat{H} qui donc a deux niveaux d'énergie, $E_{J=0}, E_{J=1}$ de multiplicité respectives 1, 3. Pour l'exemple, $\hat{H} = K \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$, on obtient $E_J = \frac{K}{2} \hbar^2 (J(J+1) - \frac{3}{2})$, soit :

$$E_0 = -\frac{3}{4} K \hbar^2$$

$$E_1 = +\frac{1}{4} K \hbar^2$$

Voir figure 6.5.1. Donc dans son état d'énergie fondamentale, la particule composée est une particule de moment angulaire intrinsèque $J = 0$. Dans son état excité elle a un moment angulaire intrinsèque $J = 1$.

Remarquons que nous venons d'obtenir que l'opérateur \hat{H} dans l'espace $\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=0} \oplus \mathcal{D}_{J=1}$ s'écrit comme $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 \hat{I} & 0 \\ 0 & E_1 \hat{I} \end{pmatrix}$. C'est tout à fait attendu d'après le Lemme de Schur page 266.

Exercice 6.5.1. Montrer que dans l'espace $\mathcal{H}_{tot.} = \mathcal{D}_{1/2}^{(1)} \otimes \mathcal{D}_{1/2}^{(2)}$, tout opérateur autoadjoint invariant par rotation est de la forme $\hat{H} = A \hat{I} + B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ avec $A, B \in \mathbb{R}$. Plus généralement comment écrire un opérateur invariant par rotation dans $\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2}$? (Aide : Utiliser le Lemme de Schur et l'opérateur de Casimir \hat{S}^2).

6.5.1.1 La raie de 21 cm de l'hydrogène

ref cours de L'X, p236.

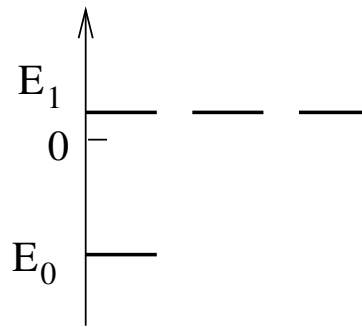


FIGURE 6.5.1 – Niveaux d'énergie de $\hat{H} = +K\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$. Le niveau E_0 est non dégénéré. Le niveau E_1 a une multiplicité 3.

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, la figure (6.5.1), montre comment l'état (1s) est en fait formé de 4 états dus à l'interaction entre les spins 1/2 de l'électron et du proton. L'écart en énergie est

$$\Delta E = E_1 - E_0 = 6.10^{-6} eV$$

et s'appelle **la structure hyperfine** de l'état 1s.

Si un atome d'hydrogène isolé est dans un état d'énergie E_1 , il n'est pas rigoureusement stationnaire à cause du couplage avec le champ électromagnétique. Il se désexcite vers l'état fondamental E_0 , par émission spontanée avec une durée de vie moyenne très longue :

$$\tau \simeq 10^7 \text{ ans}$$

Le photon ainsi produit, d'énergie $h\nu = \Delta E$ a une longueur d'onde $\lambda = \frac{c}{\nu} = 21 \text{ cm}$ (onde radio).

Dans le gaz interstellaire, constitué d'Hydrogène, les collisions entre atomes sont responsables d'une température $T = 100K$, soit $kT = 10^{-2} eV$. Ces collisions excitent l'état E_1 , qui se désexcite ensuite par émission spontanée, émettant donc des photons de longueur d'onde $\lambda = 21 \text{ cm}$. L'espace interstellaire contient beaucoup d'atome H, et ce signal est observable. C'est "la raie à 21 cm". Il permet d'ailleurs de **cartographier notre Galaxie**.

6.5.1.2 Horloges atomiques et mesure du temps

La valeur de $\Delta E = \hbar\omega$ est connue expérimentalement avec une précision relative remarquable : 10^{-13} .

Cette grande précision sur la période $T = 2\pi/\omega$ de transition entre les niveaux E_0 et E_1 est à l'origine de la définition actuelle de la seconde (unité de temps). On utilise la structure hyperfine du Césium 133 avec $\Delta E \simeq 3,8 \cdot 10^{-5} eV$ plutôt que celle de l'hydrogène :

Définition Une **seconde** est 9192631770 périodes de transitions de la structure hyperfine du Ce 133.

Les mesures du temps les plus précises sont ainsi faites avec des **Horloges atomiques**. (Pour le principe de fonctionnement, voir la page web de l'ENS. Voir aussi "observatoire de Paris, laboratoire de métrologie")

La précision relative actuelle est de 10^{-18} , soit 1sec/âge de l'univers. cette précision est telle que l'on vérifie les effets du champ de gravitation terrestre prédits par la relativité générale, en soulevant l'horloge de seulement $h = 30\text{cm}$. (en effet en relativité on montre que le décalage temporel est $\frac{hg}{c^2}$ avec $g = 9,81\text{m/s}^2$, $c = 3.10^8\text{m/s}$).

Remarque : Une ancienne définition de la seconde provient de la division du jour (et de la nuit) en 12 heures, de la division d'une heure en 60 minutes et d'une minute en 60 secondes.

Pourquoi avoir choisi 12 et 60 ?

Peut être pour des raisons pratiques : parmi les nombres en 1 et 100, les chiffres 12 et 60 sont ceux qui ont relativement le plus de diviseurs. Un grand nombre de diviseurs³ permet ainsi de diviser un jour de plusieurs manières différentes :

$$1/2 \text{ jour} = 1 \times 12h = 2 \times 6h = 3 \times 4h = 4 \times 3h = 6 \times 2h = 12 \times 1h$$

Voir figure 6.5.2.

Toujours à propos de la division du temps, il y a 7 jours dans la semaine, car dès l'époque antique (Babyloniens), et sûrement avant, on observait 7 astres se déplaçant dans le ciel : Lune, Mars, Mercure, Jupiter, Venus, Saturne, Soleil, qui ont donné les sept jours de la semaine, et aussi l'importance particulière du chiffre 7 dans toutes les cultures. Rappelons aussi que le choix de l'année est lié à la période de rotation de la Terre autour du Soleil. Le mois est la période de rotation de la lune autour de la Terre. Le jour est la période de rotation de la Terre sur elle-même. La seconde est approximativement la période d'une pulsation cardiaque (battement de coeur).

6.5.2 Résultat général sur la composition de deux moments cinétiques

On conçoit que l'étude précédente se généralise au couplage de deux moments cinétiques j_1 et j_2 quelconques :

si deux particules de moment angulaire intrinsèque j_1 et j_2 sont en interaction par un Hamiltonien \hat{H} , et si cette interaction est invariante par rotation globale du système, alors les niveaux d'énergie de \hat{H} (i.e. de la particule composée) correspondent à des représentations irréductibles du groupe de rotation, notée \mathcal{D}_J .

3. Le nombre de diviseurs d'un entier n , noté $d(n)$, voir figure 6.5.2, est relié à un problème de recherche très important : numériquement, on observe que $d(n)$ fluctue pour $n \rightarrow \infty$. En moyenne il suit une loi connue, mais ses fluctuations semblent aléatoires. Par exemple, si on note $A(n)$ (respect. $B(n)$) le nombre d'entiers $n' \leq n$ pour lesquels $d(n')$ est pair (respect. impairs), alors il est conjecturé que $A(n)$ et $B(n)$ fluctuent autour de leur moyenne qui est $n/2$, comme \sqrt{n} (la loi des grands nombres). Cette conjecture est équivalente à la fameuse **conjecture de Riemann**. Référence : Borwein p.4 [Roo06].

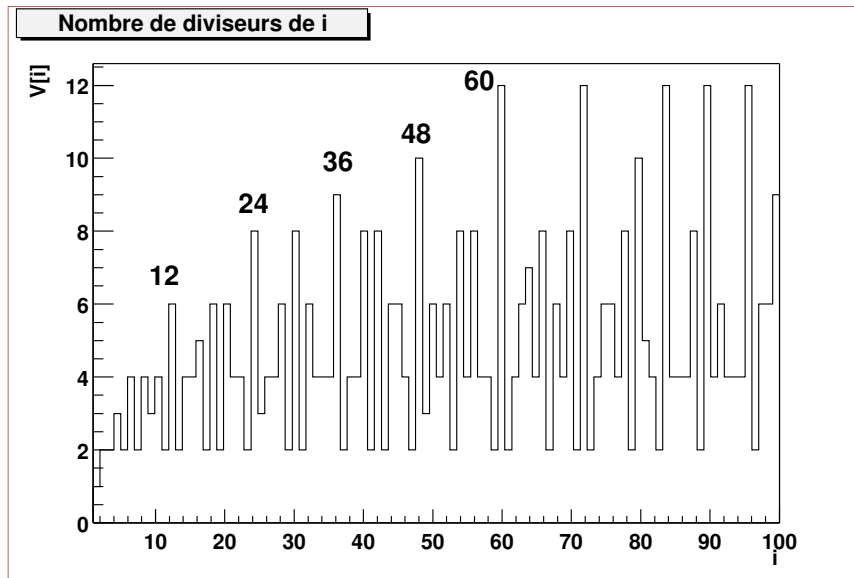


FIGURE 6.5.2 – Nombre de diviseurs d'un entier i . Cette courbe justifie pourquoi les nombres 12 et 60 ont été choisis pour diviser le jour (et la nuit) en 12 heures, et l'heure en 60 minutes, et la minute en 60 secondes. En effet il apparaît que 12 et 60 ont beaucoup de diviseurs. Cela offre la possibilité de diviser la journée de plusieurs manières différentes.

En résumé le problème consiste à savoir **comment l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2}$ se décompose en représentations irréductibles \mathcal{D}_J .**

Le résultat qui généralise (6.5.2) est :

$$\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2} = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{J=|j_1+j_2|} \mathcal{D}_J$$

Exemple :

$$\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=0} \oplus \mathcal{D}_{J=1}$$

$$\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=1/2} \oplus \mathcal{D}_{J=3/2}$$

$$\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_{J=0} \oplus \mathcal{D}_{J=1} \oplus \mathcal{D}_{J=2}$$

Voir figure 6.5.3.

Autrement dit, par rapport à l'état individuel de chaque particule, une base de \mathcal{H}_{tot} est

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle, \quad m_1 = -j_1, \dots, +j_1, \quad m_2 = -j_2, \dots, +j_2.$$

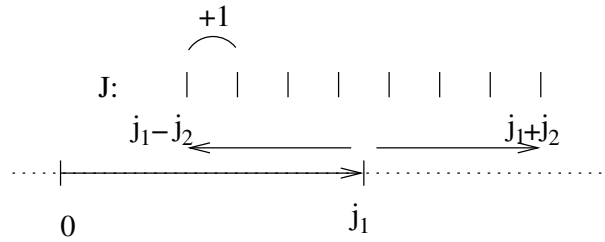


FIGURE 6.5.3 – Composition de deux moments cinétiques j_1, j_2 .

(soit $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ vecteurs).

mais par rapport à la particule composée, une base de \mathcal{H}_{tot} qui est composée par les vecteurs propres de \hat{H} , est :

$$|J, M\rangle, \quad J = |j_1 - j_2|, \dots, |j_1 + j_2|, \quad M = -J, \dots, +J$$

qui forme aussi un ensemble de $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ vecteurs.

Exercice : vérifier que le nombre d'état $|J, M\rangle$ est bien $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$.

Les vecteurs de base $|J, M\rangle$ s'expriment à partir des vecteurs de base $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ par des relations précises, appelées **relations de Clebsch-Gordan** :

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(J, M, j_1, m_1, j_2, m_2) |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

On trouve ces coefficients, par une technique analogue à celle utilisée pour la propriété (6.5.1).

Voici ces coefficients de **Clebsch-Gordan** disposés dans la table 6.5.1, ou 6.5.2.

		J=3/2	3/2	1/2	3/2	1/2	3/2
m_1	m_2	M=3/2	1/2	1/2	-1/2	-1/2	-3/2
1	1/2	1					
1	-1/2		$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{2/3}$			
0	1/2		$\sqrt{2/3}$	$-\sqrt{1/3}$			
0	-1/2				$\sqrt{2/3}$	$\sqrt{1/3}$	
-1	1/2				$\sqrt{1/3}$	$-\sqrt{2/3}$	
-1	-1/2						1

TABLE 6.5.2 – Table des Coefficients de Clebsch-Gordan, pour $\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=1/2} \oplus \mathcal{D}_{J=3/2}$

Remarques :

- o Noter que expérimentalement, on peut mesurer le moment angulaire intrinsèque J d'une particule en faisant passer un faisceau dans un appareil de Stern Gerlach. Il y aura alors $2J + 1$ faisceaux à la sortie. cf Bransden p37.

6.5.3 Application : symétrie d'isospin, et sections efficaces de réactions hadroniques

Nous allons illustrer l'utilité des Coefficients de **Clebsch-Gordan**, pour la décomposition

$$\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_{J=1/2} \oplus \mathcal{D}_{J=3/2}$$

, en l'appliquant non pas au groupe de rotation spatial, mais à la **symétrie d'isospin**, en physique nucléaire, qui correspond au groupe $SU(2)$.

6.5.3.1 introduction à la symétrie d'isospin

Référence : [Ste94] p.213.

Mis à part leur charge électrique Q différente, le proton ($Q = +1$ en unité e) et le neutron ($Q = 0$), ont des propriétés très semblables. Par exemple leur masse est voisine $m_n = 940MeV$, $m_p = 939MeV$, et ils se comportent de façon similaire dans les interactions nucléaires. En 1930, Heisenberg a émis l'hypothèse, que le proton et le neutron correspondent à une seule particule, appelée **nucléon**, dont le proton et le neutron seraient deux états internes différents, notés $|p\rangle$ et $|n\rangle$. L'état interne du nucléon serait donc décrit par un vecteur dans un espace de dimension deux noté $\mathcal{D}_{j=1/2}$, appelé espace **d'isospin**, et ayant pour base $|p\rangle, |n\rangle$ (par analogie avec le spin $1/2$). Comme la force nucléaire ne fait pas la différence entre le proton et le neutron, Heisenberg a postulé que la force nucléaire possède une symétrie par rapport au mélange de ces deux états, autrement dit une invariance par rapport au **groupe $SU(2)$** . C'est la **symétrie d'isospin**⁴. Seule la force électromagnétique fait la différence entre ces deux états internes, et brise cette symétrie. Cependant les forces électromagnétiques sont beaucoup plus faibles que les forces nucléaires, et cela explique la petite différence de masse entre le proton et le neutron. Par exemple dans l'espace $\mathcal{D}_{1/2}$, l'opérateur de charge électrique est

$$\hat{Q} \equiv_{base(|p\rangle, |n\rangle)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

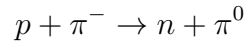
En d'autres termes, la base $|p\rangle, |n\rangle$ est une base particulière de $\mathcal{D}_{1/2}$ privilégiée par la force électromagnétique.

D'autres particules nucléaires ont été découvertes ; les pions, π^+, π^0, π^- (de charge électrique respectives $+1, 0, -1$). Leur masse est $m_{\pi^+} = m_{\pi^-} = 139,6MeV$, $m_{\pi^0} = 135MeV$. D'après l'hypothèse de Heisenberg, ces trois particules sont en fait une seule particule, appelée le **pion**, et possédant un état interne décrit par un vecteur dans l'espace $\mathcal{D}_{j=1}$ de la symétrie d'isospin (rappel : c'est un espace de représentation irréductible de $SU(2)$, de dimension $dim\mathcal{D}_{j=1} = 2j + 1 = 3$). La force électromagnétique, ne respectant pas cette symétrie, est responsable du choix particulier de la base $|\pi^{\pm,0}\rangle$ et de leur différence de masse. (comme la charge électrique interagit avec l'environnement, c'est pour cela que lors d'une mesure ce soit des états privilégiés. On appelle cela une règle de super-sélection).

4. On sait maintenant que cette symétrie reflète l'existence de "champs élémentaires" que sont les quarks u (up) et d (down) inventés par Gell-Mann en 1969.

6.5.3.2 Réaction nucléaires nucléon-pion

Considérons les collisions nucléaires entre un nucléon N et un pion π . En sortie de la collision, les particules peuvent être diverses, par exemple :



La figure 6.5.4 montre les sections efficaces de diffusion $\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi')$ pour diverses réactions de ce type.

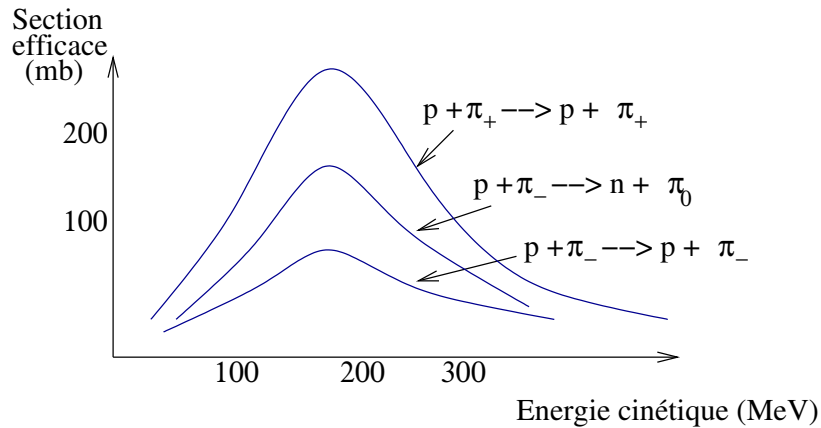


FIGURE 6.5.4 – Sections efficaces de diffusion pour diverses réactions. Le pic de largeur $\Delta E \simeq 100 \text{ MeV}$ correspond à une résonance.

La section efficace $\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi')$ est proportionnelle à la probabilité de la réaction, et donc au module carré d'un opérateur de diffusion \hat{U} , pris entre l'état initial et final :

$$\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi') = \left| \langle N', \pi' | \hat{U} | N, \pi \rangle \right|^2$$

Exercice 6.5.2. Diffusion nucléon-pion

1. Un état (nucléon - pion) $|N, \pi\rangle$ se décrit par un vecteur dans l'espace $\mathcal{H}_{(N,\pi)} = \mathcal{D}_{j=1/2} \otimes \mathcal{D}_{j=1}$. En utilisant les résultats sur la composition de moments angulaires (généraux aux représentations du groupe $SU(2)$ en fait), comment se décompose cet espace comme somme d'espaces de représentations irréductibles $\mathcal{D}_{j'}$ de la symétrie $SU(2)$ d'isospin ? (préciser les dimensions).
2. En utilisant la table (6.5.2) des coefficients de Clebsch-Gordan, écrire les états de base $|N, \pi\rangle$ dans la base des états $|J, M\rangle$ appropriée à cette décomposition.
3. D'après l'hypothèse de l'invariance de la force nucléaire par rapport à la symétrie d'isospin, montrer que la forme générale que prend la matrice de l'opérateur \hat{U} exprimé dans cette base des états $|J, M\rangle$, dépend de seulement deux amplitudes $A_{3/2}, A_{1/2} \in \mathbb{C}$? Autrement dit,

$$\hat{U} \equiv \begin{pmatrix} A_{3/2} \hat{I} d_4 & 0 \\ 0 & A_{1/2} \hat{I} d_2 \end{pmatrix} \quad (: \text{ par rapport à la décomposition } \mathcal{H}_{(N,\pi)} = \mathcal{D}_{3/2} \oplus \mathcal{D}_{1/2})$$

4. On supposera que ces amplitudes $A_{3/2}, A_{1/2}$, ne dépendent pas de l'énergie. Exprimer les trois sections efficaces de la figure (6.5.4), à partir de $A_{3/2}, A_{1/2}$. Simplifier ces expressions dans les cas extrêmes où (a) $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$, (b) $|A_{3/2}| \ll |A_{1/2}|$, (c) $A_{3/2} = A_{1/2}$.
5. Comme il apparaît sur la figure (6.5.4), l'expérience donne (à la résonance)

$$\begin{aligned}\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) &= 195 \text{ mb} \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) &= 45 \text{ mb} \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) &= 23 \text{ mb}\end{aligned}$$

Que déduire sur les amplitudes $A_{3/2}, A_{1/2}$?

6. Dans le même esprit avec lequel nous avons introduit le nucléon et le pion, l'interprétation du "pic de résonance" (i.e. la bosse sur la figure (6.5.4)) est qu'une particule intermédiaire est créée, appelée **résonance** Δ . En mesurant la largeur ΔE , quelle est la durée de vie de cette particule (utiliser $\hbar = 6.5 \cdot 10^{-22} \text{ MeV}\cdot\text{s}$) ? Quel est l'espace de degré interne d'isospin de cette particule Δ ? Comment noter les états internes de cette particule, en faisant apparaître la charge électrique ?

6.5.4 Règles de sélection et théorème de Wigner-Eckardt

Voici une autre application de la composition de moment angulaires très importante pour la spectroscopie des atomes.

Nous l'illustrons sur un exemple, montrant le principe d'utilisation.

Considérons un **atome isolé**. Le spectre des niveaux électronique est constitué d'**orbitales atomiques**, notée (n, l, m) , comme expliqué sur la figure 6.4.2.

Maintenant si l'atome est soumis à une onde électromagnétique plane de fréquence ω , la description faite section 8.2.2, en terme de théorie des perturbations dépendant du temps, montre que celle-ci est susceptible de créer des transitions entre les orbitales (n, l, m) (en absorbant ou émettant un photon). Nous avons établi, eq.(8.2.8,8.2.10), que la probabilité de transition $a = (n, l, m) \rightarrow b = (n', l', m')$ est :

$$P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) \simeq \frac{I}{2\varepsilon_0 c \hbar^2} |D_{ba}|^2 \cos^2 \theta F(t, \omega_{ba} \pm \omega)$$

et est proportionnelle à l'élément de matrice $|D_{ba}|^2 = e^2 \left| \langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle \right|^2$, qui fait intervenir l'opérateur vectoriel de position \hat{x} .

6.5.4.1 Règle de sélection

Même si en général les états quantiques orbitales $|n, l, m\rangle$ sont difficiles à calculer dans un atome à plusieurs électrons, un simple argument de symétrie, appelé **règle de sélection** montre que l'élément de matrice est nul sauf si

$$l' = l + 1, \quad \text{ou} \quad l' = l - 1$$

(ce résultat est aussi obtenu par un calcul direct en TD). Les transitions possibles dans le spectre atomique sont schématisée sur la figure 6.5.5.

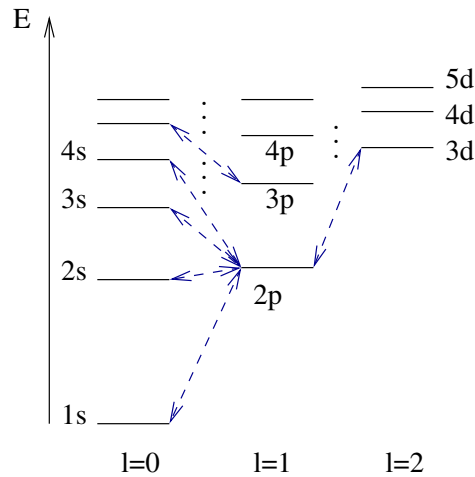


FIGURE 6.5.5 – Les transitions permises sont entre les états $l' = l \pm 1$, donnant des raies $\hbar\omega$ caractéristiques en spectroscopie.

Voici maintenant l'explication de cette règle de sélection en terme de symétrie. L'élément de matrice $\langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle$ fait intervenir trois objets appartenant à des représentations irréductibles précises du groupe de rotation $SO(3)$: les vecteurs $|n, l, m\rangle \in \mathcal{D}_l$, $|n', l', m'\rangle \in \mathcal{D}_{l'}$ et l'opérateur vectoriel $\hat{x} \in \mathcal{D}_1$, comme montré eq.(6.3.9).

L'élément de matrice $\langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle$ est le produit scalaire entre le vecteur $\hat{x} | n, l, m \rangle \in \mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_l = \mathcal{D}_{l-1} \oplus \mathcal{D}_l \oplus \mathcal{D}_{l+1}$ et le vecteur $|n', l', m'\rangle \in \mathcal{D}_{l'}$.

Comme des vecteurs appartenant à des représentation irréductibles différentes sont orthogonaux, une condition nécessaire pour que l'élément de matrice soit non nul est :

$$l' = l - 1, \text{ ou } l' = l, \text{ ou } l' = l + 1$$

Le deuxième cas $l' = l$ est exclu à cause du même argument utilisé avec une autre symétrie : la symétrie par inversion $\vec{x} \rightarrow (-\vec{x})$, ou symétrie de **parité**, correspondant au groupe $\mathbb{Z}_2 = \{I, -I\}$. (C'est une symétrie de l'atome car le potentiel vérifie $V(-\vec{x}) = V(\vec{x})$). L'opérateur \hat{x} est impair (parité -1), et $|n, l, m\rangle$ a la parité $(-1)^l$, d'après eq.(6.3.12). Donc le vecteur $\hat{x} | n, l, m \rangle$ a la parité $-(-1)^l$. Pour que l'élément de matrice soit non nul, il est nécessaire que $|n', l', m'\rangle$ ait la même parité, donc que $(-1)^{l'} = -(-1)^l$. Cela exclue le cas $l' = l$.

6.5.4.2 Théorème de Wigner Eckardt

Voici une formulation qui généralise le paragraphe précédent.

Définitions :

- un **opérateur vectoriel** est une famille d'opérateurs $\hat{\vec{O}} = (\hat{O}_1, \hat{O}_2, \hat{O}_3)$, sur laquelle agit le groupe de rotation $SO(3)$, et qui sous l'effet d'une rotation, se transforme comme un vecteur dans $\mathcal{D}_{l=1}$. Exemples : $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, ou $\hat{\vec{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, ou $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ sont des opérateurs vectoriels.
- Un **opérateur scalaire** est un opérateur \hat{O} qui est invariant sous l'effet d'une rotation (c'est à dire se transforme comme un vecteur dans $\mathcal{D}_{l=0}$). Exemples : \hat{H} , ou $\hat{L} \cdot \hat{S}$ sont des opérateurs scalaires.
- Plus généralement, un **opérateur tensoriel irréductible** de rang j est une famille de $(2j + 1)$ opérateurs notés $\hat{T}_j \equiv (\hat{T}_{j,m'})_{m'=-j \rightarrow j}$ sur laquelle agit le groupe $SO(3)$ de rotation (ou $SU(2)$), et qui sous l'effet d'une rotation se transforme comme un vecteur (à $2j + 1$ composantes) de la représentation irréductible \mathcal{D}_j .
- Plus généralement un **opérateur tensoriel** est une famille d'opérateurs sur laquelle agit le groupe $SO(3)$ de rotation (ou $SU(2)$), et qui sous l'effet d'une rotation se transforme comme un vecteur d'une représentation du groupe de rotation, pas forcément irréductible. Exemple : $\hat{L} \otimes \hat{L}'$ a 9 composantes, et correspond à $\mathcal{D}_1 \otimes \mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1 \oplus \mathcal{D}_2$.

Éléments de matrices Pour l, l', l'' donnés, supposons qu'il faille calculer des éléments de matrices $\langle l', m' | \hat{T}_{l'', m''} | l, m \rangle$, où $|l', m'\rangle \in \mathcal{D}_{l'}$, et $|l, m\rangle \in \mathcal{D}_l$ espaces de repres. irréductibles, et $\hat{T}_{l''}$ est un opérateur tensoriel irréductible et $m = -l \rightarrow +l$, etc...

Alors $\hat{T}_{l'', m''} | l, m \rangle \in \mathcal{D}_{l''} \otimes \mathcal{D}_l = \sum_{k=|l''-l|}^{l''+l} \mathcal{D}_k$.

Théorème de Wigner-Eckardt :

Si $\mathcal{D}_{l'}$ n'est pas présent dans la décomposition $\mathcal{D}_{l''} \otimes \mathcal{D}_l = \sum_{k=|l''-l|}^{l''+l} \mathcal{D}_k$, alors les éléments de matrice $\langle l', m' | \hat{T}_{l'', m''} | l, m \rangle$ sont nuls (c'est la règle de sélection).

Si $\mathcal{D}_{l'}$ est présent dans la décomposition, alors l'élément de matrice $\langle l', m' | \hat{T}_{l'', m''} | l, m \rangle$ peut être non nul et s'exprime à l'aide de Coefficients de Clebsch-Gordan.

Voir [CBF, HB] pour plus de précisions, et des exemples d'utilisations.

6.6 Symétries fondamentales en physique

Il y a de nombreuses symétries dites fondamentales en physiques, car supposées exactes.

6.6.0.3 Le groupe de Poincaré

C'est par exemple l'invariance de la physique par le groupe de Poincaré (translation dans l'espace-temps et changement de Lorentz de référentiels relativistes), qui est donc

responsable de la conservation de l'énergie, de la quantité de mouvement, et du moment angulaire.

On montre que les représentations irréductibles du groupe de Poincaré sont caractérisées par deux nombres : m et s que l'on interprète comme étant **la masse** et **le spin** des particules élémentaires. (ou hélicité si $m = 0$). Voir [Ste94] p300. Ce résultat de Wigner est considéré comme un des résultats majeure du XXe siècle.

6.6.0.4 Autres symétries fondamentales :

- Les forces élémentaires sont exprimées par les groupes de Jauges $U(2)$ (pour la force électro-faible) ou $SU(3)$ pour la force nucléaire forte. Les bosons de Jauges, sont l'expression des générateurs de ces groupes. Il en résulte des quantités conservées. La charge électrique est l'une d'entre elles.
- Symétrie brisée spontanément, @@
- Des indices suggèrent la recherche de nouvelles symétries : exemple la **super-symétrie** qui ferait un lien entre les particules de matière (les quarks et les leptons). cf : http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/grandunification_fr.html
- Conservation de la charge, @@

Chapitre 7

Introduction à la théorie de la diffusion

Ce chapitre est pour le moment très incomplet.

Références : [BC89] chap.13, [CBF] chap.8. Cours de MQ de Richard Fitzpatrick sur le web.

Ref mathématique : R. Melrose “geometric scattering theory” [Mel95], sur sa page web.

Remarques

- Noter que en anglais la théorie de la diffusion se dit “**scattering theory**”. (En anglais, le terme “diffusion” est réservé pour le phénomène de diffusion de la chaleur, qui est complètement autre chose).
- Concernant la diffusion d’une onde sur un cristal (potentiel périodique), on parle aussi de “**diffraction**”. Concernant encore plus spécifiquement une onde plane diffusée sur un potentiel constant par morceaux (ex : lumière sur une plaque d’indice différent), on parle d’onde réfléchie et réfractée. “**Réflexion**” et “**réfraction**”. Ces phénomènes sont des cas particuliers de la diffusion présentée dans ce chapitre.

7.1 Introduction

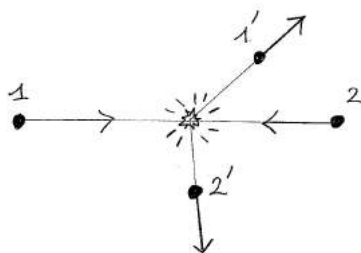
La théorie de la diffusion consiste à étudier la collision entre 2 ou plusieurs particules. Pour le moment, nous allons étudier le cas le plus simple de **la collision entre 2 particules sans spin**.

On suppose que l’interaction entre les deux particules est décrite par une énergie potentielle qui ne dépend que de la position relative des 2 particules $\vec{x} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1$ et est donc notée :

$$V(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)$$

où $\vec{x}_1, \vec{x}_2 \in \mathbb{R}^3$ sont les positions des particules 1 et 2. On suppose que le potentiel V est à **courte portée**. Ce qui signifie qu’il est nul ou “faible” si $|\vec{x}_2 - \vec{x}_1|$ est grand. On verra que l’hypothèse précise est

$$V(\vec{x}) = o\left(\frac{1}{|\vec{x}|}\right) \tag{7.1.1}$$

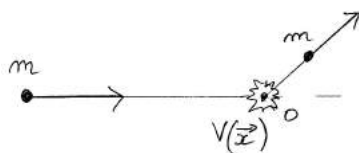


Dans l'étude du problème à deux corps isolés, exercice 6.1.1 page 237, nous avons vu qu'il suffit de décrire **le mouvement relatif**

$$\vec{x} := \vec{x}_2 - \vec{x}_1$$

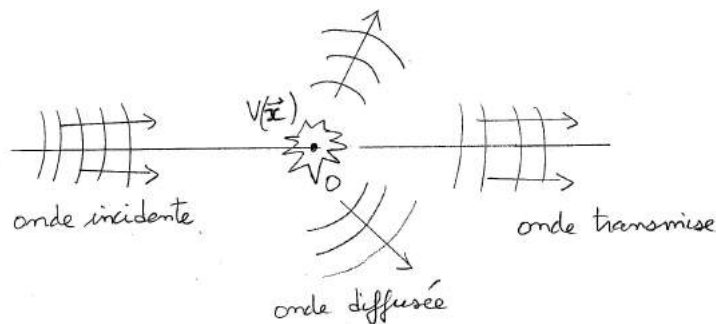
dans le référentiel du centre de masse et que ce mouvement relatif est affecté de la masse réduite $m := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Le Hamiltonien est alors

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$



Par exemple pour la diffusion d'un électron (léger) sur un proton (lourd), on a $m_1 \gg m_2$, donc le centre de masse $\vec{X} = \frac{1}{m_1 + m_2} (m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2) \simeq \vec{x}_1$ est placé sur le proton \vec{x}_1 qui est quasiment immobile en $\vec{x}_1 = 0$, et le mouvement relatif $\vec{x}(t) = \vec{x}_2 - \vec{x}_1 = \vec{x}_2$ décrit celui de l'électron ($m \simeq m_1$). Dans ce cas le potentiel est $V(\vec{x}) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}|}$ (mais ne décroît pas assez vite à l'infini pour satisfaire l'hypothèse (7.1.1)).

En mécanique quantique, les "particules" sont décrites par des ondes, donc le problème consiste à décrire la diffusion d'une onde incidente par le potentiel $V(\vec{x})$.



L'étude des collisions est très importante, car tout d'abord, historiquement, la découverte du monde quantique et des particules s'est faite en étudiant des processus de collision. Beaucoup d'expériences de physique sont des expériences de collision, ou plus précisément de diffusion. En cette année 2012 les physiciens des particules ont annoncé la découverte tant attendue du **Boson de Higgs** dans les processus de collision au L.H.C.

La théorie qui suit est valable pour la diffusion d'ondes en général. Elle s'adapte donc pour la diffusion de la lumière, ou du son par exemple.

Nous allons nous restreindre à l'étude des solutions stationnaires, appelée **théorie de la diffusion stationnaire**. La question essentielle sera d'exprimer la composante "onde diffusée", à partir de la donnée "onde incidente".

7.2 Amplitude de diffusion $f(k, \theta, \varphi)$

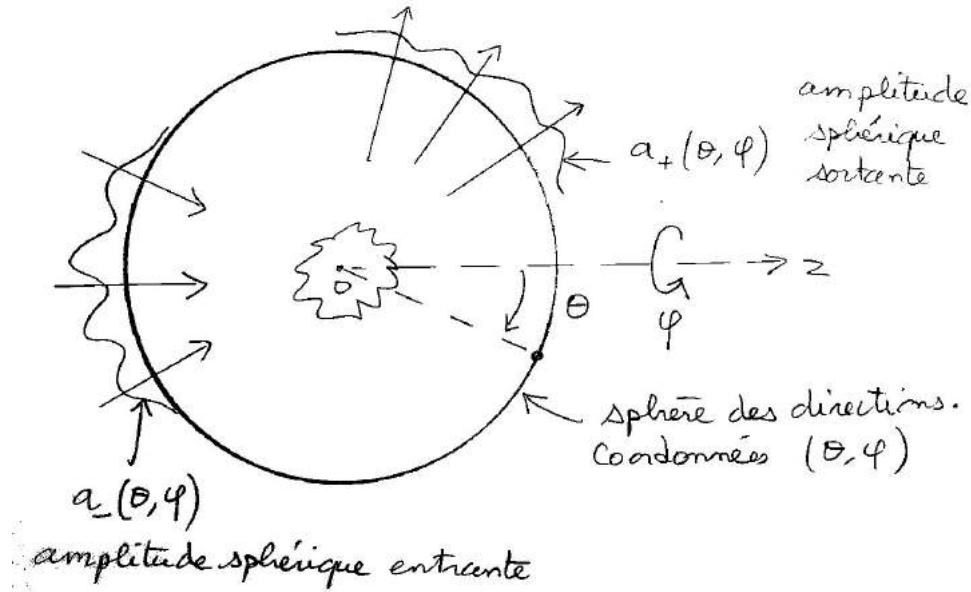
La proposition suivante donne une description des ondes stationnaires d'énergie E . (voir aussi Melrose [Mel95] Lemme 1.2,)

On va utiliser les coordonnées sphériques $\vec{x} \equiv (r, \theta, \varphi)$.

Proposition 7.2.1. *Si $\psi(\vec{x})$ est une onde stationnaire d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, c'est à dire vérifiant $\hat{H}\psi = E\psi$, alors pour $r = |\vec{x}| \gg 1$ (c'est à dire "**en champ lointain**"), ψ s'écrit de façon unique :*

$$\psi(\vec{x}) = \underbrace{a_-(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r}}_{\text{Onde sphérique entrante}} + \underbrace{a_+(\theta, \varphi) \frac{e^{+ikr}}{r}}_{\text{Onde sph. sortante}} + o\left(\frac{1}{r}\right), \quad r = |\vec{x}|, \quad (7.2.1)$$

où $a_{\pm}(\theta, \varphi)$ appelées **amplitudes sphériques entrante/sortante** sont des fonctions des variables angulaires seulement, et $o\left(\frac{1}{r}\right)$ décrit un terme qui décroît plus vite que $1/r$ pour $r \rightarrow \infty$.



Les deux premiers termes de (7.2.1) s'appellent “**ondes sphérique entrantes et sortantes**”, car le courant est radial (voir (7.2.10) page 298). Nous appellerons $a_{\pm}(\theta, \varphi)$ les **amplitudes asymptotiques des ondes sphériques entrantes et sortantes**.

Démonstration. (Preuve de Eq.(7.2.1)). Pour $r = |\vec{x}| \gg 1$, loin du lieu de collision, on a supposé $V(\vec{x}) \rightarrow 0$, donc le Hamiltonien s'approxime par

$$\hat{H} \simeq \hat{H}_0 + o\left(\frac{1}{|\vec{x}|}\right), \quad \hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

qui est celui d'une particule libre. On a

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi + o\left(\frac{1}{r}\right)\psi \Leftrightarrow \Delta\psi = -k^2\psi + o\left(\frac{1}{r}\right)\psi \quad (7.2.2)$$

En coordonnées sphériques $\vec{x} \equiv (r, \theta, \varphi)$, le Laplacien s'écrit

$$\Delta\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)$$

(voir cours de mathématiques de M1[Fau10b]). Si on écrit $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)a(\theta, \varphi)$, (7.2.2) donne

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}a + o\left(\frac{1}{r}\right) = -k^2 R a \\ &\Leftrightarrow \frac{d^2(rR)}{dr^2} = -k^2(rR) + o(1) \end{aligned}$$

Cette équation du deuxième ordre est celle de l'oscillateur harmonique et a deux solutions indépendantes $rR(r) = e^{\pm ikr} + o(1)$, soit

$$R(r) = \frac{e^{\pm ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right)$$

□

Remarque : (*)

- En coordonnées cartésiennes, le Laplacien s'écrit $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, et il est naturel de considérer les ondes planes :

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \in \mathbb{R}^3,$$

qui sont fonctions propres de \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0\psi_{\vec{p}} = E\psi_{\vec{p}}, \quad E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad : \text{énergie}$$

et forment une base de l'espace quantique $L^2(\mathbb{R}^3)$ (d'après la théorie de la transformée de Fourier). Le spectre est dégénéré car à une énergie E donnée, correspondent toutes les ondes planes t.q. $\vec{p} \in \mathbb{R}^3$ est sur la sphère de rayon $|\vec{p}| = \sqrt{2mE}$. L'espace propre d'énergie E noté \mathcal{E}_E est donc de dimension infinie et ces ondes planes en forme une base. Mais cette base n'est pas unique. L'écriture (7.2.1) est une écriture asymptotique générale pour une onde dans l'espace \mathcal{E}_E .

Afin d'illustrer la formule précédente (7.2.1), considérons pour ψ , le cas particulier une onde plane d'énergie E se propageant dans la direction de l'axe z . Une onde plane correspond à une particule libre c'est à dire à une situation sans potentiel V . La proposition suivante donne sa décomposition en ondes sphériques. Le résultat montre que l'onde entrante vient uniquement de la direction $\theta = \pi$ et que l'onde sortante (aussi appelée onde transmise) part dans la direction $\theta = 0$. Cela n'est pas étonnant.

Proposition 7.2.2. “Amplitudes sphériques d’une onde plane en champ lointain”. Une onde plane selon z peut s’écrire :

$$e^{ikz} = a_+(\theta) \frac{e^{+ikr}}{r} + a_-(\theta) \frac{e^{-ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right) \quad (7.2.3)$$

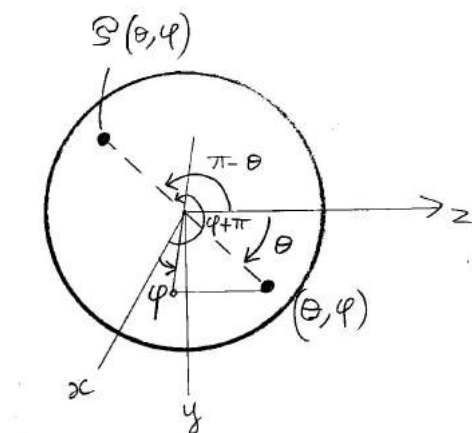
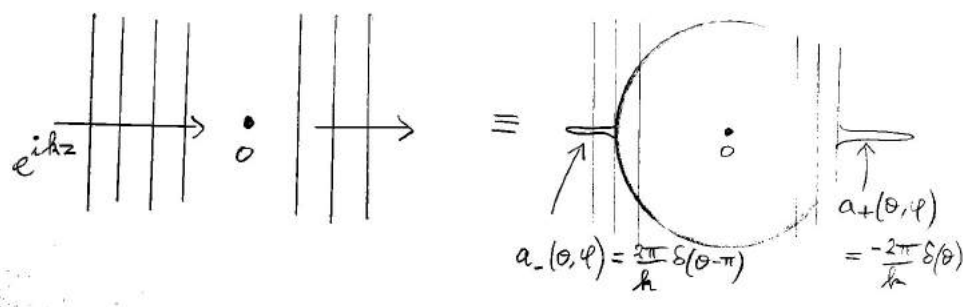
$$\text{avec } a_-(\theta) = \frac{(2\pi)}{k} \delta(\theta - \pi), \quad (7.2.4)$$

$$a_+(\theta) = \frac{(-2\pi)}{k} \delta(\theta). \quad (7.2.5)$$

où δ est la distribution de Dirac. Plus généralement, pour le problème libre (i.e. sans potentiel V , $\hat{H} = \hat{H}_0$), les amplitudes asymptotiques a_+ et a_- sont reliées par la relation :

$$a_+ = -\hat{\mathcal{P}}a_- \quad (7.2.6)$$

où $\hat{\mathcal{P}} : C(S^2) \rightarrow C(S^2)$ est l’opérateur de parité défini par $(\hat{\mathcal{P}}a)(\theta, \varphi) = a(\mathcal{P}(\theta, \varphi))$ avec la transformation de parité, en coordonnées sphériques, $\mathcal{P} : (\theta, \varphi) \rightarrow (\pi - \theta, \varphi + \pi)$.



Remarquer que les amplitudes $a_{\pm}(\theta)$ sont indépendantes de φ (en effet e^{ikz} est invariant par rotation autour de z).

Démonstration. (*) En coordonnées sphériques $z = r \cos \theta$ l'onde plane s'écrit :

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$$

On cherche à simplifier cette expression en champ lointain, c'est à dire sur une sphère de rayon r fixé et très grand $r \gg 1$. Il s'agit d'une fonction de la forme $e^{i\varphi(\theta)}$ avec une phase $\varphi(\theta) = kr \cos \theta$. On a $\varphi'(\theta) = -kr \sin \theta$ qui est non nul sauf si $\theta = 0, \pi$. Cela signifie que cette fonction de phase oscille très vite (pour $r \gg 1$) sauf en $\theta = 0, \pi$. D'après le "théorème de la phase non stationnaire" (voir formulaire @@), on déduit que $e^{i\varphi(\theta)}$ est négligeable pour $\theta \neq 0, \pi$ (précisément $o\left(\frac{1}{r^N}\right)$ pour tout N , au sens des distributions). Il nous reste à calculer la valeur de e^{ikz} en $\theta = 0, \pi$. Pour cela on utilise le "théorème de la phase stationnaire" (voir formulaire @@). La petite difficulté ici est que ces deux points $\theta = 0, \pi$ sont mal décrit par les coordonnées sphériques (θ, φ) . Près de ces points, on va plutôt utiliser les coordonnées (\tilde{x}, \tilde{y}) $\tilde{x} := x/r = \sin \theta \cos \varphi$ et $\tilde{y} = y/r = \sin \theta \sin \varphi$ et s'intéresser au voisinage du point $(\tilde{x}, \tilde{y}) = (0, 0)$. On a alors

$$e^{ikz} \simeq e^{i\varphi}$$

avec

$$\begin{aligned} \varphi = kz &= k(r^2 - x^2 - y^2)^{1/2} = kr \left(1 - \tilde{x}^2 - \tilde{y}^2\right)^{1/2} \\ &\simeq kr \left(1 - \frac{1}{2}\tilde{x}^2 - \frac{1}{2}\tilde{y}^2 + o(\tilde{x}^2, \tilde{y}^2)\right) \end{aligned}$$

Les dérivées sont

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{x}} &= -kr\tilde{x}, & \frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{y}} &= -kr\tilde{y}, \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{x}^2} &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{y}^2} &= -kr. \end{aligned}$$

On observe en effet que la phase est stationnaire ($\partial \varphi = 0$) en $\tilde{x} = \tilde{y} = 0$. Si $f(\tilde{x}, \tilde{y})$ est une "fonction test" non nulle près de ce point on a au premier ordre $d\Omega \simeq d\tilde{x}d\tilde{y}$ et on écrit la formule de la phase stationnaire¹ (@@) :

$$\begin{aligned} \int_{S^2} e^{i\varphi} f d\Omega &= \iint e^{i\varphi(\tilde{x}, \tilde{y})} f d\tilde{x}d\tilde{y} \\ &= e^{i\varphi(0,0)} f(0,0) \left(\frac{-i\sqrt{2\pi}}{\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{x}^2}\right)}\right)^{1/2} \left(\frac{-i\sqrt{2\pi}}{\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{y}^2}\right)}\right)^{1/2} \\ &= e^{ikr} f(0,0) \frac{(-2\pi)}{kr} \end{aligned}$$

1. $\int e^{i\lambda\varphi(x)} u(x) dx = \left(\frac{\pm i\sqrt{2\pi}}{\frac{d^2\varphi}{dx^2}(0)}\right) u(0) + O\left(\frac{1}{\lambda}\right)$

Ainsi près du point $\theta = 0$ (revenant en coordonnées sphériques)

$$e^{ikz} \equiv e^{ikr} \delta(\theta) \frac{(-2\pi)}{kr} = \frac{e^{ikr}}{r} a_+(\theta)$$

avec $a_+(\theta) = \frac{(-2\pi)}{k} \delta(\theta)$. On fait le même calcul au voisinage du point $\theta = \pi$ pour trouver $a_-(\theta)$. (détailler @@). \square

Remarque : dans la plupart des livres de physique on trouve l'expansion exacte de e^{ikz} à l'aide des polynômes de Legendre². Il est possible de retrouver (7.2.3) à partir de cette expansion. On n'a pas eu besoin de cela ici. Il nous semble que l'argument de la phase stationnaire est plus adapté et plus clair.

Une onde sphérique entrante ne correspond pas à une situation expérimentale habituelle. Dans une situation expérimentale, l'onde entrante est plus souvent modélisée par une onde plane incidente. Cela amène à la définition suivante :

Définition 7.2.3. En théorie de la diffusion stationnaire, on cherche une solution de l'équation $\hat{H}\psi = E\psi$, d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, telle que en champ lointain $r \gg 1$,

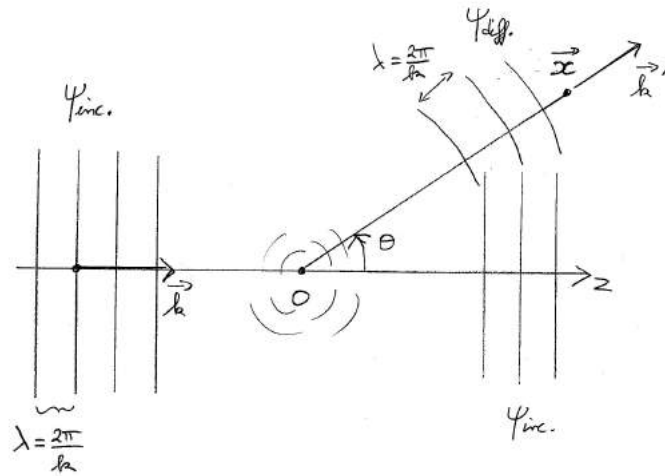
$$\psi(\vec{x}) = \underbrace{e^{ikz}}_{\psi_{inc}} + \underbrace{f(k, \theta, \varphi) \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right)}_{\psi_{diff}} + o\left(\frac{1}{r}\right) \quad (7.2.7)$$

formé d'une **onde incidente et transmise** selon l'axe z notée $\psi_{inc.}$, et d'une **onde sphérique sortante diffusée**, notée $\psi_{diff.}$. La fonction $f(k, \theta, \varphi)$ s'appelle **amplitude de diffusion** et est unique.

2. Dans les livres, on trouve

$$a_+(\theta) = -\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta), \quad a_-(\theta) = \frac{i}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (2l+1) P_l(\cos\theta).$$

Voir [BC89, (6.86),(6.77)] pour resommer.

**Remarques :**

- on note aussi $\vec{k}' := k \frac{\vec{x}}{r}$ le vecteur d'onde diffusé dans la direction (θ, φ) . Alors f est une fonction de \vec{k}' :

$$f(\vec{k}') := f(k, \theta, \varphi)$$

- D'après (7.2.3), les amplitudes d'ondes sphériques de ψ , equ. (7.2.7) sont

$$a_-(\theta) = -\frac{(2\pi)}{k} \delta(\theta - \pi), \quad a_+(\theta, \varphi) = \frac{(2\pi)}{k} \delta(\theta) + f(k, \theta, \varphi). \quad (7.2.8)$$

Le terme $\delta(\theta)$ correspond à l'onde transmise vers l'avant.

Rappel sur le courant de probabilité :

Proposition 7.2.4. Pour une onde quantique $\psi(\vec{x}, t)$ quelconque, la **densité de probabilité** (non normalisée) est donnée par

$$P(\vec{x}, t) := |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

On a l'équation de conservation de la probabilité

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0. \quad (7.2.9)$$

où la **densité de courant de probabilité** est défini par

$$\vec{j}(\vec{x}, t) := \Re \left(\overline{\psi}(\vec{x}, t) \left(\hat{v} \psi(\vec{x}, t) \right) \right)$$

et $\hat{v} := \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla}$ est "l'opérateur vitesse".

Démonstration. En effet, en supposant $V(\vec{x})$ est réel,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= 2\Re(\bar{\psi}\partial_t\psi) = 2\Re\left(\bar{\psi}(\vec{x})\left(\frac{-i}{\hbar}\hat{H}\psi\right)(\vec{x})\right) = 2\Re\left(\bar{\psi}(\vec{x})\left(\frac{-i\hbar}{2m}(-\nabla^2)\psi\right)(\vec{x})\right) \\ &= -\vec{\nabla}\Re\left(\bar{\psi}(\vec{x})\left(\frac{-i\hbar}{m}\vec{\nabla}\psi\right)(\vec{x})\right) = -\operatorname{div}\vec{j} \end{aligned}$$

□

Remarques :

- D'après (7.2.9) le champ de vecteur $\vec{j}(\vec{x}, t)$ caractérise donc le déplacement de la densité de probabilité de l'onde ψ . Si $d^2\vec{s}$ est un élément de surface alors $(d^2\vec{s}\cdot\vec{j})$ est la probabilité de traverser cette surface par unité de temps.
- Pour commenter (7.2.9), on rappelle aussi la “**formule de transport**” : si $\phi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ est le flot au temps t engendré par le champ de vecteur \vec{j} , si V_0 est un volume initial (ensemble de points) quelconque qui évolue au temps t en $V_t := \phi_t(V_0)$ et si $Q_t := \int_{V_t} P(\vec{x}, t) d^3\vec{x}$ est la probabilité de trouver la particule dans le volume V_t à l'instant t alors (livre de Majda p.6)

$$\frac{dQ_t}{dt} = \int_{V_t} \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} \right) d^3\vec{x}$$

Ainsi $0 = \frac{dQ_t}{dt}$ pour tout volume V_0 est équivalent à (7.2.9).

Le résultat suivant montre un exemple de calcul de courant de probabilité.

Proposition 7.2.5. *Pour les ondes incidentes $\psi_{inc} = e^{ikz}$ et diffusées $\psi_{diff} = f(k, \theta, \varphi) \left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)$ intervenant dans (7.2.7), les courants de probabilité sont respectivement :*

$$\vec{j}_{inc.}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{m}\vec{k}, \quad \vec{j}_{diff.}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{m} \frac{|f(\vec{k}')|^2}{r^2} k\vec{u}_r, \quad (7.2.10)$$

Remarque 7.2.6. le courant total diffusé sur la sphère de rayon r est

$$\left(\underbrace{4\pi r^2}_{\text{surface}} \right) j_{diff.} = 4\pi \frac{\hbar}{m} |f(\vec{k}')|^2 k$$

est bien indépendant de r .

Démonstration. (*) En coordonnées cartésiennes, $\vec{\nabla}\psi_{inc.} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) e^{ikz} = (0, 0, ik) e^{ikz}$ donc

$$\begin{aligned}\vec{j}_{inc}(\vec{x}) &= \Re\left(\bar{\psi}_{inc.} \left(-\frac{i\hbar}{m} \left(\vec{\nabla}\psi_{inc.}\right)\right)\right) \\ &= \frac{\hbar}{m} (0, 0, k) = \frac{\hbar}{m} \vec{k}\end{aligned}$$

En coordonnées sphériques (r, θ, φ) , (voir cours de math [Fau10b]), le gradient est

$$\vec{\nabla}\psi_{diff} = \left(\frac{\partial\psi}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial\theta}, \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right)$$

donc (en ne gardant que les termes réels)

$$\begin{aligned}\vec{j}_{diff}(\vec{x}) &= \Re\left(\bar{\psi}_{diff.} \left(-\frac{i\hbar}{m} \left(\vec{\nabla}\psi_{diff}\right)\right)\right) \\ &= \frac{\hbar}{m} (k |\psi_{diff}|^2, 0, 0) = \frac{\hbar}{m} \frac{|f(\vec{k}')|^2}{r^2} k \vec{u}_r\end{aligned}$$

□

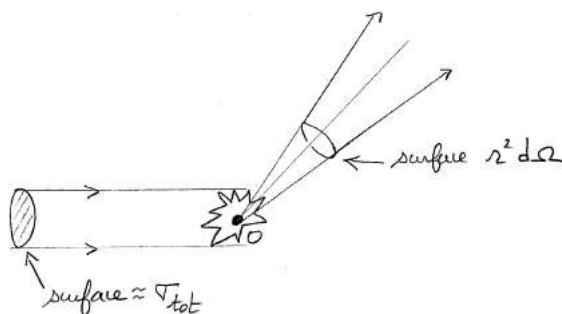
Définition 7.2.7. La **section efficace différentielle** est

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}') := \frac{\left(r^2 \left|\vec{j}_{diff}\right|\right)}{\left|\vec{j}_{inc.}\right|} = \left|f(\vec{k}')\right|^2 \quad (7.2.11)$$

(la deuxième égalité vient de (7.2.10)). La **section efficace totale** est

$$\sigma_{tot} := \int_{S^2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) d\Omega \quad (7.2.12)$$

Remarque : D'après cette définition, $d\sigma$ est la probabilité de diffuser vers l'élément de surface $r^2 d\Omega$, normalisé par le courant de probabilité incident $\left|\vec{j}_{inc.}\right|$. D'après (7.2.11), $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ et σ_{tot} ont l'unité d'une surface. L'interprétation est que le potentiel V a un effet diffuseur comme un objet de **surface équivalente effective** σ_{tot} (et de même $d\sigma$ est la surface équivalente qui ferait diffuser dans l'angle solide $d\Omega$).



7.3 Approximation de Born

La description précédente est très générale et s'applique à tout potentiel V qui décroît pour $r \rightarrow \infty$ mais arbitraire près de l'origine. En général il est très difficile (voire impossible) de calculer les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire, et en particulier l'amplitude de diffusion f de Eq.(7.2.7). Cependant, dans le cas de l'absence de potentiel, $V = 0$, il n'y a pas de diffusion, $f = 0$, donc pour un potentiel très "faible", on peut calculer l'amplitude de diffusion, en utilisant la théorie des perturbations stationnaires. Le résultat obtenu s'appelle l'**approximation de Born**.

Proposition 7.3.1. "Approximation de Born". Pour un potentiel V faible, au premier ordre dans la théorie des perturbations, l'amplitude de diffusion est

$$f(\vec{k}') \simeq -\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} U(\vec{x}') d^3\vec{x}' \quad (7.3.1)$$

avec $U(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x})$ avec $\vec{k}' = (k, \theta, \varphi)$ (en coord. sphériques) le vecteur d'onde diffusé.

En fait $f(\vec{k}')$ prend une forme encore plus simple pour des potentiels à symétrie sphérique $U(r)$, appelés **potentiels centraux**, voir TD. Voir aussi le TD pour le calcul explicite de sections efficaces différentielles et totales, pour certains potentiels à symétrie sphérique.

Démonstration. (*) On souhaite résoudre

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

avec $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$, $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m}$. On sait que l'onde plane $\psi_{inc.} = e^{ikz}$ est solution de $\hat{H}_0\psi_{inc} =$

$E\psi_{inc}$. Alors

$$\begin{aligned} & (\hat{H} - E)\psi + (\hat{H}_0 - E)\psi_{inc} = 0 \\ \Leftrightarrow & V\psi + (\hat{H}_0 - E)(\psi - \psi_{inc}) = 0 \\ \Leftrightarrow & \psi = \psi_{inc} - (\hat{H}_0 - E)^{-1}V\psi \end{aligned}$$

Dans cette dernière équation, appelée **équation de Lipmann-Schwinger**, on a utilisé l'inverse³ de l'opérateur $(\hat{H}_0 - E)$ qui n'est pourtant pas inversible. En fait il est inversible pour $z \in (\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}^+)$, et on considère ici la limite $z \rightarrow E \in \mathbb{R}^+$.

En première approximation (cad en négligeant le potentiel V), on a $\psi^{(0)} = \psi_{inc}$. Ensuite à l'ordre 1 on a l'expression de ψ dans **l'approximation de Born** :

$$\begin{aligned} \psi^{(1)} &= \psi_{inc} - (\hat{H}_0 - E)^{-1}V\psi^{(0)} \\ &= \psi_{inc} - (\hat{H}_0 - E)^{-1}V\psi_{inc} \end{aligned} \quad (7.3.2)$$

(On peut continuer et obtenir l'approximation de Born à l'ordre n : $\psi^{(n)} = \psi_{inc} - (\hat{H}_0 - E)^{-1}V\psi^{(n-1)}$, mais rien ne garantit que cette suite converge!).

Le noyau de Schwartz⁴ de la résolvante, appelée **fonction de Green de \hat{H}_0** , est⁵

$$\lim_{z \rightarrow E} \langle \vec{x} | (\hat{H}_0 - z)^{-1} | \vec{x}' \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{e^{\pm ik|\vec{x}' - \vec{x}|}}{4\pi |\vec{x}' - \vec{x}|}$$

Les signes \pm dépendent de la limite utilisée pour approcher $E \in \mathbb{R}$ (par le demi-plan $\Im(E) > 0$ ou $\Im(E) < 0$). Donc avec l'approximation de Born (7.3.2) :

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\vec{x}) &= \psi_{inc}(\vec{x}) - \int \langle \vec{x} | (\hat{H}_0 - E)^{-1} | \vec{x}' \rangle V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi_{inc} \rangle d^3\vec{x}' \\ &= e^{ikz} - \int \frac{e^{\pm ik|\vec{x}' - \vec{x}|}}{4\pi |\vec{x}' - \vec{x}|} U(\vec{x}') e^{ikz'} d^3\vec{x}' \end{aligned}$$

En champ lointain, $r = |\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$ alors

$$|\vec{x} - \vec{x}'|^2 = \vec{x}^2 - 2\vec{x}\vec{x}' + \vec{x}'^2 = r^2 \left(1 - \frac{2\vec{x}\vec{x}'}{r^2} + \frac{\vec{x}'^2}{r^2} \right)$$

3. De façon générale, l'opérateur inverse $(\hat{H}_0 - E)^{-1}$ est appelé **la résolvante** de \hat{H}_0 .

4. Pour un opérateur \hat{A} , les éléments de matrice dans la base position forment une fonction $K(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \vec{x} | \hat{A} | \vec{x}' \rangle$ appelée **noyau de Schwartz** de l'opérateur.

5. Comme $\hat{H}_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) (-\Delta)$, il s'agit de la fonction de Green G de l'opérateur Laplacien sur \mathbb{R}^3 . Ce résultat est standard :

$$G = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi |x-y|}$$

Voir (A.1.3) dans l'appendice.

donc (comme $(1+x)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}x + o(x)$)

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = r \left(1 - \frac{\vec{x}\vec{x}'}{r^2} \right) + O \left(\frac{\vec{x}'^2}{r} \right) = r + O(1)$$

Donc

$$e^{\pm ik|\vec{x}' - \vec{x}|} \simeq e^{\pm ikr} e^{\mp ik \frac{\vec{x}\vec{x}'}{r}} = e^{\pm ikr} e^{\mp ik' \vec{x}'}, \quad \vec{k}' = k \frac{\vec{x}}{r}.$$

Ainsi, comme $e^{ikz'} = e^{i\vec{k}\vec{x}'}$,

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\vec{x}) &\simeq e^{ikz} - \frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} \int e^{\mp ik' \vec{x}'} U(\vec{x}') e^{i\vec{k}\vec{x}'} d^3 \vec{x}' \\ &= e^{ikz} + f(k, \theta, \varphi) \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \end{aligned}$$

où on a gardé la solution sortante e^{+ikr} et avec

$$f(k, \theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{\Delta}\vec{x}'} U(\vec{x}') d^3 \vec{x}', \quad \vec{\Delta} = \vec{k} - \vec{k}'.$$

□

Remarques :

- Le résultat de Born (7.3.1) montre que au premier ordre, l'amplitude de diffusion $f(\vec{k}')$ est directement reliée à la **Transformée de Fourier du potentiel** $U(\vec{x})$. D'après la théorie des transformées de Fourier, on peut donc reconstruire le potentiel par une transformée de Fourier inverse. Cela s'appelle le **problème inverse**.
- Par exemple si le potentiel est périodique, (ce qui est le cas en cristallographie, où l'on fait diffuser une onde quantique de neutron ou une onde électromagnétique de type rayon X, sur un cristal) alors l'amplitude de diffusion est la T.F. d'une fonction périodique, et d'après la théorie des séries de Fourier, c'est un réseau périodique de distributions de Dirac $\delta(\vec{k}_n)$ appelé **réseau réciproque**. (C'est en effet le réseau dual du réseau cristallin). On retrouve ainsi la **théorie de la diffraction de Bragg** [AM76].

@@ Mettre figure de réseau réciproque pour cristal et quasi cristal (= par déf le réseau réciproque est discret). @@

Exercice 7.3.2. @@ à développer @@ Si le potentiel $U(\vec{x})$ est une somme de distributions de Dirac sur le réseau $L\mathbb{Z}^3$ (cad cristal cubique de période L , ex : or, cuivre, fer austérite, diamant), montrer que les pics de diffusion sont en

$$L\vec{\Delta} = (\vec{k} - \vec{k}') L = 2\pi\vec{m}, \quad \vec{m} \in \mathbb{Z}^3$$

appelés "**condition de Laue**" (1914). La résolution graphique de cette équation est la suivante et utilise la "**sphère d'Ewald**" (1921).

Dans le cas courant d'une poudre de petits monocristaux, on moyenne sur les directions.

7.4 Opérateur de diffusion, la matrice \hat{S}

Re-considérons le problème général de la diffusion sans faire l'approximation de Born. Nous rappelons un résultat simple mais fondamental que nous avons obtenu qui est la décomposition (7.2.1) d'une onde stationnaire en amplitudes entrantes et sortantes $a_{\pm}(\theta, \varphi)$, en champ lointain $r \gg 1$.

Le résultat suivant montre que ces deux amplitudes sont reliées entre elles.

Proposition 7.4.1. *A $k > 0$ fixé, l'amplitude de l'onde sortante $a_+(\theta, \varphi)$ s'exprime à partir de l'amplitude $a_-(\theta, \varphi)$ par un **opérateur unitaire** appelé **opérateur de diffusion** ou **matrice S** :*

$$\hat{S}(k) : \begin{cases} L^2(S^2) & \rightarrow L^2(S^2) \\ a_-(\theta, \varphi) & \rightarrow a_+(\theta, \varphi) = \left(\hat{S}(k) a_- \right) (\theta, \varphi) \end{cases}$$

Remarques :

- Le produit scalaire sur $L^2(S^2)$ est $\iint_{S^2} \bar{a}(\theta, \varphi) b(\theta, \varphi) d\Omega$, avec $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$, l'unitarité de l'opérateur s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \|a_+\| &= \left\| \hat{S}(k) a_- \right\| = \|a_-\| \\ \Leftrightarrow \iint_{S^2} |a_+(\theta, \varphi)|^2 d\Omega &= \iint_{S^2} |a_-(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (7.4.1)$$

La propriété d'unitarité traduit donc **la conservation de la probabilité** lors de la diffusion (et cela apparait clairement dans la preuve ci-dessous).

- Dans le cas "particule libre", c'est à dire avec un potentiel nul $V = 0$, on a vu d'après equ.(7.2.6) que l'opérateur de diffusion s'exprime à partir de l'opérateur parité :

$$\hat{S}(k) = -\hat{\mathcal{P}}$$

- En général (potentiel V non nul), d'après l'expression (7.2.8), l'amplitude de diffusion $f(k, \theta, \varphi)$ peut s'exprimer à partir de l'opérateur de diffusion par l'expression suivante :

$$f(k, \theta, \varphi) = -\frac{(2\pi)}{k} \left(\hat{S}(k) \delta(\theta - \pi) \right) - \frac{(2\pi)}{k} \delta(\theta) \quad (7.4.2)$$

- Connaissant le potentiel $V(\vec{x})$ qui détermine le processus de collision, le **problème général en théorie de la diffusion** consiste à trouver l'expression de cet opérateur de diffusion $\hat{S}(k)$.

- Expérimentalement, on envoie une onde incidente a_- et on observe l'onde sortante a_+ . Plus précisément on détecte la distribution de probabilité $|a_+(\theta, \varphi)|^2$. On a donc accès à l'opérateur de diffusion $\hat{S}(k)$. Un problème important est de trouver les lois des forces d'interaction modélisées par le potentiel $V(\vec{x})$, responsables de cette collision. En d'autres termes, un problème important est de résoudre ce que l'on appelle le "**problème inverse**" : déterminer le potentiel $V(\vec{x})$, à partir de la connaissance de la matrice $\hat{S}(k)$ de diffusion.

Démonstration. (*) (de la proposition 7.4.1). Par définition même d'un opérateur unitaire, il faut montrer la conservation de probabilité, Eq.(7.4.1). Pour cela on utilise la relation (7.2.9) qui traduit la conservation de la probabilité. On considère la sphère S_r de rayon $r \gg 1$. On note B_r la boule de rayon r . L'équation de conservation de la probabilité (7.2.9) intégrée sur la boule B_r , et tenant compte du fait que $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$ (en régime stationnaire) donne

$$0 = \int_{B_r} \operatorname{div}(\vec{j}) = \int_{S_r} \vec{j} \cdot d^2\vec{s} \quad (7.4.3)$$

Or d'après (7.2.1) et (7.2.10) le courant a deux composantes (entrante et sortante)

$$\vec{j} = \vec{j}_+ + \vec{j}_-$$

$$\text{avec } \vec{j}_\pm = \pm \frac{\hbar}{m} \frac{|a_\pm(\vec{k}')|^2}{r^2} k \vec{u}_r$$

On a $\int_{S_r} \vec{j}_\pm \cdot d^2\vec{s} = \pm \frac{\hbar}{m} k \int_{S_r} |a_\pm(\vec{k}')|^2 d\Omega$ donc la conservation de la probabilité (7.4.3) donne

$$\iint_{S^2} |a_+(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \iint_{S^2} |a_-(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Montrant que $\hat{S}(k)$ est unitaire. (@@ En fait il reste à montrer que \hat{S} est bien une application cad que pour toute donnée entrante a_- il y a une solution, et inversement). \square

7.5 Théorie des ondes partielles pour les potentiels centraux

On va supposer maintenant une hypothèse simplificatrice qui est que le potentiel $V(\vec{x})$ est invariant par rotation, donc de la forme $V(r)$, $r = |\vec{x}|$. On dit que c'est un **potentiel central** ou potentiel à symétrie sphérique.

Rappels : D'après la théorie des harmoniques sphériques, voir Théorème 6.3.1 page 262, sous l'action du groupe des rotations, l'espace $L^2(S^2)$ se décompose en espaces de représentations irréductibles :

$$L^2(S^2) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{D}_l$$

et $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, $m = -l \dots +l$ et l fixé forment une base de l'espace \mathcal{D}_l . Donc les fonctions $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ avec $l = 0, 1 \dots \infty$, $m = -l, -l + 1, \dots +l$ forment une base de l'espace des fonctions $a(\theta, \varphi) \in L^2(S^2)$. Par conséquent dans cette base on peut exprimer l'opérateur de diffusion $\hat{S}(k)$ par une matrice (infinie) dont les éléments sont :

$$(S(k))_{(l',m'),(l,m)} = \langle Y_{l',m'} | \hat{S}(k) Y_{l,m} \rangle$$

Nous allons voir que pour les potentiels V à symétrie sphérique, cette matrice est très simple : la diffusion sur un potentiel central se fait de façon indépendante pour chaque moment angulaire l , i.e. dans chaque espace \mathcal{D}_l . On appelle cela un "canal de diffusion". De plus dans chaque canal l la matrice de diffusion est caractérisée par une seule phase δ_l .

Plus précisément,

Proposition 7.5.1. *Si $V(r)$ est un potentiel à symétrie sphérique alors l'opérateur de diffusion est de la forme très simple :*

$$\hat{S}(k) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} e^{i s_l(k)} \hat{I}_{\mathcal{D}_l}$$

c'est à dire qu'il est diagonal dans la base $Y_{l,m}$,

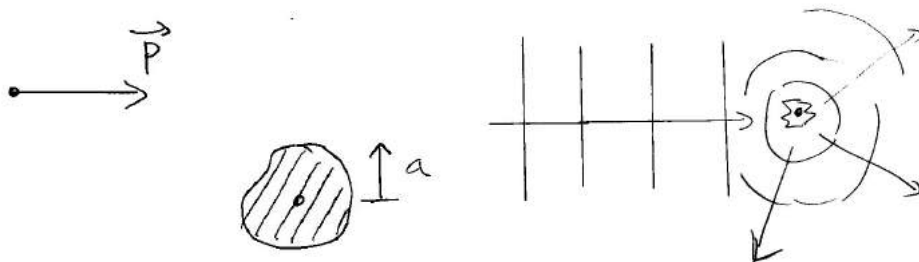
$$\langle Y_{l',m'} | \hat{S}(k) Y_{l,m} \rangle = e^{i s_l(k)} \delta_{l',l} \delta_{m',m}$$

avec l'amplitude $e^{i s_l(k)}$ qui dépend de l seulement. Dans le cas $V = 0$, on a $e^{i s_l(k)} = (-1)^{l+1}$. Pour cette raison, on décide d'écrire en général :

$$e^{i s_l(k)} = (-1)^{l+1} e^{i 2\delta_l}$$

où δ_l est appelé le **déphasage**.

Argument heuristique utilisant principe d'incertitude : (voir TD) On a $\delta_l \simeq 0$ si $l \gg k.a$ (ou $|\vec{L}| \gg \|\vec{p}.a\|$). en particulier à basse énergie, $k \rightarrow 0$, seul le mode $l = 0$ est significatif. C'est la "diffusion isotrope" ou "diffusion s".



Exemple : en TD, on calcule les déphasages δ_l pour un potentiel central constant par morceaux.

Démonstration. La symétrie sphérique se traduit par la relation

$$\begin{aligned} \hat{R}\hat{S}(k)\hat{R}^{-1} &= \hat{S}(k), \quad \forall \hat{R} \text{ opérateur de rotation.} \\ \Leftrightarrow [\hat{S}(k), \hat{R}] &= 0 \end{aligned}$$

et d'après le Lemme de Schur page 266, sur l'espace $L^2(S^2) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{D}_l$ (formé de repres. irreduc. non équivalentes) on déduit que $\hat{S}(k) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \lambda_k \hat{I}_{\mathcal{D}_l}$ avec $\lambda_k \in \mathbb{C}$. Finalement le fait que $\hat{S}(k)$ est unitaire s'écrit $\hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}$. Or $\hat{S}^+ = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \overline{\lambda_k} \hat{I}_{\mathcal{D}_l}$ et $\hat{S}^{-1} = \bigoplus_{l=0}^{\infty} (\lambda_k)^{-1} \hat{I}_{\mathcal{D}_l}$ donc $\overline{\lambda_k} = \lambda_k^{-1} \Leftrightarrow |\lambda_k|^2 = 1$. Donc λ_k est de module 1, et on peut choisir de l'écrire sous la forme $\lambda_k = e^{is_l(k)}$.

Dans le cas $V = 0$ (pas de potentiel), on a vu en (7.2.6) que l'opérateur de diffusion est $\hat{S} = -\hat{\mathcal{P}}$. Or $\hat{\mathcal{P}}Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$ donc $\hat{\mathcal{P}}|_{\mathcal{D}_l} = (-1)^l \hat{I}$ et $\hat{S}|_{\mathcal{D}_l} = (-1)^{l+1} \hat{I}$. On déduit que $e^{is_l} = (-1)^{l+1}$. \square

Proposition 7.5.2. Si $V(r)$ est un potentiel à symétrie sphérique, la section efficace totale défini en (7.2.12) s'écrit :

$$\sigma_{tot} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

avec la "section efficace partielle des ondes l " donnée par :

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2(\delta_l)$$

Démonstration. (*) On a vu en (7.4.2) que l'amplitude de diffusion est donnée par

$$f(k, \theta) = -\frac{(2\pi)}{k} \left(\hat{S}(k) \delta(\theta - \pi) \right) - \frac{(2\pi)}{k} \delta(\theta)$$

(indépendante de φ en symétrie sphérique). Notons $\hat{P}_l : L^2(S^2) \rightarrow \mathcal{D}_l$ le projecteur orthogonal sur l'espace \mathcal{D}_l (des harmoniques sphériques à l fixé). La relation de fermeture s'écrit $\hat{I}_{L^2(S^2)} = \bigoplus_l \hat{P}_l$. Dans le cas de la symétrie sphérique on a $\hat{P}_l \hat{S}(k) = e^{is_l(k)} \hat{P}_l$ donc

$$\begin{aligned} f(k, \theta) &= -\frac{(2\pi)}{k} \sum_l \hat{P}_l \left(\left(\hat{S}(k) \delta_{\theta=\pi} \right) + \delta_{\theta=0} \right) \\ &= -\frac{(2\pi)}{k} \sum_l \left(e^{is_l} \hat{P}_l \delta_{\theta=\pi} + \hat{P}_l \delta_{\theta=0} \right) \end{aligned}$$

Par parité, $(\hat{P}_l \delta_{\theta=\pi})(\theta) = (-1)^l (\hat{P}_l \delta_{\theta=0})(\theta)$. Par ailleurs $\delta_{\theta=0}$ est indépendant de φ donc se projette seulement sur $m = 0$:

$$(\hat{P}_l \delta_{\theta=0})(\theta) = \langle \theta, \varphi | Y_{l0} \rangle \langle Y_{l0} | 0, 0 \rangle = Y_{l0}(\theta, \varphi) \overline{Y_{l0}(0, 0)}$$

Donc

$$f(k, \theta) = -\frac{(2\pi)}{k} \sum_l \left(e^{is_l} (-1)^l + 1 \right) Y_{l0}(\theta, \varphi) \overline{Y_{l0}(0, 0)}$$

Finalement d'après (7.2.11) la section efficace totale est

$$\sigma_{tot} = \int_{S^2} |f(k, \theta)|^2 d\Omega = \frac{(2\pi)^2}{k^2} \sum_l \left| e^{is_l} (-1)^l + 1 \right|^2 |Y_{l0}(0, 0)|^2$$

Pour éliminer les termes non diagonaux $\sum_{l' \neq l}$, on a utilisé la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques $\langle Y_{l'm'} | Y_{lm} \rangle = \delta_{l',l} \delta_{m',m}$. On utilise maintenant que $|Y_{l0}(0)| = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2}$ et que

$$\begin{aligned} \left| e^{is_l} (-1)^l + 1 \right|^2 &= \left| -e^{i2\delta_l} + 1 \right|^2 = \left| e^{-i\delta_l} - e^{i\delta_l} \right|^2 \\ &= 4 \sin^2 \delta_l \end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \frac{(2\pi)^2}{k^2} \sum_l (4 \sin^2 \delta_l) \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \end{aligned}$$

□

Chapitre 8

Méthodes d'approximation ; résolution approchée

Sur l'intérêt des méthodes d'approximation :

- Certaines sont parfois indispensables, sans cela le problème serait insoluble.
- Certaines permettent de comprendre aussi le phénomène en termes simples, ou de mettre en évidence l'essentiel d'un phénomène.

On s'efforcera de bien préciser les conditions de validité de chaque méthode.

Pour simplifier la discussion, il y a deux grands types de problèmes que l'on cherche à résoudre en mécanique quantique : étant donné un Hamiltonien \hat{H} associé au système étudié,

1. **Problème stationnaire** : si \hat{H} est indépendant du temps, trouver les valeurs propres (niveaux d'énergie) et vecteurs propres (modes stationnaires), c'est à dire résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire $\hat{H}\psi = E\psi$. Voir Section 1.5.4 page 53.
2. **Problème d'évolution (non stationnaire)** : étant donné un état $\psi(0)$ à la date $t = 0$, calculer son évolution $\psi(t)$ à d'autres dates t , c'est à dire résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps $i\hbar d\psi/dt = \hat{H}\psi$.

Remarque : Les deux problèmes ne sont pas indépendants et sont même reliés en principe. Le problème 2 découle du problème 1, voir p.53. Le problème 1 découle du problème 2 par transformée de Fourier. Mais cela reste en principe car la solution n'est pas toujours très explicite. De plus les relations sont moins évidentes lorsque l'on a des solutions approximatives seulement. Qualitativement, il est correct de penser, en invoquant le principe d'incertitude $\Delta t \Delta E \simeq \hbar$ (page 91) que une erreur ΔE sur les valeurs propres permet de connaître l'évolution d'un état seulement pour des temps $t \leq \Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E}$, et inversement.

8.1 Théorie des perturbations stationnaires

Pour un problème stationnaire ou non stationnaire, l'idée est de séparer le Hamiltonien en deux parties : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$, telles que l'on sache résoudre le problème pour \hat{H}_0 , et

que $\lambda\hat{H}_1$ est considéré comme une petite correction (limite $\lambda \rightarrow 0$). On appelle l'opérateur \hat{H}_1 **la perturbation**. Ainsi on exprime les solutions du problème par un développement limité en λ .

Plus précisément :

Problème posé : Dans la théorie des perturbations stationnaires, le problème est de trouver les vecteurs propres $\psi_n(\lambda)$ et valeurs propres $E_n(\lambda)$ d'un Hamiltonien :

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad : \text{inconnus} \quad (8.1.1)$$

sachant que

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda \ll 1$ est très petit, $\hat{H}_0 = \hat{H}(0)$ est un opérateur dont on connaît le spectre, supposé discret et noté :

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad n \geq 0$$

avec $|n\rangle, n \in \mathbb{N}$ les vecteurs propres formant une base orthonormée et ε_n les valeurs étant classées par ordre croissant :

$$\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \quad \text{connues}$$

\hat{H}_1 est un autre opérateur appelé **perturbation** que l'on connaît par ses éléments de matrice dans la base $|n\rangle$:

$$\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle, \quad , n', n \geq 0 \quad : \text{connus}$$

En résumé on cherche des formules pour les valeurs propres $E_n(\lambda)$ et les composantes des vecteurs propres $\psi_n(\lambda)$ dans la base $|n\rangle$ pour $\lambda \ll 1$:

$$E_n(\lambda), \quad \langle n' | \psi_n(\lambda) \rangle \quad : \text{inconnus}$$

Remarque sur les dégénérescences Il se peut que N valeurs propres consécutives soient égales à une même valeur ε :

$$\varepsilon = \varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} = \dots = \varepsilon_{n+N-1}$$

Dans le cas $N \geq 2$ on dit que la valeur propre ε est **dégénérée** de **multiplicité** N .

Au contraire si $\varepsilon_{n-1} < \varepsilon_n < \varepsilon_{n+1}$ on dit que ε_n est **non dégénérée** ou **valeur propre simple**.

La situation de dégénérescence ($N \geq 2$) peut paraître exceptionnelle. Elle apparaît cependant assez souvent due à des symétries (i.e. invariance par un groupe non commutatif).

C'est le cas bien connu du spectre de l'atome d'hydrogène, où la symétrie est l'invariance par le groupe de rotation, voir chapitre 6.

Mais une dégénérescence dans le spectre peut aussi apparaître sans raison de symétrie. On peut en trouver en modifiant convenablement des paramètres externes à \hat{H}_0 .

8.1.1 Cas de niveaux non dégénérés

On présente ici la méthode dite de Rayleigh-Shrödinger.

Voir figure 8.1.1.

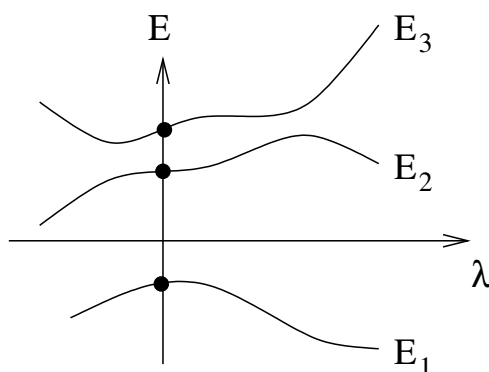


FIGURE 8.1.1 – Schéma des valeurs propres non dégénérées $E_n(\lambda)$. La théorie des perturbations exprime le développement limité de $E_n(\lambda)$ en $\lambda \simeq 0$.

Proposition 8.1.1. “Perturbation d’un niveau non dégénéré”. Si ε_n est une valeur propre non dégénérée de \hat{H}_0 (n est fixé ici) alors on peut écrire pour $\lambda \ll 1$:

$$E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots$$

où les premières corrections sont données par

$$E^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle \quad : \text{correction 1er ordre à l'énergie} \quad (8.1.2)$$

$$\langle n' | \psi^{(1)} \rangle = \frac{\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}, \quad n' \neq n \quad : \text{correction 1er ordre au vecteur propre}$$

et $\langle n | \psi^{(1)} \rangle = 0$.

$$E^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} \quad : \text{correction 2ème ordre à l'énergie} \quad (8.1.3)$$

Remarques :

- Le vecteur $|\psi^{(1)}\rangle$ s'exprime donc par ses composantes :

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} |n'\rangle \langle n' | \psi^{(1)} \rangle = \sum_{n' \neq n} \frac{|n'\rangle \langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}$$

- Pour le *niveau fondamental* ε_0 alors $(\varepsilon_0 - \varepsilon_{n'}) < 0$ donc $E^{(2)} \leq 0$. Par conséquent $E_0(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)}$ est une fonction concave. Voir figure 8.1.2.

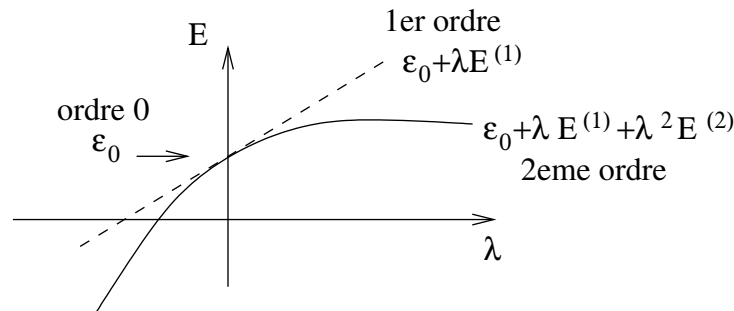


FIGURE 8.1.2 – Pour le niveau fondamental, $E_0(\lambda)$ est une fonction concave.

- (*) On peut calculer les termes à tout ordre. Mais cela devient compliqué. Il y a d'autres façon d'écrire le développement, plus maniables, utilisant la résolvante de \hat{H}_0 , cf méthode de Brillouin-Wigner, cf Ballentine [L.E90] p.268 ou messiah [Mes64]. On peut aussi utiliser des représentations graphiques des termes développés, appelé diagramme de Feynman (très utiles en théorie quantique des champs).

Démonstration. On a déjà remarqué que le vecteur propre est défini à une constante près, page 46. Comme $|\psi_n(0)\rangle = |n\rangle$, on peut fixer ce choix en imposant :

$$\langle n | \psi_n(\lambda) \rangle = 1$$

Ce choix entraîne que $\forall \lambda$,

$$1 = \langle n | \psi_n(\lambda) \rangle = \langle n | n \rangle + \lambda \langle n | \psi^{(1)} \rangle + \dots = 1 + \lambda \langle n | \psi^{(1)} \rangle + \dots$$

donc :

$$\langle n | \psi^{(i)} \rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots$$

Il suffit maintenant de ré-écrire eq.(8.1.1) :

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \right) (|n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \dots) = (\varepsilon_n + \lambda E^{(1)}) (|n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \dots)$$

de développer l'équation et d'identifier les coefficients¹ de λ^i pour $i = 0, 1, \dots$. Cela donne :

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad \hat{H}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \\ \lambda^1 : & \quad \hat{H}_0|\psi^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|n\rangle = \varepsilon_n|\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)}|n\rangle \\ \lambda^2 : & \quad \hat{H}_0|\psi^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\psi^{(1)}\rangle = \varepsilon_n|\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)}|\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)}|n\rangle \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Ensuite, on projette les équations sur les vecteurs non perturbés $|n'\rangle$, (cad que l'on multiplie par $\langle n'|$ et sachant que $\hat{H}_0|n'\rangle = \varepsilon_{n'}|n'\rangle$), donnant :

Pour λ^1 :

$$\varepsilon_{n'}\langle n'|\psi^{(1)}\rangle + \langle n'|\hat{H}_1|n\rangle = \varepsilon_n\langle n'|\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)}\langle n'|n\rangle$$

en particulier pour $n' = n$:

$$E^{(1)} = \langle n|\hat{H}_1|n\rangle \quad : \text{ correction 1er ordre à l'énergie}$$

et pour $n' \neq n$:

$$\langle n'|\psi^{(1)}\rangle = \frac{\langle n'|\hat{H}_1|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}, \quad n' \neq n \quad : \text{ correction 1er ordre au vecteur propre}$$

Pour λ^2 , on projette de même sur $|n\rangle$:

$$\varepsilon_n\langle n|\psi^{(2)}\rangle + \langle n|\hat{H}_1|\psi^{(1)}\rangle = \varepsilon_n\langle n|\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)}\langle n|\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)}$$

donc $E^{(2)} = \langle n|\hat{H}_1|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} \langle n|\hat{H}_1|n'\rangle \langle n'|\psi^{(1)}\rangle$ soit :

$$E^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'|\hat{H}_1|n\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} \quad : \text{ correction 2ème ordre à l'énergie}$$

□

8.1.2 Exemple : vibration anharmonique d'un atome

références : Cohen [CBF] Complément A_{XI} p.1100, Bransden [BC89] p.363.

Supposons qu'un atome de masse m vibre à une dimension x autour de sa position d'équilibre. Il se trouve donc dans un puits de potentiel $V(x)$, illustré sur la figure (2.2.1) page 99.

Nous avons effectué l'approximation linéaire (ou Harmonique) en ne gardant que la partie quadratique du potentiel, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Nous allons traiter ici le terme suivant correctif de eq.(2.2.1), par la théorie des perturbations.

1. On utilise le fait que si une série $0 = S(\lambda) = s_0 + s_1\lambda + s_2\lambda^2 + \dots$ est nulle alors chaque coefficient $s_i = 0$ est nul. La preuve est que $0 = \frac{d^i S}{ds^i}(0) = s_0$, mais aussi $0 = S'(0) = s_1$ etc

Pour simplifier l'exposé, nous allons supposer que le terme suivant en x^3 est nul, et ne traiter que le terme en x^4 .

La dynamique de la particule est donc décrite par le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4 \quad (8.1.4)$$

Pour appliquer la théorie des perturbations ci-dessus, on pose

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

dont on connaît déjà le spectre, c'est l'oscillateur Harmonique.

Le terme de perturbation est

$$\lambda\hat{H}_1 = \lambda\hat{x}^4$$

à condition que $\lambda \ll 1$.

Noter que si $\lambda < 0$, le potentiel n'est pas confinant, et le spectre est alors non discret. La théorie précédente ne s'applique que pour $\lambda \geq 0$.

On s'intéresse au niveau fondamental E_0 qui est non dégénéré.

Rappels sur l'oscillateur Harmonique : on a $\hat{H}_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$ avec

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\sigma = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

On déduit que la correction au premier ordre est d'après (8.1.2)

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle 0|\hat{H}_1|0\rangle = \int dx \langle 0|\hat{x}^4|x\rangle \langle x|0\rangle \\ &= \int dx x^4 |\langle x|0\rangle|^2 = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \int e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} x^4 dx = \frac{3}{4}\sigma^4 \end{aligned}$$

(c'est une intégrale Gaussienne, cf ??).

et au deuxième ordre d'après (8.1.3) :

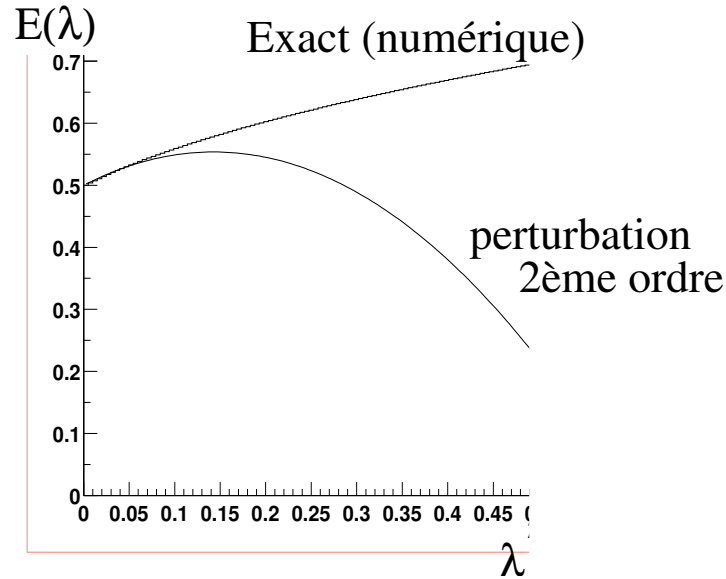
$$E^{(2)} = \sum_{n' \neq 0} \frac{|\langle n'|\hat{H}_1|0\rangle|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{n'}} = \dots = -\frac{21}{8} \frac{\sigma^8}{\hbar\omega}$$

(Le calcul plus compliqué, se fait grâce à l'algèbre des opérateurs a, a^+ . Il faut exprimer $|n'\rangle$, $\hat{H}_1 = \hat{x}^4$ à partir de a^+ et $|0\rangle$).

Et l'on a au final

$$E_0 = \varepsilon_0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

Voir figure 8.1.3, où ce résultat est comparé à un résultat exact obtenu de façon numérique.

FIGURE 8.1.3 – $E_0(\lambda)$ pour eq(8.1.4). $\hbar = 1$, $m = 1$, $\omega = 1$.

8.1.3 Cas de niveaux dégénérés

Proposition 8.1.2. “Perturbation d’un niveau dégénéré”. Supposons que la valeur propre ε de \hat{H}_0 soit dégénérée avec la multiplicité N . On note $|n, i\rangle$, $i = 1, \dots, N$ des vecteurs propres associés à cette valeur propre ε et orthogonaux entre eux. Autrement dit, ces N vecteurs forment une base o.n. de l’espace propre dégénéré, noté \mathcal{H}_ε , qui est un espace de dimension N .

Alors au premier ordre, les N vecteurs propres de \hat{H} noté $|\psi_k^{(0)}\rangle$, $k = 1 \dots N$ appartiennent à cet espace \mathcal{H}_ε . Leurs composantes $\psi_k^i = \langle n, i | \psi_k^{(0)} \rangle$, $i = 1, \dots, N$ et leur énergie notée $(\varepsilon + \lambda E_k^{(1)})$ sont solution de “l’équation aux valeurs propres” de la matrice $N \times N$ d’éléments $H_{i,j} := \langle n, i | \hat{H}_1 | n, j \rangle$ c’est à dire :

$$\sum_j H_{i,j} \psi_k^j = E_k^{(1)} \psi_k^i \quad \forall i, k = 1, \dots, N$$

En général, on s’attend à ce que les corrections à l’énergie $E_k^{(1)}$, $k = 1 \dots N$ soient différentes c’est à dire que la perturbation enlève la dégénérescence. Lorsque la dégénérescence est due à une symétrie, il faut pour cela que le terme \hat{H}_1 ne respecte pas cette symétrie. Voir figure 8.1.4.

Remarques :

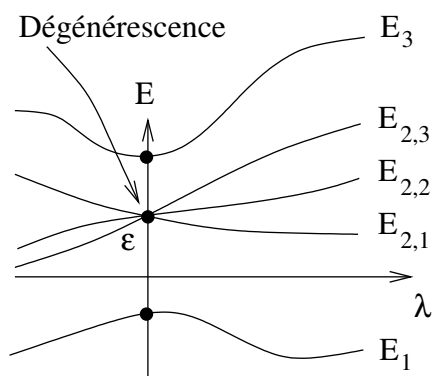


FIGURE 8.1.4 – La dégénérescence en $\lambda = 0$ de multiplicité $N = 3$ est levée par la perturbation.

- Ce résultat simple a de nombreuses applications, voir TD :
 - TD : Molécule H-Cl dans un champ électrique : rotateur rigide, cf Bransden [BC89] p531-533.
 - TD : Effet Starck, champ électrique sur atome H. polarisabilité.
 - TD : Structure fine de l'atome H, à mentionner ou TD ?,
 - Structure hyperfine : cf Cohen Chapitre XII.
 - TD : exemple : Oscillateur harmonique 2D isotrope, perturbé par ...

Démonstration. On cherche à décrire la modification de la valeur propre ε pour $\lambda \neq 0$. On écrit comme ci-dessus :

$$E(\lambda) = \varepsilon + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots$$

(cette fois ci, on introduit $|\psi^{(0)}\rangle$ car il n'y a pas de raison que $|\psi(\lambda)\rangle \rightarrow |n, i\rangle$ si $\lambda \rightarrow 0$. Le vecteur $|\psi^{(0)}\rangle$ est inconnu). On obtient à nouveau

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(0)}\rangle = \varepsilon |\psi^{(0)}\rangle \\ \lambda^1 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |\psi^{(0)}\rangle = \varepsilon |\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(0)}\rangle \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

On projette la première équation (λ^0) sur les états $|n'\rangle \notin \mathcal{H}_\varepsilon$, $\varepsilon_{n'} \neq \varepsilon_n$, donnant :

$$(\varepsilon_{n'} - \varepsilon) \langle n' | \psi^{(0)} \rangle = 0$$

donc $\langle n' | \psi^{(0)} \rangle = 0$. Ainsi le vecteur $|\psi^{(0)}\rangle \in \mathcal{H}_\varepsilon$ appartient à l'espace propre dégénéré. Ce vecteur inconnu est caractérisé par ses N composantes $\langle n, i | \psi^{(0)} \rangle, i = 1, \dots, N$. On projette la deuxième équation (λ^1) sur le vecteur de base $|n, i\rangle \in \mathcal{H}_\varepsilon$:

$$\varepsilon \langle n, i | \psi^{(1)} \rangle + \langle n, i | \hat{H}_1 | \psi^{(0)} \rangle = \varepsilon \langle n, i | \psi^{(1)} \rangle + E^{(1)} \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle$$

ainsi :

$$\langle n, i | \hat{H}_1 | \psi^{(0)} \rangle = E^{(1)} \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle, \quad \forall i = 1, \dots, N$$

qui s'écrit

$$\sum_{j=1}^N \langle n, i | \hat{H}_1 | n, j \rangle \langle n, j | \psi^{(0)} \rangle = E^{(1)} \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle, \quad \forall i = 1, \dots, N$$

□

8.2 Théorie des perturbations dépendant du temps

référence : Bransden [BC89] p410-426 : théorie et Bransden p494-492 : application.

On va ici illustrer la théorie des perturbations dépendant du temps, en étudiant un atome avec un électron soumis à une onde électromagnétique extérieure, dans l'approximation dipolaire électrique. Voir figure 8.2.1. On cherche à décrire l'évolution résultante de l'atome dans le cadre de la mécanique quantique.

En particulier, on observera si l'atome absorbe de l'énergie du champ ou si au contraire il perd de l'énergie.

Ce problème rentre dans le cadre très général de l'étude des interactions entre le rayonnement et la matière.

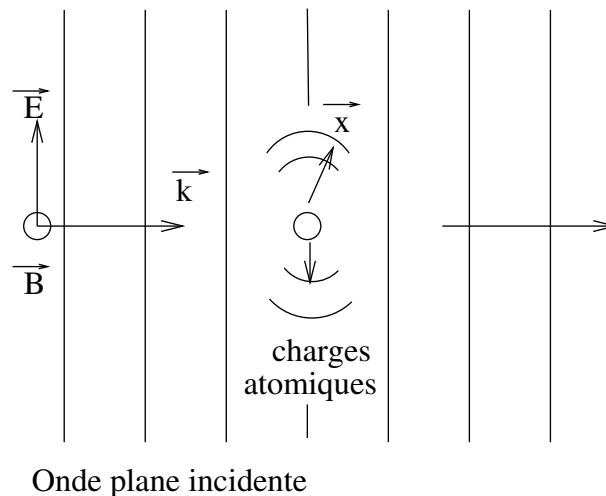


FIGURE 8.2.1 – Action d'une onde plane incidente sur un atome : il se met à osciller dans la direction du champ électrique incident.

8.2.1 Rappels sur l'approximation dipolaire électrique

8.2.1.1 Onde plane

ref : Cohen T p.1300 [CBF].

Une onde plane *dans le vide*, de vecteur d'onde \vec{k} , de fréquence ω est décrite par les champs électriques et magnétiques :

$$\boxed{\vec{E}(\vec{x}, t) = \Re \left(\vec{E}_{\vec{k}, \omega} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\vec{x}} \right), \quad \vec{E}_{\vec{k}, \omega} \in \mathbb{C}^3} \quad (8.2.1)$$

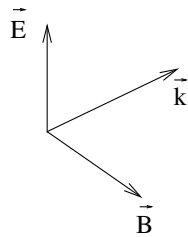
$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \Re \left(\vec{B}_{\vec{k}, \omega} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\vec{x}} \right), \quad \vec{B}_{\vec{k}, \omega} \in \mathbb{C}^3$$

avec les contraintes (portant sur les vecteurs complexes) :

$$c = \frac{\omega}{|\vec{k}|}$$

$$|\vec{B}| = \frac{1}{c} |\vec{E}|$$

$$\vec{B} = \frac{1}{c} \left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \wedge \vec{E} \right)$$



Il reste comme paramètre libre les deux phases du vecteur complexe $\vec{E}_{\vec{k}, \omega}$ dans le plan orthogonal à \vec{k} . Ces deux phases décrivent la polarisation du champ électromagnétique. Par exemple polarisation Droite/Gauche ou rectiligne y/z.

Le champ \vec{B} oscille donc avec le champ \vec{E} .

8.2.1.2 Forces électriques et magnétiques

On remarque le facteur $1/c$ pour l'intensité du champ \vec{B} par rapport au champ \vec{E} . Cela a la conséquence suivante : pour une particule de charge q , de vitesse v , l'intensité des forces électriques et magnétiques sont respectivement : $F_E = qE$, $F_B = |q\vec{v} \wedge \vec{B}| = qvB = q\frac{v}{c}E = F_E \cdot \left(\frac{v}{c}\right)$.

Donc pour des vitesses non relativistes $v \ll c$, la force magnétique est négligeable :

$$F_B \ll F_E$$

on ne gardera donc que la force électrique $\vec{F}_E = q\vec{E}(\vec{x}, t)$ s'exerçant sur l'atome.

8.2.1.3 Approximation dipolaire électrique

Une approximation supplémentaire est que le champ $\vec{E}(\vec{x}, t)$ peut être considéré comme uniforme près de l'atome, dans les cas qui vont nous intéresser.

La fonction d'onde subit à l'instant t un champ électrique quasiment uniforme (i.e indépendant de \vec{x}) dont la valeur est celle à la position \vec{x}_0 de l'atome :

$$\vec{E}(\vec{x}, t) \simeq \vec{E}(\vec{x}_0, t)$$

Cette approximation n'est pas valable pour les longueurs d'ondes trop petites, c'est à dire à partir des rayons X.

La force électrique dérive alors d'un potentiel scalaire H_1 linéaire :

$$\begin{aligned}\vec{F}_E &= -\overrightarrow{\text{grad}}(H_1) = q\vec{E}(\vec{x}_0, t) \\ H_1(\vec{x}, t) &= -q\vec{x} \cdot \vec{E}(\vec{x}_0, t) = -\vec{D} \cdot \vec{E}(\vec{x}_0, t)\end{aligned}$$

où $\vec{D} = -q\vec{x}$ est appelé le **moment dipolaire électrique** de l'atome à un électron.

Dans cette **approximation dipolaire** le Hamiltonien de l'électron s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

avec

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)|\hat{x}|} : \text{Hamiltonien non perturbé}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1(t) &= -q\hat{x} \cdot \vec{E}(t) : \text{perturbation dépendant du temps} \\ &= \hat{W}e^{i\omega t} + \hat{W}^+e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

avec :

$$\hat{W} = -\frac{1}{2}q\hat{x} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\vec{k},\omega} e^{-i\vec{k}\vec{x}_0}$$

On a utilisé (8.2.1):

$$\vec{E}(t) = \vec{E}(\vec{x}_0, t) = \Re \left(\vec{\mathbf{E}}_{\vec{k},\omega} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\vec{x}_0} \right) = \frac{1}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\vec{k},\omega} e^{i\omega t} e^{-i\vec{k}\vec{x}_0} + \text{adjoint} \right), \quad \vec{\mathbf{E}}_{\vec{k},\omega} \in \mathbb{C}^3$$

Remarque :

- Dans l'expression de \hat{W} ci-dessus l'opérateur est seulement \hat{x} .
- Une dérivation plus rigoureuse de l'expression de \hat{H} à partir de l'expression eq.(3.2.4) est donnée dans Cohen T [CBF], page.1298.

8.2.2 Effet d'une onde cohérente ; transitions dans le spectre discret

Supposons que à l'instant $t = 0$, l'atome soit dans un état

$$|\psi(t = 0)\rangle = |\psi_a\rangle$$

qui est un des états stationnaires du spectre discret de \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$$

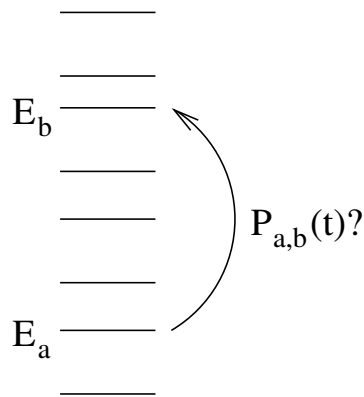
On suppose que le champ électromagnétique (8.2.1) apparaît pour $t > 0$, et que son action est assez faible pour le traiter comme une perturbation.

8.2.2.1 Question :

Quelle est l'expression de l'évolution de l'état $|\psi(t)\rangle$ pour $t > 0$? (à exprimer dans la base $|\psi_k\rangle_k$ des états stationnaires de \hat{H}_0).

En particulier, quelle est la probabilité de transition vers un autre état $|\psi_b\rangle$ du spectre discret :

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |\langle \psi_b | \psi(t) \rangle|^2 = ?$$



8.2.2.2 Réponse :

pour cela on décompose $|\psi(t)\rangle$ dans la base propre de \hat{H}_0 :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \underbrace{|\psi_k\rangle e^{-iE_k t/\hbar}}_{\text{Evolution sous } \hat{H}_0} \underbrace{c_k(t)}_{\text{Coef inconnu}}$$

où $c_k(t) \in \mathbb{C}$ sont des composantes inconnues.

À $t = 0$ on a

$$c_k(0) = \delta_{k,a} \quad (8.2.2)$$

On a aussi :

$$1 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \sum_k |c_k(t)|^2$$

et

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |\langle \psi_b | \psi(t) \rangle|^2 = |c_b(t)|^2$$

Pour pouvoir considérer le champs \vec{E} comme une perturbation, on remplace \vec{E} par $\vec{E} = \lambda \vec{E}_0$ dans l'expression de \hat{H} , avec λ un paramètre sans dimension, et \vec{E}_0 un champ fixe. On écrit aussi $\hat{H}_1(t) = -q \vec{x} \cdot \vec{E}_0(t)$, et

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$$

Cela nous permet juste de faire des développements limités pour $\lambda \rightarrow 0$. L'équation de Schrödinger

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \right) |\psi(t)\rangle$$

donne alors :

$$\begin{aligned} \sum_k |\psi_k\rangle e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \left(-\frac{i}{\hbar} E_k c_k + \frac{dc_k}{dt} \right) &= -\frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t) \right) \left(\sum_k |\psi_k\rangle e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} c_k \right) \\ &= \sum_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} c_k \left(-\frac{i}{\hbar} E_k |\psi_k\rangle - \frac{i}{\hbar} \lambda \hat{H}_1(t) |\psi_k\rangle \right) \end{aligned}$$

soit en multipliant par $\langle \psi_b |$:

$$\frac{dc_b(t)}{dt} = -\lambda \frac{i}{\hbar} \sum_k c_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{i\frac{E_b t}{\hbar}} \langle \psi_b | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle \quad (8.2.3)$$

On notera l'élément de matrice de la perturbation :

$$H_{b,k}(t) = \langle \psi_b | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle$$

et la **fréquence de Bohr** :

$$\omega_{b,k} = \frac{E_b - E_k}{\hbar}$$

L'équation (8.2.3) est rigoureusement équivalente à l'équation de Schrödinger. On peut la développer en puissances de λ . On pose :

$$c_k(t) = c_k^{(0)} + \lambda c_k^{(1)} + \lambda^2 c_k^{(2)} + \dots \quad (8.2.4)$$

Cela donne :

$$\begin{aligned} \lambda^0 : \quad \frac{dc_b^{(0)}}{dt} &= 0 \\ \lambda^1 : \quad \frac{dc_b^{(1)}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k c_k^{(0)}(t) e^{i\omega_{b,k}t} H_{b,k}(t) \\ &\vdots \end{aligned}$$

La résolution tenant compte des conditions initiales (8.2.2), donne :

$$\begin{aligned} c_b^{(0)}(t) &= \delta_{b,a} \\ c_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{b,a}t'} H_{b,a}(t') dt' \quad \text{etc} \end{aligned}$$

donc au premier ordre $|c_b(t)|^2 = \lambda^2 \left| c_b^{(1)}(t) \right|^2$ et la réponse à la question est :

$$\boxed{P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{b,a}t'} H_{b,a}(t') dt' \right|^2, \quad b \neq a}$$

Pour l'application qui nous concerne, $\lambda H_1(t) = W e^{i\omega t} + W^+ e^{-i\omega t}$. Donc pour $a \neq b$,

$$P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| W_{b,a} \int_0^t e^{i\Omega_+ t'} dt' + W_{b,a}^\dagger \int_0^t e^{i\Omega_- t'} dt' \right|^2$$

avec

$$\Omega_\pm := \omega_{b,a} \pm \omega : \quad \text{désaccord de fréquences}$$

Ensuite, on utilise les formules suivantes :

$$\int_0^t e^{i\Omega t'} dt' = \frac{e^{i\Omega t} - 1}{i\Omega},$$

Soit

$$F(t, \Omega) := \left| \frac{e^{i\Omega t} - 1}{i\Omega} \right|^2 = \begin{cases} \frac{4 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2} : & \text{si } \Omega \neq 0 \\ t^2 : & \text{si } \Omega = 0 \end{cases} \quad (8.2.5)$$

On a $\int F d\Omega = 2\pi t$ et

$$F(t, \Omega) \longrightarrow 2\pi t \delta(\Omega), \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (8.2.6)$$

Voir figures 8.2.2 et 8.2.3.

On obtient donc :

$$P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| W_{ba} \frac{e^{i\Omega_+ t} - 1}{\Omega_+} + W_{ba}^+ \frac{e^{i\Omega_- t} - 1}{\Omega_-} \right|^2 \quad (8.2.7)$$

dont l'allure est donné sur la figure 8.2.4.

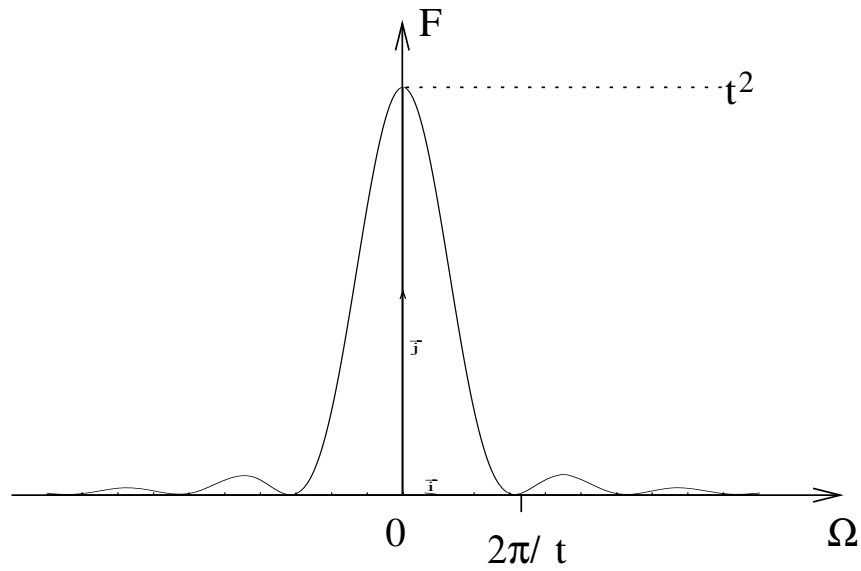


FIGURE 8.2.2 – Graphe de $F(t, \Omega)$ à t fixé, voir eq(8.2.5). Noter que la largeur du pic est de l'ordre de $1/t$.

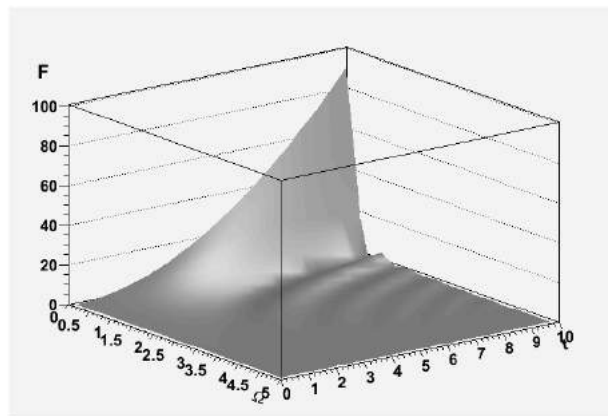


FIGURE 8.2.3 – Graphe de $F(t, \Omega)$, voir eq(8.2.5).

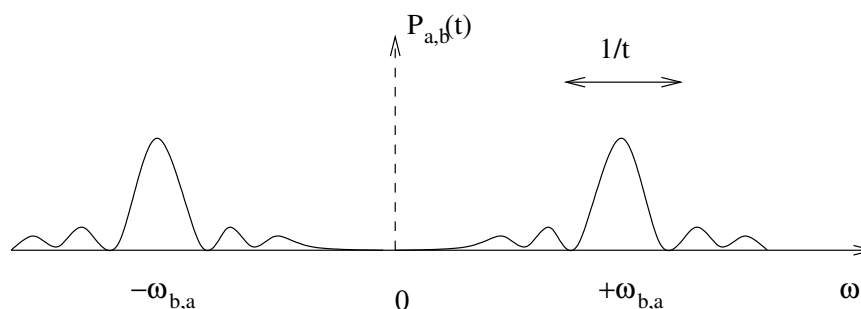


FIGURE 8.2.4 – Allure de $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$ à t fixé et en fonction de ω , fréquence de l'onde incidente. Pour $1 \ll \omega_{ab}t$, les deux pics centraux provenant de chaque terme de (8.2.7) sont bien séparés.

Remarque 8.2.1. Dans le cas qui nous intéresse, $|\omega_{ab}| > 10^{12} Hz$ dans l'infrarouge, le visible ou l'ultraviolet, et la durée t du pulse de radiation, est suffisamment grande pour avoir $|\omega_{b,a}t| \gg 1$, et donc une bonne séparation des deux termes de eq(8.2.7).

Remarque 8.2.2. En fait la décroissance est mauvaise (en $1/\Omega^2$) et cela est dû à l'allumage brutal du terme de perturbation (c'est le phénomène de Gibbs). La décroissance serait bien meilleure si la perturbation apparaît et disparaît de façon progressive en temps (de façon C^∞).

Ainsi $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$ est important que si l'un ou l'autre des dénominateurs est proche de zéro, c'est à dire si $\omega \simeq \pm\omega_{b,a}$, et alors :

$$\boxed{P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) \simeq \frac{|W_{ba}|^2}{\hbar^2} F(t, \Omega)} \quad (8.2.8)$$

Voir figures 8.2.5, 8.2.2, montrant la croissance de $P_{ab}(t)$ et ses oscillations si il y a désaccord de fréquences.

8.2.2.3 Interprétation des résonances :

Supposons $\omega > 0$ (car la situation est symétrique). La résonance se produit pour $\omega = \pm\omega_{b,a} = \pm \frac{E_b - E_a}{\hbar}$ soit $E_b = E_a \pm (\hbar\omega)$. Cela signifie qu'il y a une transition préférentielle de l'état E_a vers un état E_b si $E_b = E_a \pm (\hbar\omega)$.

1. Dans le cas $E_b = E_a + \hbar\omega > E_a$, **l'atome a gagné l'énergie $\hbar\omega$ de la part du champ électromagnétique classique.**
2. Dans le cas $E_b = E_a - \hbar\omega > E_a$ **l'atome a cédé l'énergie $\hbar\omega$ au champ électromagnétique classique.**

Finalement, on a retrouvé les relations de Bohr (1913).

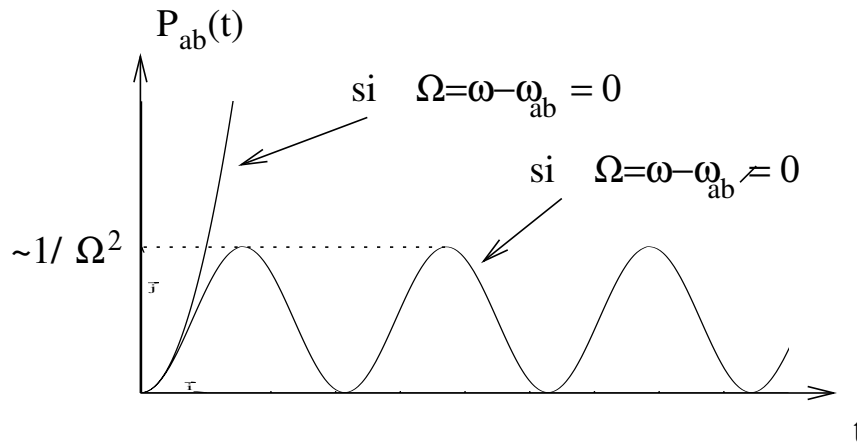


FIGURE 8.2.5 – Allure de la probabilité de transition $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$, à $\Omega = \omega - \omega_{a,b}$ fixé, selon que $\Omega \neq 0$ ou $\Omega = 0$. Dans ce dernier cas, le résultat est valable tant que $P_{ab}(t) \ll 1$.

Remarque

- Si on traitait le champ par la mécanique quantique [CTDRG87, CTDRG88], dans le cadre de l'électrodynamique quantique (Q.E.D.), on montrerait dans le cas 1) que **l'atome a absorbé un photon d'énergie $\hbar\omega$** , et dans le cas 2) on montrerait que **l'atome a émit un photon d'énergie $\hbar\omega$** . C'est le phénomène **d'émission stimulée**.
- Les résultats que nous venons d'obtenir sont très analogues aux phénomènes de résonance en mécanique classique linéaire (résonances et battements). C'est le même phénomène ici retrouvé dans le cadre des états quantiques.
- On a $|W_{ab}| = |W_{ba}|$ montrant que dans cette description, le processus d'absorption et émission stimulée ont la même probabilité. En réalité ce n'est pas vrai, et la différence se calcule dans le cadre de la Q.E.D. qui considère le champ comme un système dynamique.

Néanmoins, il est possible de calculer cette différence sans rentrer dans la complexité de la Q.E.D.. C'est l'argument d'Einstein qui utilise des considérations de physique statistique pour la dynamique du champ et de l'atome. Il montre alors la nécessité du phénomène d'**émission spontanée** qui est que l'atome peut transiter de E_b vers $E_a < E_b$ en émettant un photon, même en l'absence de champ extérieur.

Ce phénomène a un équivalent classique : la radiation de Larmor d'une charge accélérée.

Cf Bransden p499-501. @@ (à rédiger ici).

8.2.2.4 Expression de $|W_{ba}|^2$

La probabilité de transition $P_{ab}(t)$ eq(8.2.8), dépend de l'élément de matrice :

$$W_{ba} = \langle \psi_b | \frac{e}{2} \hat{x} \cdot \vec{E}_{\vec{k}, \omega} | \psi_a \rangle$$

On note $\vec{D}_{ba} = -e\langle\psi_b|\hat{x}|\psi_a\rangle$ les éléments de matrice de l'opérateur **moment dipolaire électrique** $\vec{D} = -e\vec{x}$, et θ l'angle entre \vec{D}_{ba} et \vec{E} . L'intensité de l'onde incidente I est obtenue par la norme du vecteur de Poynting $\vec{S} = c^2\varepsilon_0\vec{E} \wedge \vec{B}$:

$$I = \text{flux d'énergie incident} = \langle |\vec{S}| \rangle = \frac{\varepsilon_0 c}{2} |\vec{E}_\omega|^2 : \text{intensité de l'onde incidente}$$

Alors :

$$|W_{ba}|^2 = \frac{1}{4} |\vec{E}_{\vec{k},\omega}|^2 |\vec{D}_{ba}|^2 \cos^2 \theta \quad (8.2.9)$$

$$= \frac{I}{2\varepsilon_0 c} |\vec{D}_{ba}|^2 \cos^2 \theta \quad (8.2.10)$$

Le résultat (8.2.10) montre que *l'influence du champ \vec{E} sur l'atome est directive à cause du terme $\cos^2 \theta$* : l'absorption d'énergie ou l'émission d'énergie se fait de façon privilégiée si le moment dipolaire électrique \vec{D}_{ba} est parallèle à \vec{E} . Voir figure (8.2.6).

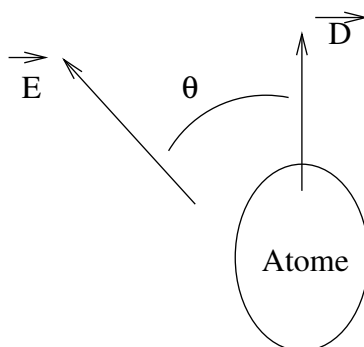


FIGURE 8.2.6 –

Nous discuterons au chapitre suivant le terme $|D_{ab}|^2$ qui est souvent nul pour des raisons de symétries. (**règles de sélections**).

8.2.3 Effet d'une onde incohérente

Nous supposons toujours l'atome soumis à l'influence d'une onde électromagnétique à partir de $t = 0$. Mais maintenant, nous supposons l'**onde incohérente**, c'est à dire que c'est une superposition d'onde planes de différentes fréquences ω , (avec des déphasages aléatoires).

C'est le cas de la lumière émise par une ampoule par exemple, où cette lumière est la superposition de nombreux trains d'ondes provenant de la désexcitation indépendantes de nombreux atomes.

Au contraire un faisceau cohérent (dans une certaine limite) est produit par un dispositif LASER.

Du fait de l'indépendance statistique des ondes planes composant un faisceau incohérent, **on somme les probabilités** (et non pas les amplitudes).

8.2.3.1 Question :

Dans le cas d'un faisceau incident incohérent, contenant des fréquences proches de ω_{ab} , quelle est la probabilité de transition de l'état atomique $|\psi_a\rangle$ vers un autre état $|\psi_b\rangle$ du spectre discret :

$$P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) = ?$$

8.2.3.2 Réponse

On a

$$P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) = \int_0^\infty P_{ab}(t) d\omega$$

on utilise (8.2.8), (8.2.6) et (8.2.10), donnant :

$$P_{ab}^{inc}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |W_{ba}|^2 t = \frac{\pi I}{\hbar^2 c \varepsilon_0} \cos^2 \theta |D_{ab}|^2 t$$

où I est l'intensité de l'onde incidente à la fréquence ω_{ab} .

qui n'est valable bien sûr tant que $P \ll 1$ (car on utilise la théorie de perturbation qui suppose cela). La croissance $P_{ab}^{inc}(t)$ est donc linéaire. (Alors que $P_{ab}(t)$ était quadratique dans le cas cohérent).

On définit :

$$T_{ab} = \frac{dP_{ab}^{inc}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |W_{ba}|^2 = \text{constante} \quad : \text{taux de transition}$$

et

$$\sigma_{ab} = \frac{T_{ab}}{I} (\hbar\omega_{ab}) \quad : \text{section efficace d'absorption}$$

Si la radiation incidente est non polarisée et isotrope, c'est à dire si les trains d'ondes ont des polarisations et directions indépendantes, on obtient :

$$T_{ab} = \frac{I}{3\hbar^2 c \varepsilon_0} |D_{ab}|^2$$

Démonstration. Il faut faire la moyenne sur les directions. @@

□

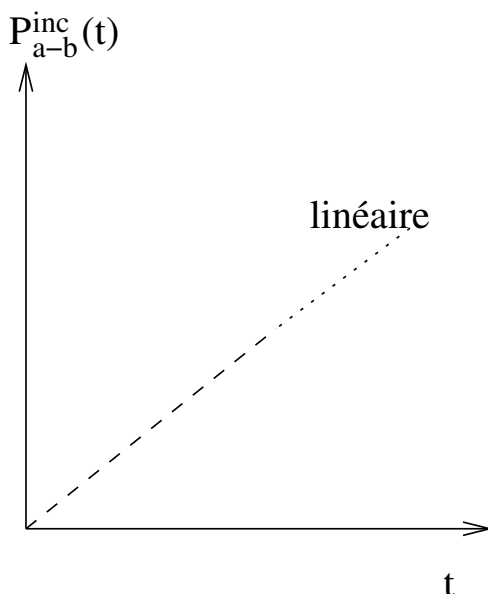


FIGURE 8.2.7 – Loi linéaire de la transition induite par un faisceau incohérent.

Exercice (TD) : @@ Bransden p508, la loi de somme de Thomas Reiche Kuhn.

8.2.3.3 Loi de décroissance

@@

Bransden p509, distribution Lorentzienne, partie imaginaire de E .

8.2.4 Transition vers les continuum; La photo-ionisation; Effet photoélectrique

On considère toujours le même modèle que précédemment, mais cette fois ci, on s'intéresse à la transition de l'état fondamental d'énergie E_a (état lié) vers un état du continuum d'énergie $E_b \gg E_a$, qui est un état non lié, où l'électron de l'atome est libéré et part, voir figure 1.5.2, page 56.

Dans l'état final, l'atome est donc ionisé.

On notera

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} \quad : \text{densité de niveaux du continuum par unité de volume}$$

la densité de niveau qui est le nombre de niveaux par intervalle d'énergie et unité de volume, que l'on supposera constante autour de E_b .

On supposera aussi $|W_{ab}|^2$ constante autour de E_b .

Voir figure 8.2.8.

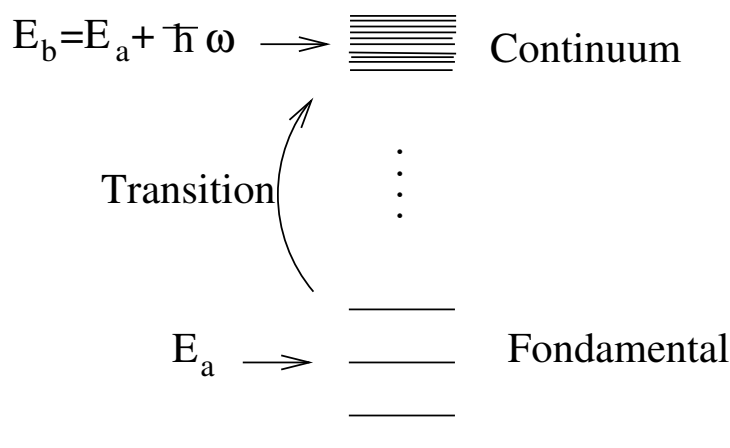


FIGURE 8.2.8 –

Question : En sommant sur les probabilités $P_{a \rightarrow b}^{inc}(t)$ (somme sur les états finaux b), donner $P_{a \rightarrow cont}(t)$ qui est la probabilité de ionisation de l'atome ?

Solution

$$\begin{aligned}
 P_{a \rightarrow cont} &= \sum_b P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) \\
 &= \int P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) \rho(E) dE \quad \text{car } dn = \frac{dn}{dE} dE = \rho(E) dE
 \end{aligned}$$

Donc, comme $\frac{dE}{d\Omega} = \hbar$, $P_{a \rightarrow cont} = \hbar \int P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) \rho(E) d\Omega$,

$$P_{a \rightarrow cont}(t) = \rho(E_b) \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ab}|^2 t$$

Le taux de transition est

$$T_{a \rightarrow cont} = \frac{dP_{a \rightarrow cont}(t)}{dt} = \rho(E_b) \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ab}|^2$$

Ce dernier résultat s'appelle **la règle d'or de Fermi**.

8.2.4.1 Remarques

- Noter que cette probabilité est proportionnelle au temps t (tant que $P_{a \rightarrow cont} \ll 1$ bien sûr), et aussi proportionnelle à la densité de niveaux $\rho(E_b)$.

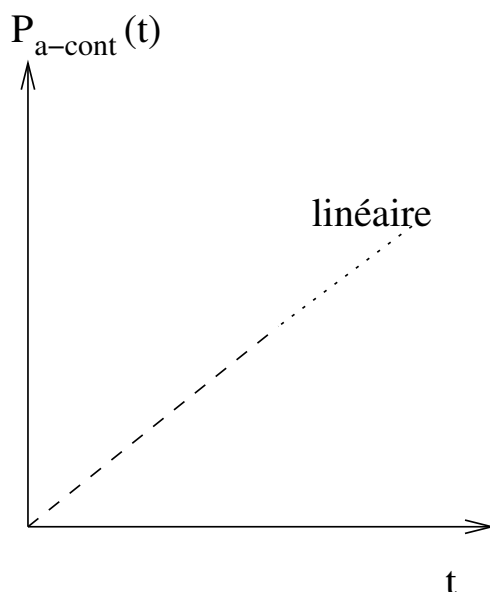


FIGURE 8.2.9 – Loi linéaire de la transition induite par un faisceau cohérent vers un continuum d'états.

- (TD) Si l'énergie cinétique finale est très supérieure à l'énergie potentielle alors $E \simeq \frac{p^2}{2m}$ comme pour une particule libre. La densité de niveaux est (voir TD, ou chapitre 1 @@) :

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{2\pi}{h^3} (2m) V p$$

où V est le volume où se trouve la particule libérée (V grand et n'apparaîtra pas à la fin).

on obtient alors @@ (Bransden p519), pour la **section efficace différentielle** d'ionisation (section efficace par unité d'angle solide) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega) = 32\alpha \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{Z}{k a_a} \right)^5 \cos^2 \theta$$

Pour un faisceau non polarisé, on obtient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega) = 16\alpha \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{Z}{k a_a} \right)^5 \sin^2 \Theta$$

où Θ est l'angle entre \vec{k} et l'axe de faisceau incident.

- La section efficace totale (intégrée sur toutes les directions) est :

$$\sigma(\omega) = \frac{16\pi\sqrt{2}}{3} \alpha \left(\frac{Z}{a_0} \right)^5 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{7/2}$$

- courbes expérimentales @@

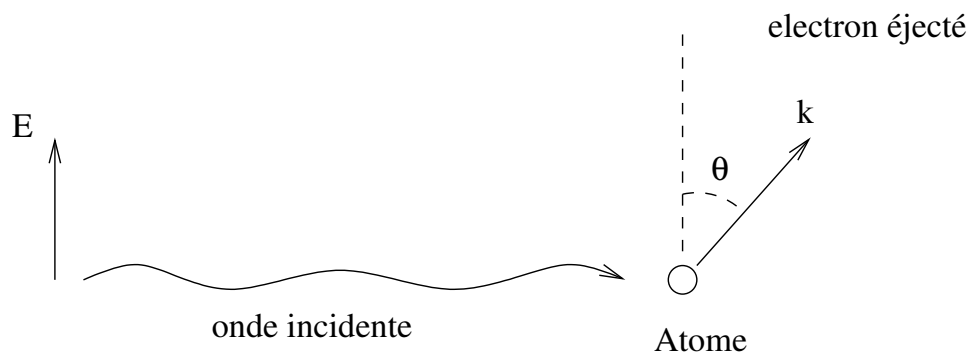


FIGURE 8.2.10 – Diffusion de l'onde électromagnétique polarisée rectiligne, sur un atome, éjectant un électron dans le vecteur impulsion \vec{k} .

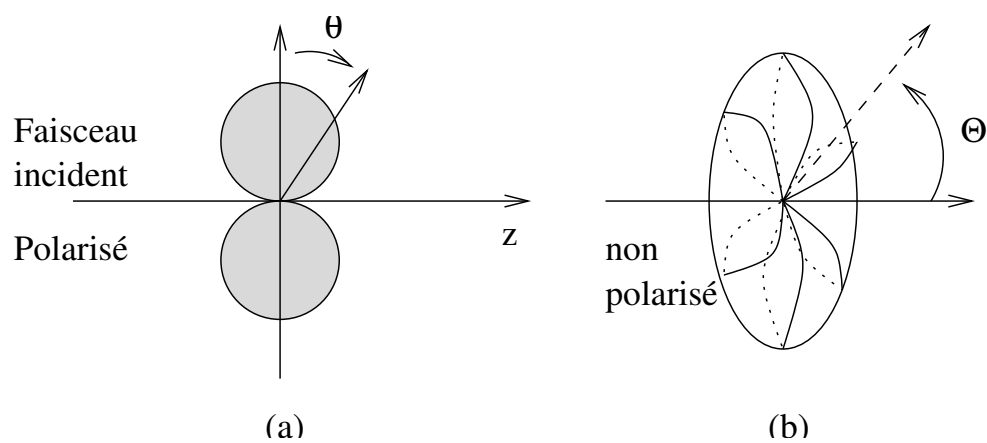


FIGURE 8.2.11 – Distribution angulaire de probabilité de l'électron éjecté lors de l'ionisation, dans le cas (a) d'un faisceau polarisé selon z ou (b) d'un faisceau non polarisé.

Exercices

- TD : Photo-désintégration du deuton, Bransden p520 @@
- TD : Théorie élémentaire de la constante diélectrique $\varepsilon(\omega)$.

8.3 Méthodes variationnelles**8.3.1 Méthode variationnelle pour problèmes stationnaires**

ref : Ballentine [L.E90]p.270.

Le résultat que nous allons montrer est très simple, mais très utile dans de nombreux problèmes de physique quantique, où il est impossible de connaître la solution exacte.

8.3.1.1 Propriété

Théorème 8.3.1. *L'énergie fondamentale de l'opérateur \hat{H} est donnée par*

$$E_0 = \min_{\phi \in \mathcal{H}, \phi \neq 0} \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (8.3.1)$$

c'est à dire E_0 est le minimum de l'énergie moyenne obtenue sur tous les états quantiques possibles.

Démonstration. si le spectre de \hat{H} est : $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$, on a $|\phi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \phi \rangle$, et $E_0 \leq E_n$ donc :

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \sum_n E_n |\langle \phi | \psi_n \rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle \phi | \psi_n \rangle|^2 = E_0 \langle \phi | \phi \rangle$$

Donc $E_0 \leq \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$. Dans le cas de l'état fondamental $\phi = \psi_0$, on a égalité. □

□

Cette propriété ne dit en fait rien d'autre que : la moyenne d'une série de nombre est plus grande que le plus petit des nombres de cette série.

8.3.1.2 Méthode variationnelle

Dans un problème où l'on cherche à estimer l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ et l'énergie E_0 d'un Hamiltonien \hat{H} :

1. On choisit un famille d'états quantiques $|\phi_\mu\rangle$ appelée **famille d'essai**, dépendant d'un paramètre μ , ou de plusieurs paramètres.

2. On calcule $E_\mu = \frac{\langle \phi_\mu | \hat{H} | \phi_\mu \rangle}{\langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle}$ et on cherche la valeur μ^* qui rende E_μ minimum. Voir figure 8.3.1.
3. On “espère” alors que $|\phi_{\mu^*}\rangle$ sera une bonne approximation de l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ inconnu, et que E_{μ^*} sera une bonne approximation de son énergie E_0 .

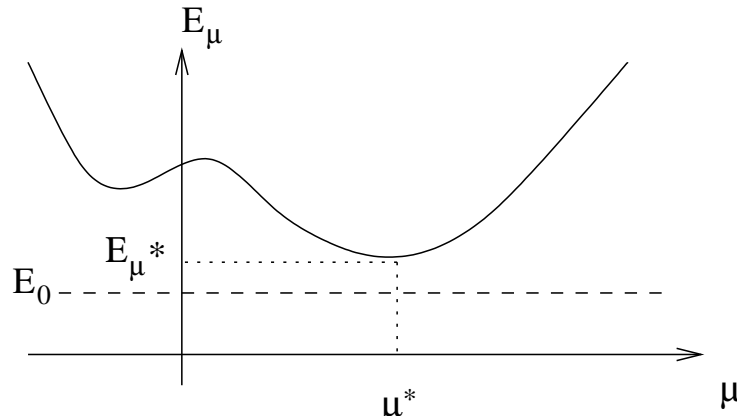


FIGURE 8.3.1 – Illustre la méthode variationnelle : Pour estimer E_0 , on recherche le minimum de $E_\mu = \langle \phi_\mu | \hat{H} | \phi_\mu \rangle / \langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle$ en fonction de μ .

Remarque 8.3.2. Dans de nombreux problèmes importants (ex.. théorie B.C.S. de la supraconductivité) cette méthode est irremplaçable et correspond souvent à la “**théorie du champ moyen**”. Cependant la difficulté est de choisir la “bonne” famille d’essai sur des critères d’arguments physiques (pour bien approcher E_0), et aussi de calculabilité (il faut pouvoir calculer la moyenne). Souvent les calculs se font à l’ordinateur.

8.3.1.3 Exemple : vibration anharmonique d’un atome (TD)

On reprend l’exemple (8.1.4) page 314, avec

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4$$

pour $\lambda > 0$, il est impossible de calculer analytiquement l’état fondamental.

Pour la fonction d’onde d’essai, il est naturel de choisir une fonction gaussienne normalisée, de largeur variable σ , voir (1.1.6), page 22 :

$$\langle x | \psi_\sigma \rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

Calcul de l’énergie moyenne :

$$E_\sigma = \langle \psi_\sigma | \hat{H} | \psi_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-1/\sigma^2 + x^2/\sigma^4\right) + \frac{1}{2}kx^2 + \lambda x^4 \right] \frac{1}{(\pi\sigma^2)^2} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right)$$

C'est une intégrale Gaussienne (A.1.2), et donne :

$$E_\sigma = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \left(\frac{w}{4} + \frac{1}{4w} + \frac{3}{4} g \frac{1}{w^2} \right)$$

avec

$$w = \frac{\hbar}{\sigma^2 \sqrt{km}} > 0$$

et

$$g = \frac{\hbar^2 \lambda}{km} > 0$$

Recherche du minimum de E_σ On observe que pour $w \rightarrow 0$ ou $w \rightarrow +\infty$, alors $E_\sigma \rightarrow +\infty$. Cela garantit l'existence d'un minimum de la fonction $E(w)$, que l'on trouve en écrivant :

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dw} &= 0 \\ \Leftrightarrow w^3 - w - 6g &= 0 \end{aligned}$$

C'est une équation du troisième degré.

Posons

$$G = 3^5 g^2$$

Alors si $G > 1$, la solution est

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\alpha + \frac{1}{\alpha} \right) \\ \alpha &= \sqrt{G} + \sqrt{G-1} \end{aligned}$$

et si $0 \leq G \leq 1$ la solution est

$$\begin{aligned} w &= \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) \\ \cos \varphi &= \sqrt{G} \end{aligned}$$

Résultats numériques et observations On pose $E_{\text{variét.}} = E(w_{\text{min}})$. Comparons à la solution exacte (numérique avec $\hbar = 1$, $m = 1$, $k = 1$), tracée sur la figure 8.1.3.

λ	0	0.1	1	10	100
E_{exact}	0.5	0.55915	0.8038	1.5050	3.1314
$E_{\text{variét.}}$	0.5	0.5603	0.8125	1.53125	3.19244
$\delta E = E_{\text{var.}} - E_{\text{exact}}$	0	0.0012	0.0087	0.026	0.06

cf programme `plan.cc`

On remarque que les résultats sont bons, avec une faible erreur, et d'autant meilleurs que $\lambda \rightarrow 0$. Cela tient du fait que la fonction d'onde d'essai est la solution exacte pour $\lambda = 0$.

Exercices (suggestions) TD : États électron. de l'hélium par th. perturbation 1er ordre, et methode variationnelle. Tenir compte du spin, cf Sakurai p369.

Ex : excitons en puits quantiques, cf livre Singh p300.

Approx particules indépend pb dépendant du temps et états coh. donnant la mécanique classique.

TD : modèle de Friedrichs et applications.

8.3.1.4 (*) Formule du minimax

La formule suivante généralise la formule (8.3.1) qui donnait l'état fondamental.

Théorème 8.3.3. *Si \hat{H} est un opérateur autoadjoint dont le spectre de valeurs propres est (compté avec multiplicités)*

$$E_0 \leq E_1 \leq E_1 \dots \leq E_n \leq \dots$$

alors le niveau n est donné par

$$E_n = \min_{L \subset \mathcal{H}, \dim L = n} \left(\max_{\phi \in L} \frac{\langle \phi | \hat{H} \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right)$$

Remarque 8.3.4. Cette formule est utilisée en chimie quantique.

Exercice 8.3.5. (*) (ref : Arnold [Arn76]chap.5). Si $\hat{H}_1 \leq \hat{H}_2$ montrer que $E_n^{(1)} \leq E_n^{(2)}$. Application : dans \mathbb{R}^n , si 2 ellipsoïdes \mathcal{E}' , \mathcal{E} centrés en 0 sont tels que $\mathcal{E}' \subset \mathcal{E}$, montrer que les 1/2 axes vérifient tous

$$a'_j \leq a_j, \quad \forall j = 1 \dots n$$

Démonstration. @@écrire.

□

Troisième partie

Mécanique quantique avancée

Chapitre 9

Statistiques quantiques et décohérence

Ce chapitre est une introduction aux notions de physique quantique statistique et aux processus de décohérence. Ces notions sont essentielles pour décrire les systèmes physiques complexes et en particulier pour aborder la physique statistique. Ce formalisme est aussi à la base des théories récentes qui décrivent la décohérence, c'est à dire "apparance classique du monde" à partir des phénomènes quantique (interaction et couplage avec l'environnement).

9.1 Description d'un ensemble statistique d'états quantiques par un opérateur densité

9.1.1 Définition de l'opérateur densité

Probabilité et hasard en mécanique classique : A priori, en mécanique classique, un système peut être en principe totalement connu et si il est régi par des lois déterministes, on connaît son passé et son futur parfaitement. Par exemple l'état d'une particule est spécifiée par sa position et son impulsion (\vec{x}, \vec{p}) .

Cependant, **à cause des phénomènes de chaos déterministe** (sensibilité aux conditions initiales), cette connaissance parfaite est illusoire et impossible. On montre que le "chaos" est comme une "source de hasard". Une description probabiliste du système devient indispensable même pour un système à peu de degrés de libertés (voir cours de licence, mécanique analytique). Dans le cas le plus simple on pourra considérer des états de la particule (\vec{x}_i, \vec{p}_i) ayant chacun une probabilité P_i , avec $\sum_i P_i = 1$, ou mieux, utiliser une distribution de probabilité $P(\vec{x}, \vec{p}) dx dp$ sur l'espace de phase pour décrire de façon probabiliste l'état de la particule. On appelle cela un ensemble statistique d'états classiques.

A fortiori pour un système physique composé d'un grand nombre de particules, la description probabiliste devient indispensable, d'autant plus que des phénomènes d'ensemble (dit collectifs) apparaissent et ne s'expliquent que dans la description probabiliste. C'est la théorie de la "physique statistique classique", expliquant les phénomènes de transition de phase, etc.

Probabilité et hasard en mécanique quantique : En mécanique quantique, il y a une autre source de hasard, qui est un hasard qui apparaît lorsque un système quantique interagit avec son environnement. Dans l'état des connaissances actuel ce hasard n'est pas le fruit de mécanismes sous jacents connus, on le considère comme un "hasard spontané".

Rappelons :

Affirmation 9.1.1. "le postulat de la mesure" : une particule quantique se décrit par un vecteur $\psi \in \mathcal{H}$ dans un espace quantique. Si \hat{A} est un opérateur (autoadjoint) associé à une mesure (observable), dont le spectre est $(a_j)_j$, alors la mesure de la grandeur A sur l'état ψ donnera le résultat a_j avec la probabilité¹

$$p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral sur l'espace propre de la valeur propre a_j . De plus, si la valeur observée est a_j , alors après la mesure, l'état quantique est décrit par $\mathcal{P}_j\psi$ (le passage $\psi \rightarrow \mathcal{P}_j\psi$ s'appelle le **collapse** ou **réduction de l'état quantique**).

On peut reformuler ce postulat de la façon suivante :

Affirmation 9.1.2. "Postulat de la mesure" : après la mesure, le système quantique ψ est décrit par la superposition statistique des états $\mathcal{P}_j\psi$ chacun ayant la probabilité $p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$.

Insistons sur le fait que "ces probabilités $p_\psi(a_j)$ pour toutes les observables possibles \hat{A} caractérisent le système physique" au sens où ce sont les seules valeurs accessibles à l'expérience que l'on peut confronter à la théorie. Par exemple, on peut déduire la valeur moyenne de l'observable A est²

$$\langle A \rangle_\psi := \sum_j p_\psi(a_j) \cdot a_j = \frac{\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

1.

Démonstration. Rappelons la preuve de la dernière égalité, utilisant que \mathcal{P}_j est un projecteur orthogonal, donc que $\mathcal{P}_j^\dagger = \mathcal{P}_j$ et $\mathcal{P}_j^2 = \mathcal{P}_j$:

$$p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\mathcal{P}_j\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j^\dagger\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j^2\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

□

2. rappelons la preuve de la dernière égalité : $\sum_j p_\psi(a_j) \cdot a_j = \sum_j \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \cdot a_j = \sum_j \frac{\langle\psi|a_j\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$
car $\hat{A} = \sum_j a_j \mathcal{P}_j$.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRATEUR

Ce que l'on veut rajouter dans ce chapitre est qu'il peut aussi y avoir du hasard qui se rajoute, dû à la méconnaissance du système physique. Au lieu d'un unique état quantique $\psi \in \mathcal{H}$, on voudrait donc pouvoir considérer un **ensemble statistique d'états** $\psi_i \in \mathcal{H}$, $i = 1, 2, \dots$ avec des probabilités respectives p_i , vérifiant $\sum_i p_i = 1$. D'après le postulat de la mesure ci-dessus, après une mesure de l'observable \hat{A} on aura donc le résultat a_j avec la probabilité :

$$p(a_j) = \sum_i p_i \cdot p_{\psi_i}(a_j)$$

Rappelons encore (car c'est fondamental) que la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toutes les observables \hat{A} caractérise le système physique. Par exemple on déduit la valeur moyenne de A par :

$$\langle A \rangle = \sum_i p(a_j) a_j = \sum_i p_i \frac{\langle \psi_i | \hat{A} \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}$$

Cette présence de deux sources de probabilité est mal commode et la définition suivante va permettre de simplifier le formalisme (en gardant l'essentiel).

Définition 9.1.3. Pour un ensemble statistique d'état $\psi_i \in \mathcal{H}$, $i = 1, 2, \dots$ avec des probabilités respectives p_i , l'**opérateur densité** associé est

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i \mathcal{P}_{\psi_i}, \quad \mathcal{P}_{\psi_i} := \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} \quad (9.1.1)$$

(aussi appelé **matrice densité** ou **état quantique**), où \mathcal{P}_{ψ_i} est le projecteur orthogonal de rang 1 sur l'état ψ_i .

Dans le particulier d'un seul état ψ , on a $\hat{\rho} = \mathcal{P}_{\psi}$, on dit que c'est un **état pur**.

La propriété suivante montre que l'on peut exprimer les probabilités $p(a_j)$ à partir de l'opérateur densité $\hat{\rho}$.

Proposition 9.1.4. L'opérateur densité $\hat{\rho}$ caractérise uniquement le système physique : pour toute observable \hat{A} , la probabilité d'observer la valeur propre a_j est donnée par :

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho} \mathcal{P}_j) \quad (9.1.2)$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral de \hat{A} (défini plus haut). En particulier la valeur moyenne est

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$$

Inversement la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toute observable \hat{A} détermine $\hat{\rho}$.

Démonstration. On a (utilisant que $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle$)

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\hat{\rho}\mathcal{P}_j) &= \text{Tr}\left(\sum_i p_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} \mathcal{P}_j\right) \\ &= \sum_i p_i \frac{\langle\psi_i|\mathcal{P}_j\psi_i\rangle}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} = \sum_i p_i \cdot p_\psi(a_j) = p(a_j)\end{aligned}$$

Et comme $\hat{A} = \sum_j a_j \mathcal{P}_j$,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j a_j \text{Tr}(\hat{\rho}\mathcal{P}_j) = \sum_j a_j p(a_j) = \langle A \rangle$$

Inversement, montrons que on peut reconstruire $\hat{\rho}$ à partir de la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toute observable \hat{A} : on verra ci-dessous que $\hat{\rho}$ admet une décomposition spectrale $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i \mathcal{P}_{\phi_i}$. Prenons $\hat{A} = \mathcal{P}_{\phi_i}$; on obtient $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \rho_i$, ce qui permet de reconstruire $\hat{\rho}$. \square

Exemple 9.1.5. Illustrons le fait que l'opérateur densité $\hat{\rho}$ caractérise le système quantique sur l'exemple d'un spin 1/2. L'espace quantique est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Les ensembles statistiques

$$|+z\rangle, p_+ = \frac{1}{2}, \quad |-z\rangle, p_+ = \frac{1}{2},$$

et

$$|+x\rangle, p_+ = \frac{1}{2}, \quad |-x\rangle, p_+ = \frac{1}{2},$$

donnent tous les deux la même matrice densité $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\text{Id}$ et sont donc indentiques. Sachant que

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \pm |-z\rangle)$$

cela peut paraître paradoxal. En effet en mécanique classique un mélange de pièces noires et blanches n'est pas équivalent à un mélange de pièces (demi noire/ demi blanche) et (demi blanche/ demi noire).

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRATEUR

Proposition 9.1.6. *Un opérateur $\hat{\rho}$ est un opérateur densité si et seulement si c'est un opérateur autoadjoint dont les valeurs propres réelles ρ_j vérifient*

$$0 \leq \rho_j \leq 1 \text{ et } \sum_j \rho_j = 1.$$

En notant $(\phi_j)_j$ une base orthonormée de vecteurs propres de $\hat{\rho}$, et $\mathcal{P}_{\phi_j} = \frac{|\phi_j\rangle\langle\phi_j|}{\langle\phi_j|\phi_j\rangle}$, on peut écrire :

$$\hat{\rho} = \sum_j \rho_j \mathcal{P}_{\phi_j}$$

et interpréter $\hat{\rho}$ comme l'opérateur densité associé à l'ensemble statistique des états ϕ_j avec les probabilités respectives ρ_j .

Démonstration. Supposons que $\hat{\rho}$ est un opérateur densité (9.1.1). Il est clair que $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ est autoadjoint. Ses valeurs propres réelles ρ_j vérifient

$$\sum_j \rho_j = \text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i p_i \text{Tr}\left(\frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}\right) = \sum_i p_i = 1$$

Il reste à montrer que $\rho_j \geq 0$. Pour cela si $v \in \mathcal{H}$ est un vecteur quelconque alors

$$\langle v|\hat{\rho}v\rangle = \sum_i p_i \frac{\langle v|\psi_i\rangle\langle\psi_i|v\rangle}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} = \sum_i p_i \frac{|\langle\psi_i|v\rangle|^2}{\|\psi_i\|^2} \geq 0$$

(on dit que c'est un **opérateur positif**) donc en particulier pour $v = \phi_j$ (associé à la valeur propre ρ_j) on a

$$0 \leq \langle\phi_j|\hat{\rho}\phi_j\rangle = \rho_j.$$

La réciproque est immédiate. □

Remarque 9.1.7.

- La condition $\sum_j \rho_j = 1$ s'écrit aussi

$$\text{Tr}\hat{\rho} = 1.$$

- $\hat{\rho}$ est un état pur si et seulement si ses valeurs propres sont

$$\rho_1 = 1, \quad \rho_2 = \rho_{i \geq 2} \dots = 0$$

Exercice 9.1.8. Montrer que $\hat{\rho}$ est un état pur si et seulement si

$$\text{Tr}\hat{\rho}^2 = 1$$

9.1.2 Formulation du postulat de la mesure avec la matrice densité

Le postulat de la mesure énoncé en 9.1.1 peut être réformulé de la façon suivante :

Proposition 9.1.9. “le postulat de la mesure” : Si un système quantique est décrit par l’opérateur densité $\hat{\rho}$, si \hat{A} est un opérateur autoadjoint (observable) associé à une mesure alors après la mesure de la grandeur A , l’opérateur densité devient

$$\hat{\rho}' = \sum_j \mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j \quad (9.1.3)$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral sur l’espace propre de la valeur propre a_j de \hat{A} . C’est à dire que $\hat{\rho}$ devient diagonale en blocs par rapport à la décomposition spectrale de \hat{A} .

Démonstration. Avant la mesure, on a une distribution statistique d’états ψ_i avec probabilité p_i . La matrice densité correspondante est $\rho = \sum_i p_i \mathcal{P}_{\psi_i}$. D’après le postulat de la mesure, Affirmation 9.1.2, après la mesure, chaque état ψ_i donne une distribution statistique d’états $\psi'_{i,j} = \mathcal{P}_j \psi_i$ avec la probabilité $p_{i,j} = p_i \frac{\langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}$. La matrice densité correspondante est donc

$$\rho' = \sum_{i,j} p_{i,j} \mathcal{P}_{\psi'_{i,j}} = \sum_{i,j} p_i \frac{\langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \left(\frac{\mathcal{P}_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \mathcal{P}_j}{\langle \mathcal{P}_j \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle} \right) = \sum_j \mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j$$

On a utilisé que $\langle \mathcal{P}_j \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle = \langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle$. □

Remarque 9.1.10. L’opérateur (9.1.3) est diagonal par blocs. D’après l’interprétation statistique de l’opérateur densité, il décrit une superposition statistique d’évènements j , et la probabilité de l’évènement j est la trace du bloc et donne :

$$\text{Tr} (\mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j) = \text{Tr} (\hat{\rho} \mathcal{P}_j^2) = \text{Tr} (\hat{\rho} \mathcal{P}_j) = p(a_j)$$

d’après (9.1.2). C’est exactement ce que donne le postulat de la mesure.

Dans la section suivante nous évoquerons la “**théorie de la décohérence**” qui propose des mécanismes qui permettent d’expliquer de façon dynamique comment l’opérateur densité peut évoluer d’un état initial quelconque $\hat{\rho}$ vers l’expression (9.1.3) dans le cadre de l’interaction avec un système de mesure et avec l’environnement.

9.1.3 Opérateur densité pour un système à deux états

Un système à deux états est un système quantique dont l’espace quantique est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, de dimension 2. C’est le cas par exemple du spin 1/2.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

On rappelle que $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ sont les matrices de Pauli définies en (4.3.5) :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Proposition 9.1.11. *Dans l'espace quantique $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, un opérateur densité $\hat{\rho}$ s'écrit toujours sous la forme*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\text{Id} + \vec{P} \cdot \hat{\sigma})$$

*caractérisé par un vecteur $\vec{P} \in \mathbb{R}^3$, vérifiant $|\vec{P}| \leq 1$, appelé **vecteur polarisation**. De plus, $\hat{\rho}$ est **un état pur** si et seulement si $|\vec{P}| = 1$. On dit que $\hat{\rho}$ est l'**état non polarisé** si $\vec{P} = \vec{0}$ soit $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\text{Id}$.*

Démonstration. Toute matrice hermitienne 2×2 de trace 1 peut s'écrire sous la forme $\frac{1}{2} (\text{Id} + \vec{P} \cdot \hat{\sigma})$ avec $\vec{P} \in \mathbb{R}^3$. Les 2 valeurs propres sont alors $\rho_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm |\vec{P}|)$. La condition supplémentaire $0 \leq \rho_{\pm} \leq 1$ donne $|\vec{P}| \leq 1$. \square

9.1.4 Equation d'évolution

Proposition 9.1.12. *Si $\hat{H}(t)$ est l'opérateur Hamiltonien qui fait évoluer chaque état de l'ensemble statistique selon $i\hbar \frac{d\psi_i}{dt} = \hat{H}(t) \psi_i(t)$ alors l'opérateur densité associé évolue selon*

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

*appelée **équation de Liouville quantique**.*

Remarque 9.1.13. Cela ressemble à l'équation de transport de Liouville $\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}$ en mécanique analytique [Fau10c].

Démonstration. On a

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i \frac{|\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|}{\langle \psi_i(t) | \psi_i(t) \rangle}$$

où $\psi_i(t) = \hat{U}(t) \psi_i(0)$ avec $\frac{d\hat{U}}{dt} = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \cdot \hat{U}(t)$. On a aussi $\langle \psi_i(t) | \psi_i(t) \rangle = \langle \psi_i(0) | \psi_i(0) \rangle$. Remarquer que les poids de probabilité p_i sont constant au cours du temps. Donc

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_i p_i \frac{\hat{U}(t) |\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(0)| \hat{U}(t)^\dagger}{\langle \psi_i(0) | \psi_i(0) \rangle} \\ &= \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \frac{d\hat{U}}{dt} \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger + \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \\ &= \frac{-i}{\hbar} \left(\hat{H} \hat{U} \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger - \hat{U} \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger \hat{H} \right) = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned}$$

□

9.1.5 Entropie de l'ensemble statistique

Lire³ “history of entropy” sur wikipedia.

On commence par définir l'entropie de Shannon (ou entropie de Kolmogorov-Sinaï) pour un système dynamique simple que l'on appelle “dynamique de Bernouilli”.

9.1.5.1 Entropie de Shannon pour une dynamique de Bernouilli

Considérons un ensemble de n évènements possibles $\{1, 2, \dots, n\}$ ayant chacun la probabilité p_i , $i = 1, \dots, n$ vérifiant $\sum_i p_i = 1$. (C'est une **loi de probabilité**). Soit $N \geq 1$. Considérons une suite de N réalisations aléatoires indépendantes :

$$\vec{i} := (i_1, i_2, \dots, i_N) \quad (9.1.4)$$

où chaque valeur $i_j \in \{1, 2, \dots, n\}$ apparait avec la probabilité p_{i_j} . Comme les évènements de la suite \vec{i} sont indépendants, la probabilité pour que cette suite \vec{i} apparaisse est le produit :

$$p(\vec{i}) = p_{i_1} \cdot p_{i_2} \cdot \dots \cdot p_{i_N} \quad (9.1.5)$$

Remarquons qu'il y a $n^N = e^{N \log n}$ suites possibles.

Avant de donner le résultat général de Shannon, présentons deux exemples simples afin de développer l'intuition.

3. (ref : wikipedia “history of entropy”) L'histoire raconte que en 1949 Claude Shannon qui travaillait en télécommunication au BELL labs a développé la théorie qui suit, en définissant une fonction H qu'il voulait appeler “incertitude”. Il rencontre le physicien-mathématicien Von Neumann. Ce dernier lui fait remarquer qu'il devrait appeler sa fonction “entropie” pour deux raisons : 1) car cela correspond au concept de l'entropie développée depuis Boltzmann et Gibbs 1872 qui mesure le “désordre”, et 2) car il deviendrait célèbre en donnant enfin une explication claire de ce qu'est l'entropie.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Exemple 9.1.14. Considérons par exemple le cas très simple

$$n = 3, \quad p_1 = p_2 = 0.5, \quad p_3 = 0 \quad (9.1.6)$$

Pour N donné, il y a $3^N = e^{N \log 3}$ suites possibles. Les suites \vec{i} ne contenant pas le chiffre 3, de la forme

$$(1, 2, 2, 1, \dots, 2) \quad (9.1.7)$$

et ont chacune la probabilité

$$p(\vec{i}) = \left(\frac{1}{2}\right)^N = e^{-N \log 2}$$

Le nombre total de telles suites est

$$\mathcal{N} = 2^N = e^{N \log 2}$$

(ce qui est très peu par rapport au total car $2^N/3^N = \left(\frac{2}{3}\right)^N \rightarrow 0$ pour $N \rightarrow \infty$). Les suites contenant le chiffre 3 comme

$$(1, 2, 3, 2, 1, \dots, 2) \quad (9.1.8)$$

sont chacune de probabilité nulle car $p_3 = 0$.

Exemple 9.1.15. Considérons le cas un peu moins simple avec $n = 2$ et

$$p_1 = 2/3 \simeq 0.7 > p_2 = 1/3 \simeq 0.3$$

Nous allons traiter cet exemple de façon non rigoureuse, mais cela va nous faire deviner le résultat présenté dans le théorème de Shannon qui va suivre. Il y a $2^N = e^{N \log 2}$ suites possibles. La suite qui est individuellement la plus probable est

$$\vec{i} = (1, 1, 1 \dots) \quad (9.1.9)$$

avec $p(\vec{i}) = p_1^N = e^{-N \log(1/p_1)}$, mais elle est unique (on dit que c'est une suite "non standard"). La suite

$$\vec{i} = (2, 2, 2, 2 \dots) \quad (9.1.10)$$

est au contraire très peu probable mais elle est aussi unique. On dit aussi que c'est une suite "non standard". Au contraire une "suite standard" est de la forme :

$$\vec{i} = (1, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 2, \dots) \quad (9.1.11)$$

avec un nombre d'apparition de 1 qui est $N_1 \simeq p_1 N$ et de 2 qui est $N_2 \simeq p_2 N$. On estime que sa probabilité d'apparition est donc de l'ordre de

$$\begin{aligned} p_s = p(\vec{i}) &= p_1^{N_1} p_2^{N_2} = e^{N_1 \log p_1 + N_2 \log p_2} = e^{-N(-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2)} \\ &= e^{-NS} \end{aligned}$$

avec

$$S = -p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2 > 0$$

appelée **entropie**. Par ailleurs, on estime que le nombre de telles suites standard est le nombre de façon de choisir N_1 éléments parmi N , soit :

$$\mathcal{N}_N \simeq C_N^{N_1} \simeq \frac{N!}{N_1!N_2!}$$

En utilisant la formule de Stirling $\log N! \simeq N \log N + \dots$ cela donne

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_N &\simeq e^{\log N! - \log N_1! - \log N_2!} \simeq e^{N \log N - (p_1 N) \log(p_1 N) - (p_2 N) \log(p_2 N)} \\ &\simeq e^{N(-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2)} = e^{NS} \end{aligned}$$

Il apparait que $\mathcal{N}_N \cdot p_s \simeq 1$ et donc, avec probabilité 1, toutes les suites qui apparaissent sont “standard”. Remarquons finalement que $S < \log 2$ donc

$$\mathcal{N}_N = e^{NS} \ll 2^N = e^{N \log 2}$$

ce qui signifie qu’il y a très peu de suites standard.

Le théorème qui suit de Shannon et MacMullen précise ce résultat un cas plus général.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Théorème 9.1.16. (Shannon, MacMillan 1949)(cf Khinchin p.17, Zinmeister p.22).
 Pour une loi de probabilité (p_1, p_2, \dots, p_n) données, la quantité suivante :

$$S = - \sum_i p_i \log p_i \quad (9.1.12)$$

appelée l'**entropie de Shannon**, est telle que pour $N \gg 1$, parmi toutes les $n^N = e^{N \log n}$ suites possibles de la forme (9.1.4), seulement le nombre

$$\mathcal{N}_N = e^{NS}$$

d'entre elles peuvent effectivement apparaître et la majorité d'entre elles ont la probabilité

$$p_s = e^{-NS}$$

Elles sont appelées "**suites standard**" (comme (9.1.11)).

Parmi les autres suites (au total improbables) appelées "**suites non standard**", il y a des suites en grand nombre mais de très faible probabilité (comme (9.1.10)), ou des suites plus probables mais en très petit nombre comme (9.1.9).

L'entropie vérifie :

$$0 \leq S \leq \log n \quad (9.1.13)$$

Le **maximum d'entropie** est pour la loi uniforme où tous les événements sont équiprobables : $p_i = 1/n$ donnant $S = \log n$. Au contraire, le **minimum d'entropie** est $S = 0$ obtenu pour un événement totalement prévisible comme $p_1 = 1, p_2 = \dots = p_n = 0$. (remarquer que $p_i \log p_i \xrightarrow{p_i \rightarrow 0} 0$).

Remarque 9.1.17.

- On peut aussi retenir la formule :

$$S = \frac{1}{N} \log \mathcal{N}_N$$

qui montre que (par définition) l'entropie mesure le taux de croissance exponentiel du nombre \mathcal{N}_N des suites standard de longueur N .

- Dans l'exemple (9.1.6), l'entropie est $S = -\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = \log 2$ conformément à (??).
- (*) Un énoncé plus précis (mathématiquement) est que pour $N \rightarrow \infty$, on peut diviser l'ensemble des n^N suites en deux ensembles : \mathcal{A} (suites standard) et \mathcal{B} (suites non standard) tels que (rappel $o(1)$ désigne un terme qui tend vers 0 pour $N \rightarrow \infty$).

$$\forall \vec{i} \in \mathcal{A}, \quad e^{-NS(1+o(1))} \leq p(\vec{i}) \leq e^{-NS(1-o(1))} \quad (9.1.14)$$

$$e^{NS(1-o(1))} \leq \#\mathcal{A} \leq e^{NS(1+o(1))} \quad (9.1.15)$$

$$\sum_{\vec{i} \in \mathcal{A}} p(\vec{i}) = 1 - o(1), \quad \sum_{\vec{i} \in \mathcal{B}} p(\vec{i}) = o(1) \quad (9.1.16)$$

le facteur $o(1)$ qui apparait provient de “la loi des grands nombres”. En utilisant le “théorème central limite” qui est plus précis, on peut remplacer $o(1)$ par $\frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}}$ pour tout $\varepsilon > 0$.

Démonstration. (*) (Zinmeister p.22). L’astuce est de faire apparaitre une somme de Birkhoff de variables aléatoires indépendantes. D’après (9.1.5) on écrit

$$\begin{aligned} p(\vec{i}) &= p_{i_1} \cdot p_{i_2} \cdots p_{i_N} = e^{\sum_j \log p_{i_j}} \\ &= e^{-\sum_j X_j} \end{aligned}$$

en posant

$$X_j := -\log p_{i_j}$$

Les variables aléatoires X_j sont indépendantes, de même loi, et de moyenne qui est précisément l’entropie :

$$\langle X_j \rangle = \sum_{i=1}^n p_i (-\log p_i) = S$$

Considérons la somme moins la moyenne :

$$\mathcal{S} := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (X_j - S) \quad (9.1.17)$$

ainsi on peut exprimer :

$$p(\vec{i}) = e^{-NS(1+\mathcal{S})}$$

La **loi (faible) des grands nombre** (cf Proposition 9.1.18) dit que \mathcal{S} “converge vers 0” au sens ou pour tout $\alpha > 0$ (arbitrairement petit) et pour $N \rightarrow \infty$,

$$\text{proba}(|\mathcal{S}| < \alpha) = 1 - o(1) \quad (9.1.18)$$

Donc on définit les suites standard par

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\alpha &:= \left\{ \vec{i} \text{ tq } -\alpha < \mathcal{S} < \alpha \right\} \\ &= \left\{ \vec{i} \text{ tq } p(\vec{i}) \in [e^{-NS(1+\alpha)}, e^{-NS(1-\alpha)}] \right\} \end{aligned}$$

Cela donne (9.1.14). On a d’après la loi des grands nombres

$$\sum_{\vec{i} \in \mathcal{A}_\alpha} p(\vec{i}) = 1 - o(1)$$

donnant (9.1.16). Par conséquence

$$(\#\mathcal{A}) \cdot e^{-NS(1+\alpha)} \leq 1 - o(1) \quad \text{et} \quad (\#\mathcal{A}) \cdot e^{-NS(1-\alpha)} \geq 1 + o(1)$$

donnant (9.1.15). □

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Il reste à justifier la loi des grands nombres utilisée dans (9.1.18). (réf : cf wikipedia).

Proposition 9.1.18. “*La loi faible des grands nombres*”. Supposons que $(X_j)_{j \in \mathbb{N}}$ sont des variables aléatoires indépendantes, de même moyenne $\langle X \rangle$ et même variance $\sigma^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$. Pour $N \geq 1$, on pose

$$\mathcal{S}_N := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (X_j - \langle X \rangle)$$

qui est la “moyenne temporelle centrée”. Alors pour tout $\alpha > 0$ (arbitrairement petit) et pour $N \rightarrow \infty$,

$$\text{proba}(|\mathcal{S}_N| > \alpha) = o(1)$$

Démonstration. Notons pour simplifier $Z = |\mathcal{S}|^2$ et $p(Z) dZ$ la densité de probabilité. On a

$$\begin{aligned} \text{proba}(|\mathcal{S}| > \alpha) &= \text{proba}(|\mathcal{S}|^2 > \alpha^2) \\ &= \int_{\alpha^2}^{\infty} p(Z) dZ \leq \int_{\alpha^2}^{\infty} \left(\frac{Z}{\alpha^2}\right) p(Z) dZ \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \int_{\alpha^2}^{\infty} Z p(Z) dZ \leq \frac{1}{\alpha^2} \int_0^{\infty} Z p(Z) dZ \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \langle Z \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \langle |\mathcal{S}|^2 \rangle \end{aligned}$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne. (Ce dernier calcul s’appelle “inégalité de Tchebychev”). On a $\langle (X_j - \langle X \rangle) \rangle = \langle X \rangle - \langle X \rangle = 0$ et donc pour $j \neq k$ $\langle (X_j - \langle X \rangle) (X_k - \langle X \rangle) \rangle = \langle (X_j - \langle X \rangle) \rangle \langle (X_k - \langle X \rangle) \rangle = 0$. Alors d’après (9.1.17)

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{S}|^2 \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{j,k} \langle (X_j - \langle X \rangle) (X_k - \langle X \rangle) \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_j \langle (X_j - \langle X \rangle)^2 \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sigma^2 \rightarrow 0 \end{aligned}$$

On déduit que $\text{proba}(|\mathcal{S}| > \alpha) = o(1)$. □

@@Tracer la loi de proba de X en faisant apparaître les évènements extrêmes et la convergence vers la moyenne@@

Exercice 9.1.19. (voir TD) Considérons les évènements⁴ possibles $i \in \mathbb{N}$ et considérons la “loi de probabilité de Boltzmann”

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta i}$$

où $\beta = \frac{1}{kT}$, T est la “température” et Z est un facteur de normalisation de sorte que $\sum_i p_i = 1$.

1. Calculer Z en fonction de β (aussi appelé **fonction de partition**).
2. Calculer l’entropie S en fonction de β .
3. Donner l’expression de S (les premiers termes du développement limité) pour $\beta \rightarrow 0$ (haute température)
4. Donner l’expression de S (les premiers termes du développement limité) pour $\beta \rightarrow \infty$ (basse température)

9.1.5.2 Entropie en mécanique quantique

Revenons à la mécanique quantique et à un ensemble statistique d’états quantiques décrits par l’opérateur densité $\hat{\rho}$.

Pour caractériser l’incertitude sur le résultat de mesure d’une observable \hat{A} sur l’état $\hat{\rho}$, il faut considérer la loi de probabilité $p(a_j) = \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho})$ donnée en (9.1.2).

Définition 9.1.20. Conformément à la définition (9.1.12), l’**entropie d’un ensemble statistique d’états quantique** décrits par l’opérateur densité $\hat{\rho}$, relatif à la mesure d’une observable \hat{A} est :

$$S(\hat{\rho}, \hat{A}) = - \sum_j p(a_j) \log p(a_j) = - \sum_j \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho}) \log \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho})$$

Le minimum de $S(\hat{\rho}, \hat{A})$ sur toutes les observables \hat{A} possibles est appelé **entropie de l’état $\hat{\rho}$** :

$$S(\hat{\rho}) := \min_{\hat{A}} S(\hat{\rho}, \hat{A})$$

4. Ce modèle correspond par exemple aux niveaux d’énergie de l’oscillateur harmonique. En effet l’oscillateur harmonique a les niveaux d’énergie $E_i = \hbar\omega (i + \frac{1}{2})$ avec $i \in \mathbb{N}$, et d’après la loi de Boltzmann, la probabilité pour que la particule soit au niveau i d’énergie E_i s’écrit comme dans cet exercice :

$$\frac{1}{Z'} e^{-\frac{E_i}{kT}} = \frac{1}{Z'} e^{-\frac{\hbar\omega(i+1/2)}{kT}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta i}$$

avec $\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ et $\frac{1}{Z} = \frac{1}{Z'} e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}$.

Proposition 9.1.21. *L'entropie de l'état $\hat{\rho}$ est donnée par*

$$S(\hat{\rho}) := - \sum_i \rho_i \log \rho_i = -\text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \quad (9.1.19)$$

où ρ_i sont les valeurs propres de $\hat{\rho}$. Il est obtenu pour $\hat{A} = \hat{\rho}$, c'est à dire que $S(\hat{\rho}, \hat{\rho}) = S(\hat{\rho})$. En particulier $\hat{\rho}$ est un **état pur** si et seulement si $S(\hat{\rho}) = 0$.

Remarque 9.1.22.

1. Pour expliquer l'écriture dans (9.1.19) : si \hat{A} est un opérateur auto-adjoint et si $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction analytique, i.e. qui admet un développement de Taylor $f(x) = f(0) + x f'(0) + x^2 \frac{f''(0)}{2} + \dots$ convergent, alors on utilise ce développement pour définir

$$f(\hat{A}) = f(0) + \hat{A} f'(0) + \hat{A}^2 \frac{f''(0)}{2} + \dots$$

(qui est une série convergente si \hat{A} est un opérateur borné). De plus, \hat{A} se diagonalise

$$\hat{A} = \hat{U} D \hat{U}^{-1}$$

où \hat{U} est un opérateur unitaire et $D = \text{Diag}(a_1, a_2, \dots)$ est une matrice diagonale avec les valeurs propres a_j sur la diagonale. Remarquons que pour tout $n \geq 1$

$$\hat{A}^n = (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) \dots (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) = \hat{U} D^n \hat{U}^{-1}$$

donc on a :

$$f(\hat{A}) = \hat{U} f(D) \hat{U}^{-1}$$

où $f(D) = \text{Diag}(f(a_1), f(a_2), \dots)$ est une matrice diagonale. En particulier on a

$$\begin{aligned} \text{Tr}(f(\hat{A})) &= \text{Tr}(\hat{U} f(D) \hat{U}^{-1}) = \text{Tr}(\hat{U}^{-1} \hat{U} f(D)) = \text{Tr}(f(D)) \\ &= \sum_j f(a_j) \end{aligned}$$

Le cas $f(x) = -x \log x$ et $\hat{A} = \hat{\rho}$ donne eq.(9.1.19).

2. En mécanique classique (ou en théorie de l'information), une entropie nulle signifie par définition que les événements qui vont survenir sont totalement prévisibles (il n'y a qu'une possibilité). En mécanique quantique, $S(\hat{\rho}) = 0$ signifie que $\hat{\rho}$ est un état pur ψ , et non pas une superposition statistique d'états. Cela n'empêche pas que si l'on fait des mesures d'observables \hat{A} , les résultats sont non prévisibles en général car la distribution de probabilité dépend de ψ et de l'observable \hat{A} . Cela correspond

au fait que l'entropie $S(\hat{\rho}, \hat{A})$ est non nulle en général.

Par exemple si un spin $1/2$ est dans l'état pur $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle + |-_z\rangle)$ ($\hat{\rho} = |+_x\rangle\langle+_x|$) on a $S(\hat{\rho}) = 0$ selon (9.1.19). Si on mesure le spin selon z avec l'observable \hat{S}_z alors on a les probabilités $p_{\pm} = \frac{1}{2}$, et la définition ci-dessus donne $S(\hat{\rho}, \hat{S}_z) = \log 2$. Si on mesure le spin selon x avec l'observable \hat{S}_x alors on a les probabilités $p_+ = 1, p_- = 0$, et la définition ci-dessus donne $S(\hat{\rho}, \hat{S}_x) = 0 = S(\hat{\rho})$

9.2 Opérateur densité partielle pour un système composé

9.2.1 Rappels sur les systèmes composés

Il est assez courant en physique qu'un système soit composé de sous systèmes plus élémentaires. On a vu que si un système est composé de deux sous systèmes A et B , et si l'espace quantique du système A est \mathcal{H}_A (respect. \mathcal{H}_B pour B) alors l'espace quantique du système total est l'espace produit tensoriel :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

Remarque : le terme sous système est ici au sens large. Ce peut être des degrés de liberté interne comme le spin.

Rappelons que si $(|e_i\rangle)_i$ forme une base o.n. de \mathcal{H}_A et $|f_j\rangle$ une base o.n. de \mathcal{H}_B alors

$$|e_i\rangle \otimes |f_j\rangle = |e_i, f_j\rangle$$

forme une base o.n. de $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ et donc dans le cas d'espace de dimension finie,

$$\dim \mathcal{H}_{tot} = \dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$$

Exemples de systèmes composés :

- l'atome d'hydrogène est formé de proton et électron. Alors

$$\mathcal{H}_{\text{atome H}} = \mathcal{H}_{\text{proton}} \otimes \mathcal{H}_{\text{electron}}$$

- Pour électron (de spin $1/2$) :

$$\mathcal{H}_{\text{electron}} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

- Pour deux particules de spin $1/2$ (on ne décrit que les spins)

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}_{(1)}^2 \otimes \mathbb{C}_{(2)}^2$$

L'état quantique du système total peut être :

$$|\psi_1\rangle = |+_z\rangle \otimes |+_z\rangle$$

(i.e. les deux particules ont le spin up selon z) ou encore

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle \otimes |+_z\rangle + |-_z\rangle \otimes |-_z\rangle)$$

- Un exemple qui va nous intéresser particulièrement est : A : système étudié (par exemple une molécule) et B : le reste de l'univers, appelé "environnement". Naturellement dans cet exemple extrême on ne connaît pas le système B (l'univers...), mais on peut connaître comment il interagit avec A (ce seront les particules de gaz ou molécules voisines de A , ou photons de lumière incidents,...) :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_{environnement}$$

Notons Id_A l'opérateur identité dans l'espace \mathcal{H}_A . Soit $|f_j\rangle$ un vecteur de base fixé de \mathcal{H}_B . Les opérateurs suivant serviront dans la définition qui va suivre :

$$\text{Id}_A \otimes \langle f_j| \quad : \mathcal{H}_{tot} \rightarrow \mathcal{H}_A$$

$$\text{Id}_A \otimes |f_j\rangle \quad : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_{tot}$$

Définition 9.2.1. Si $\hat{T} : \mathcal{H}_{tot} \rightarrow \mathcal{H}_{tot}$ est un opérateur linéaire dans $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ alors on définit sa **trace partielle** par rapport à B comme étant l'opérateur

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$$

définit par

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) := \sum_j (\text{Id}_A \otimes \langle f_j|) \circ \hat{T} \circ (\text{Id}_A \otimes |f_j\rangle) \quad (9.2.1)$$

aussi noté plus simplement

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) = \sum_j \langle f_j | \hat{T} | f_j \rangle$$

Cet opérateur aussi appelé **opérateur partiel**, ne dépend pas du choix de la base o.n. $(f_j)_j$.

Remarque : de même on définit $\text{Tr}_A(\hat{T}) := \sum_i \langle e_i | \hat{T} | e_i \rangle : \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_B$.

Nous allons voir maintenant l'intérêt de ces opérateurs partiels.

Proposition 9.2.2. Si $\hat{\rho}$ est l'opérateur densité décrivant un système dans l'espace $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, alors l'opérateur densité partiel du sous système A est défini par

$$\hat{\rho}_A := \text{Tr}_B(\hat{\rho}).$$

$\hat{\rho}_A$ décrit le système A au sens où pour toute observable de la forme $\hat{A}_{tot} = \hat{A} \otimes \text{Id}_B$ (c'est à dire n'agissant pas sur la partie B), les probabilités des résultats de la mesure sont donnés, d'après (9.1.2), par

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \mathcal{P}_j)$$

où $\mathcal{P}_j : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$, $j = 1, 2, \dots$ sont les projecteurs spectraux pour l'observable \hat{A} , Tr est la trace dans \mathcal{H}_{tot} et Tr_A la trace partielle dans \mathcal{H}_A . Autrement dit, l'opérateur densité partiel caractérise complètement le sous système A pour ce qui concerne des mesures portant sur lui.

Démonstration. D'après (9.1.2) on a

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) = \text{Tr}_A(\text{Tr}_B(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)))$$

On note $|f_l\rangle_l$ une base de \mathcal{H}_B . On remarque que (utilisant la relation de fermeture)

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) &= \sum_l \langle f_l | \hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B) | f_l \rangle = \sum_{l,l'} \langle f_l | \hat{\rho} | f_{l'} \rangle \langle f_{l'} | (\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B) | f_l \rangle \\ &= \sum_{l,l'} \langle f_l | \hat{\rho} | f_{l'} \rangle (\mathcal{P}_j \otimes \langle f_{l'} | f_l \rangle) = \sum_l \langle f_l | \hat{\rho} | f_l \rangle \mathcal{P}_j \\ &= \text{Tr}_B(\hat{\rho}) \mathcal{P}_j = \hat{\rho}_A \mathcal{P}_j \end{aligned}$$

Donc $p(a_j) = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \mathcal{P}_j)$. □

Exemple 9.2.3. Considérons deux spins 1/2.

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathbb{C}_{(1)}^2 \otimes \mathbb{C}_{(2)}^2$$

1. Pour l'état

$$|\psi_1\rangle = |+_z\rangle_{(1)} \otimes |+_z\rangle_{(2)} = |+, +\rangle \quad (9.2.2)$$

qui est un état pur dans \mathcal{H}_{tot} , on a

$$\hat{\rho} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = |+, +\rangle\langle+, +|$$

et (on détaille la définition (9.2.1))

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) &= (I \otimes \langle + |) |+, +\rangle\langle+, +| (I \otimes | + \rangle) + (I \otimes \langle - |) |+, +\rangle\langle+, +| (I \otimes | - \rangle) \\ &= |+\rangle\langle + | \end{aligned} \quad (9.2.3)$$

Cet état partiel est un état pur. Sa matrice densité (dans la base $|+\rangle, |-\rangle$) est

$$\hat{\rho}_A \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Son entropie est $S(\hat{\rho}_A) = 0$.

2. Pour l'état

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle \otimes |+_z\rangle + |-_z\rangle \otimes |-_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \quad (9.2.4)$$

qui est un état pur dans \mathcal{H}_{tot} , on a

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \frac{1}{2} (|++\rangle + |--\rangle)(\langle++| + \langle--|) \\ &= \frac{1}{2} (|++\rangle\langle++| + |++\rangle\langle--| + |--\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--|) \end{aligned}$$

et

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) = \frac{1}{2} (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) \quad (9.2.5)$$

C'est état partiel n'est pas un état pur. Sa matrice densité (dans la base $|+\rangle, |-\rangle$) est diagonale

$$\hat{\rho}_A \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

C'est un état mélangé (non pur). Son entropie est

$$S(\hat{\rho}_A) = -\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = \log 2$$

C'est l'entropie maximale pour un système à deux états.

L'exemple précédent nous amène à la proposition et définition suivante :

Proposition 9.2.4. *Considérons un état pur d'un système composé $\psi \in \mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.*

- *Si l'état partiel $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}$ est non pur, alors $\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \hat{\rho}$ est aussi non pur, et on dit que ψ est un état **enchevêtré** ou **corrélé**.*
- *Au contraire, si $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho} = |\psi_A\rangle\langle\psi_A|$ est un état pur, alors $\hat{\rho}_B = |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$ est aussi un état pur, et $\psi = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ est un **état produit** (non enchevêtré).*

Exemple : l'état partiel (9.2.3) est pur donc ψ_1 dans (9.2.2) n'est pas enchevêtré. Par contre (9.2.5) n'est pas pur, donc (9.2.4) est un état enchevêtré ou corrélé.

Remarque : en anglais, enchevêtré = "entangled".

9.2.2 Décomposition de Schmidt

Pour mettre en valeur la proposition suivante, remarquons que si $|e_i\rangle_i$ est une base de \mathcal{H}_A et $|f_j\rangle_j$ est une base de \mathcal{H}_B , donc $|e_i, f_j\rangle_{i,j}$ est une base de $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ et un état $\psi \in \mathcal{H}_{tot}$ se décompose dans cette base par une double somme :

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} |e_i, f_j\rangle \underbrace{\langle e_i, f_j | \psi \rangle}_{\psi_{i,j}} = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |e_i, f_j\rangle$$

Proposition 9.2.5. “Décomposition de Schmidt d’un état pur du système total”.

Si $\psi \in \mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ alors il existe une base $|e_i\rangle_{i=1 \rightarrow I}$ de \mathcal{H}_A et une base $|f_j\rangle_{j=1 \rightarrow J}$ de \mathcal{H}_B (qui dépendent de ψ) telles que

$$|\psi\rangle = \sum_i^{\min(I,J)} \psi_i |e_i, f_i\rangle \quad (9.2.6)$$

avec des composantes positives $\psi_1 \geq \psi_2 \geq \dots \geq 0$, vérifiant $\sum_i \psi_i^2 = 1$. Par définition, le **rang de Schmidt** de ψ est le nombre de composantes ψ_i non nulles.

Démonstration. En utilisant l’identification (métrique) $\mathcal{H}_A \equiv \mathcal{H}_A^*$ le vecteur $\psi \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ s’identifie à $\psi \in \mathcal{H}_A^* \otimes \mathcal{H}_B$ et donc à un opérateur linéaire $\psi \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B)$. La décomposition de Schmidt (9.2.6) est une application directe de la décomposition en valeur singulières de cet opérateur $\psi \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B)$. Pour les détails, voir [Fau10b]. \square

Conséquence pour l’opérateur densité $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ de cet état pur :

Corollaire 9.2.6. Les opérateur densité partiels sont diagonaux dans la base de Schmidt :

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) = \sum_i \psi_i^2 |e_i\rangle\langle e_i|$$

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A(\hat{\rho}) = \sum_i \psi_i^2 |f_i\rangle\langle f_i|$$

et donc $p_i = \psi_i^2$ sont des distributions de probabilité, et l’entropie de ces états partiels est

$$S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = - \sum_i p_i \log p_i = - \sum_i \psi_i^2 \log \psi_i^2.$$

En particulier, ρ_A (et ρ_B) sont des états purs et $\psi = |e_1\rangle \otimes |f_1\rangle$ est un état produit si et seulement si $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = 0$. Sinon ψ est un état enchevêtré.

9.2.3 Un modèle simple de décohérence

Voir le TD “*Modèle simple de décohérence induit par l’environnement.*” Ce modèle est issu d’un article de Zureck (90’).

Annexe A

Formules

A.1 Analyse et intégrales

A.1.1 Intégrales Gaussiennes

Formule 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-X^2) dX = \sqrt{\pi} \quad (\text{A.1.1})$$

Démonstration. Soit $I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$. Alors

$$\begin{aligned} I^2 &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \right) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \right) \\ &= \int_0^{\infty} dr r \int_0^{2\pi} d\theta e^{-r^2} = 2\pi \int_0^{\infty} r e^{-r^2} dr = 2\pi \left(\left[-\frac{1}{2} e^{-r^2} \right]_0^{\infty} \right) = \pi \end{aligned}$$

donc $I = \sqrt{\pi}$. □

Formule 2 Soit

$$Q(x) = Ax^2 + Bx + C$$

$A, B, C \in \mathbb{C}$ et $\Re(A) > 0$ pour la convergence.

Alors

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-Q(x)) dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp\left(-C + \frac{B^2}{4A}\right) \quad (\text{A.1.2})$$

Preuve : @@

Formule 3. Pour $n \geq 0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!!}{2^n}$$

où

$$(2n-1)!! := (2n-1)(2n-3)\dots 5.3.1 = \frac{(2n)!}{2^n (n!)}$$

appelée **double factorielle**. (par symétrie, pour une puissance impaire $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = 0$).

Démonstration. Il faut dériver la formule $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx$ par rapport à α et faire $\alpha = 1$ à la fin : soit

$$I_\alpha := \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

On a

$$\frac{d^n I_\alpha}{d\alpha^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} (-x^2)^n e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi} \left(\frac{-1}{2}\right) \left(\frac{-3}{2}\right) \dots \left(\frac{-2n-1}{2}\right)$$

donc

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!!}{2^n}$$

□

A.1.2 Transformée de Fourier

Dans \mathbb{R}^3 , on a la fonction de Green de la particule libre :

$$\langle x | \frac{1}{-\Delta + k^2} | y \rangle = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi |x-y|} \quad (\text{A.1.3})$$

Démonstration. On pose $k = i\kappa \in i\mathbb{R}$. Utilisant la relation de fermeture en base d'impulsion (et $\hbar = 1$),

$$\begin{aligned} \langle x | \frac{1}{-\Delta + k^2} | y \rangle &= \int d^3\vec{p} \langle x | p \rangle \langle p | y \rangle \frac{1}{(p^2 + \kappa^2)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{p} e^{i\vec{p}\cdot(x-y)} \frac{1}{(p^2 + \kappa^2)} \end{aligned}$$

Pour calculer cette intégrale, on passe en coordonnées sphériques et utilise la formule des résidus pour obtenir

$$\langle x | \frac{1}{-\Delta + k^2} | y \rangle = \frac{e^{-\kappa|x-y|}}{4\pi |x-y|} = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi |x-y|}$$

□

A.2 Algèbre

A.2.1 Séries

Série arithmétique et géométrique @@

A.2.2 Diagonalisation d'une matrice 2×2

Formule générale : On considère la matrice

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

Soit

$$\Delta = (a - d)^2 + 4bc.$$

Si $\Delta \neq 0$ alors la matrice A se diagonalise¹ :

$$A = PDP^{-1}, \quad P = \begin{pmatrix} a - d + \sqrt{\Delta} & a - d - \sqrt{\Delta} \\ 2c & 2c \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \frac{a+d+\sqrt{\Delta}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a+d-\sqrt{\Delta}}{2} \end{pmatrix},$$

Remarque : la matrice P contient les vecteurs propres en colonne, et ils sont définis à la multiplication près par un nombre.

Cas particulier : Si

$$A = \begin{pmatrix} 0 & b \\ \bar{b} & 0 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} |b| & -|b| \\ \bar{b} & \bar{b} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} |b| & 0 \\ 0 & -|b| \end{pmatrix}$$

A.2.3 Relations de commutation

On a :

$$\begin{aligned} [\hat{q}, \hat{p}] &= i\hbar \\ [\hat{q}, F(\hat{p})] &= i\hbar \frac{dF(\hat{p})}{d\hat{p}} \\ [F(\hat{q}), \hat{p}] &= i\hbar \frac{dF(\hat{p})}{d\hat{q}} \end{aligned}$$

preuve : Voir [CBF]p 172.

1. Avec le logiciel gratuit **xcas** de calcul formel (pour l'obtenir, taper **xcas** dans google). Et dans xcas, écrire : `A:=[[a,b],[c,d]]`; `D:=eigv1(A)`; `P:=eigv(A)`; On vérifiera que `simplify(P*D*inv(P))`; redonne bien la matrice A .

Si les opérateurs A, B vérifient :

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

alors on a la **formule de Glauber**

$$\exp(A) \exp(B) = \exp([A, B]/2) \exp(A + B) \quad (\text{A.2.1})$$

preuve : Voir [CBF]p 174, ou TD.

Autre preuve : poser $C = i[A, B]$; Alors les trois opérateurs (A, B, C) vérifient l'algèbre de Weyl-Heisenberg (comme $\hat{q}, \hat{p}, i\hbar$) :

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

Considérons les matrices :

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

qui vérifient aussi la même algèbre. On procède comme dans la section 2.2.6.4, on vérifie sur les matrices 3×3 que $e^a e^b = e^{c/2} e^{a+b}$ \square .

A.2.4 Algèbre des matrices de Pauli

On a

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B}) \quad (\text{A.2.2})$$

valable même si \vec{A}, \vec{B} sont des opérateurs.

Si \vec{u} vecteur unitaire :

$$\exp(i\varphi \vec{\sigma} \cdot \vec{u}) = \cos \varphi + i \sin \varphi \vec{\sigma} \cdot \vec{u}$$

A.2.5 Relations sur les matrices

Pour une matrice A (ou un opérateur à Trace) on a :

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

A.2.6 Inverse d'une matrice 2×2

Si $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ et $\text{Det}(A) = ad - bc \neq 0$ alors

$$A^{-1} = \frac{1}{\text{Det}(A)} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

A.2.7 Relations de commutations

Pour 3 opérateurs A, B, C on a

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

Démonstration. On écrit :

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC - CAB = A([B, C] + CB) - CAB \\ &= A[B, C] + [A, C]B \end{aligned}$$

□

A.3 Calcul différentiel dans \mathbb{R}^3

références : Jackson [Jac75], début et fin.

Ici $f(\vec{x})$ représente une fonction. $\vec{V}(\vec{x})$ représente un champ de vecteurs.

A.3.1 Rappels sur le calcul différentiel vectoriel.

Voir Feynmann “Electromagnétisme”, chap 2.

- Pour un champ scalaire $V(x, y, z)$, le champ vectoriel $\vec{W} = \overrightarrow{\text{grad}}V$ a pour coordonnées : $W_x = \frac{\partial V}{\partial x}$, $W_y = \frac{\partial V}{\partial y}$, $W_z = \frac{\partial V}{\partial z}$. On écrit aussi : $\overrightarrow{\text{grad}}V = \vec{\nabla}V$.
- Si $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ sont les coordonnées du champ vectoriel $\vec{E}(\vec{x})$, alors le champ $\vec{W} = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{E}$ a pour coordonnées :

$$\begin{aligned} W_x &= \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ W_y &= \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \\ W_z &= \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \end{aligned}$$

on s'en rappelle en écrivant : $\overrightarrow{\text{rot}}\vec{E} = \vec{\nabla} \wedge \vec{E}$ avec “l’opérateur vectoriel” $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$.

- Et

$$\text{div}\vec{E} = \left(\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} \right)$$

qui se retient en écrivant $\text{div}\vec{E} = \vec{\nabla} \cdot \vec{E}$.

- Le **Laplacien** ΔV est le champ scalaire :

$$\Delta V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$$

Propriétés importantes :

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\text{rot}}(\overrightarrow{\text{grad}}V) &= \vec{0} \\ \text{div}(\overrightarrow{\text{rot}}\vec{E}) &= 0 \\ \text{div}(\overrightarrow{\text{grad}}V) &= \Delta V \\ \overrightarrow{\text{rot}}\overrightarrow{\text{rot}}(\vec{a}) &= \overrightarrow{\text{grad}}(\text{div}(\vec{a})) - \Delta\vec{a}\end{aligned}$$

Formules de Stokes

- Si γ est un chemin dont a, b sont les extrémités, alors

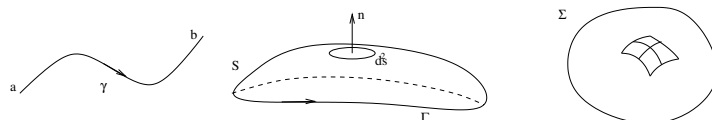
$$\int_{\gamma} \overrightarrow{\text{grad}}(f) \cdot d\vec{l} = f(b) - f(a)$$

- Si S est une surface dont γ est le contour, alors

$$\int_S \overrightarrow{\text{rot}}(\vec{V}) \cdot \vec{n} d^2s = \int_{\Gamma} \vec{V} \cdot d\vec{l}$$

- Si V est un volume dont le bord est la surface $S = \partial V$, alors

$$\int_V \text{div}(\vec{V}) d^3v = \int_{\Sigma=\partial V} \vec{V} \cdot \vec{n} d^2s$$



Lemme de Poincaré : Réciproquement les formules suivantes

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\text{grad}}f = 0 &\Rightarrow f = \text{cste} \\ \overrightarrow{\text{rot}}\vec{u} = 0 &\Rightarrow \exists f, \text{ tq } \vec{u} = \overrightarrow{\text{grad}}f \\ \text{div}\vec{v} = 0 &\Rightarrow \exists \vec{u}, \text{ tq } \vec{v} = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{u}\end{aligned}$$

ne sont pas toujours vraies. Elles sont vraies sur un domaine \mathcal{D} de l'espace qui est une boule (contractible en un point), ne contenant donc pas de trous.

A.3.2 En coordonnées sphériques :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(f) = (\partial_r f) \vec{e}_r + \left(\frac{1}{r} \partial_\theta f\right) \vec{e}_\theta + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \partial_\varphi f\right) \vec{e}_\varphi \quad (\text{A.3.1})$$

A.3.3 Relations

$$\vec{a} \wedge (\vec{b} \wedge \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}} (\vec{a} \wedge \vec{b}) = \vec{a} (\text{div } \vec{b}) - \vec{b} (\text{div } \vec{a}) + (\vec{b} \cdot \overrightarrow{\nabla}) \vec{a} - (\vec{a} \cdot \overrightarrow{\nabla}) \vec{b}$$

$$\overrightarrow{\text{div}} (\vec{a} \wedge \vec{b}) = \overrightarrow{\text{rot}}(\vec{a}) \cdot \vec{b} - \vec{a} \cdot \overrightarrow{\text{rot}}(\vec{b}) \quad (\text{A.3.2})$$

$$\overrightarrow{\text{rot}} (f \cdot \vec{V}) = \overrightarrow{\text{grad}}(f) \wedge \vec{V} + f \overrightarrow{\text{rot}}(\vec{V}) \quad (\text{A.3.3})$$

$$\text{div} (f \vec{a}) = \text{grad} (f) \cdot \vec{a} + f \cdot \text{div}(\vec{a}) \quad (\text{A.3.4})$$

$$\text{div}(\vec{e}_r) = \frac{2}{r}$$

$$(\vec{a} \cdot \overrightarrow{\nabla}) \vec{e}_r = \frac{1}{r} (\vec{a} - (\vec{a} \cdot \vec{e}_r) \vec{e}_r) \equiv \frac{\vec{a}_\perp}{r}$$

Annexe B

Solutions des exercices

B.1 Chapitre 1

Exercice 1.1.2 page 24

$$\langle x_0, p_0, \sigma | x_0, p_0, \sigma \rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \int dx \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right) = \frac{1}{(\pi)^{1/2}} \int dX \exp(-X^2) = 1$$

C'est une intégrale Gaussienne, voir eq.(A.1.1), avec le changement de variable $X = \frac{x-x_0}{\sigma}$.

Exercice 2 page 43 Il y a une infinité d'autres possibilités plus ou moins explicites. En voici un exemple simple. $(W_k)_k$ défini par

$$W_0 = V_0$$

$$W_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_k + V_{-k}), \quad W_{-k} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(V_k - V_{-k}), \quad \text{si } k > 0$$

On remarque que $W_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k2\pi x}{L}\right)$, $W_{-k}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k2\pi x}{L}\right)$ pour $k > 0$.

Exercice 4 page 51 Vérifions la relation $\langle x|\hat{x}|\phi \rangle = x \langle x|\phi \rangle$. On a en effet $\langle x|\int x'|x' \rangle \langle x'|dx'|\phi \rangle = \int x' \delta(x'-x) \langle x'|\phi \rangle = x \langle x|\phi \rangle$.

Remarque : une telle écriture n'est pas correcte mathématiquement car $|x\rangle \notin \mathcal{H}$. L'outil mathématique approprié est le théorème spectral. L'idée est d'introduire le projecteur $\hat{P}_x = \int_{-\infty}^x |x\rangle \langle x| dx$ et d'écrire de façon équivalente $\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x dP_x$.

Exercice 5 page 53 on a

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p) &= \langle p | x_0, p_0, \sigma \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | x_0, p_0, \sigma \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \int dx \exp\left(i\frac{(p_0 - p)x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \\
 &= \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(i\frac{x_0 p_0}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{x_0 p}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right) \quad (\text{B.1.1})
 \end{aligned}$$

où l'intégrale Gaussienne se calcule par la formule (A.1.2). Remarquer la similarité de l'expression obtenue pour $\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p)$ avec celle de $\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)$, mis à part facteur de phase constant.

Exercice 1.6.5 page 70

1. Partant de $\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \hat{U}(-t) \hat{A}(t) \hat{U}(t) | \psi \rangle$ avec $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$.
On dérive en $t = 0$: $\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = \langle \psi | \frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{A} - \hat{A} \frac{i\hat{H}}{\hbar} + \frac{d\hat{A}}{dt} | \psi \rangle$ donnant le résultat souhaité.
2. Pour $\hat{A} = \hat{H}$ supposé indépendant du temps, cela donne $\frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0$ qui montre la conservation de l'énergie moyenne au cours du temps.
3. On a $d\langle \hat{x} \rangle / dt = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar 2m} \langle [\hat{x}, \hat{p}^2] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$ où la dernière égalité utilise une relation de la page 363. De même $d\langle \hat{p} \rangle / dt = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V(\hat{x})] \rangle = -\langle \frac{dV}{dx}(\hat{x}) \rangle$.

B.2 Chapitre 2

Exercice 2.1.5 page 94 par définition, $\langle x | \hat{T}_\lambda | \psi \rangle = \langle x - \lambda | \psi \rangle$, $\forall | \psi \rangle$. Donc $\langle x | \hat{T}_\lambda^+ = \langle x - \lambda |$. Donc $\hat{T}_\lambda^+ | x \rangle = | x - \lambda \rangle$. Ensuite, \hat{T}_λ est un opérateur unitaire, et $\hat{T}_\lambda^+ = \hat{T}_\lambda^{-1} = \hat{T}_{-\lambda}$. donnant $\hat{T}_{-\lambda} | x \rangle = | x - \lambda \rangle$.

Exercice 2.1.7 page 97

1. $\hat{U}(t_0) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H} t_0\right)$. En effet si on dérive $|\psi(t + t_0)\rangle = \hat{U}(t_0) |\psi(t)\rangle$, par rapport à t_0 , on obtient $\frac{\partial |\psi(t + t_0)\rangle}{\partial t_0} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{H} \hat{U}(t_0) |\psi(t)\rangle = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{H} |\psi(t + t_0)\rangle$ qui est l'équation de Schrödinger. Par ailleurs pour $t_0 = 0$, on a bien $\hat{U}(t_0 = 0) = \hat{I}$.
2. On a

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle x | \psi_{x_0} \rangle}{\partial x_0} &= \frac{\partial}{\partial x_0} \psi(x - x_0) = -\frac{\partial}{\partial x} \psi(x - x_0) = -\frac{\partial}{\partial x} \psi_{x_0}(x) = -\frac{\partial}{\partial x} \langle x | \psi_{x_0} \rangle \\
 &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \langle x | \psi_{x_0} \rangle = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \langle x | \hat{p} \psi_{x_0} \rangle
 \end{aligned}$$

car $\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Donc $\frac{\partial |\psi_{x_0}\rangle}{\partial x_0} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p} |\psi_{x_0}\rangle$. Notant $|\psi_{x_0}\rangle = \hat{T}_{x_0} |\psi\rangle$, comme dans la question (1), on déduit que $\frac{\partial \hat{T}(x_0)}{\partial x_0} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p} \hat{T}(x_0)$ et donc $\hat{T}(x_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p} x_0\right)$.

3. Soit $\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle$. En suivant le même calcul que ci-dessus, le générateur des boosts est $\hat{b} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$. Or on sait que $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ (cela se vérifie sur l'équation $\langle p | \hat{x} | x \rangle = x \langle p | x \rangle = x \text{Cste } e^{-ipx/\hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle x | p \rangle$). Donc $\hat{b} = -\hat{x}$. On déduit que $\hat{B}(p_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right) (-\hat{x}) p_0\right)$.

4. On déduit que $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]}$ et donc que $e^{-\hat{A}} e^{-\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{[\hat{A}, \hat{B}]}$. Dans le cas qui nous intéresse, $e^{\hat{A}} = \hat{T}(x_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p} x_0\right)$, soit $\hat{A} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \hat{p} x_0$, et $e^{\hat{B}} = \hat{B}(p_0) = \exp\left(\left(\frac{-i}{\hbar}\right) (-\hat{x}) p_0\right)$, soit $\hat{B} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) (-\hat{x}) p_0$. D'après $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I}d$, on obtient $[\hat{A}, \hat{B}] = -\left(\frac{-i}{\hbar}\right) x_0 \left(\frac{-i}{\hbar}\right) p_0 [\hat{p}, \hat{x}] = -ix_0 p_0 / \hbar = -i\mathcal{S} / \hbar$, donnant la relation recherchée.

$\mathcal{S} / (2\pi\hbar)$ est le nombre de cellules de Planck ($2\pi\hbar$) contenues dans la surface \mathcal{S} . Ce nombre intervient dans la formule de Weyl, voir cours.

Exercice 2.2.7 page 111 (voir aussi [DGLR89] p.378).

1. On a $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

$$P_n = \frac{1}{Z} \exp(-E_n / (k_B T)) = \frac{1}{Z} e^{-\alpha(n+1/2)}$$

avec

$$\alpha = \frac{\hbar\omega}{kT} = \frac{\Theta}{T}$$

Calcul de la constante Z : il faut $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$ (normalisation des probabilités). On a la série géométrique $S_\alpha := \left(\sum_{n \geq 0} e^{-\alpha n}\right) = \frac{1}{1-e^{-\alpha}}$ donc

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} P_n = \frac{1}{Z} e^{-\alpha/2} S_\alpha$$

donc

$$Z = \frac{e^{-\alpha/2}}{1 - e^{-\alpha}}$$

Alors

$$\begin{aligned} \langle E_x \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} P_n E_n = \frac{\hbar\omega}{Z} \sum_n e^{-\alpha(n+1/2)} \left(n + \frac{1}{2}\right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{Z} e^{-\alpha/2} \left(\sum_n n e^{-\alpha n} + \frac{1}{2} \sum_n e^{-\alpha n}\right) \end{aligned}$$

Il nous faut calculer

$$\sum_{n \geq 0} n e^{-\alpha n} = -\frac{d}{d\alpha} (S_\alpha) = \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2}$$

Donc

$$\langle E_x \rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right) \left(\frac{1 + e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} \right) = \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right) \coth \left(\frac{\alpha}{2} \right) = \left(\frac{k\Theta}{2} \right) \coth \left(\frac{\Theta}{2T} \right)$$

2. Pour l'énergie moyenne d'un atome à 3 dim :

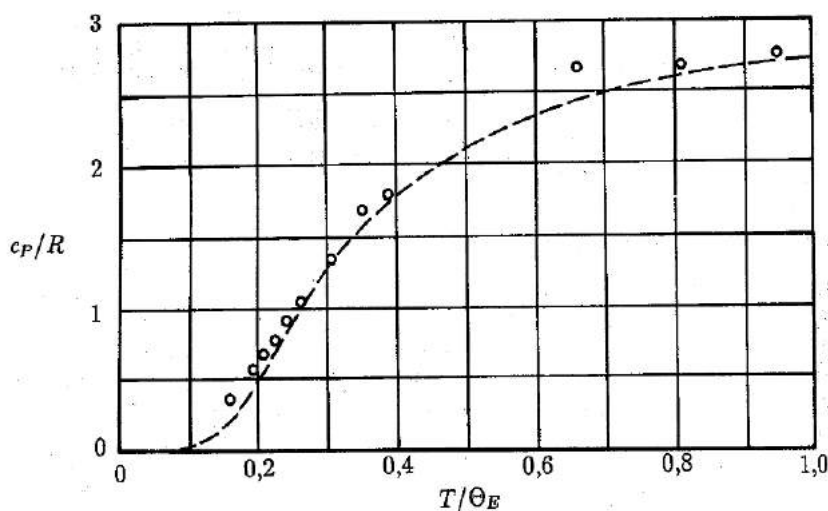
$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle E_x \rangle + \langle E_y \rangle + \langle E_z \rangle \\ &= 3 \left(\frac{k\Theta}{2} \right) \coth \left(\frac{\Theta}{2T} \right) \end{aligned}$$

Pour une mole d'atomes, l'énergie moyenne est $\langle U \rangle = \mathcal{N} \langle E \rangle$ avec $\mathcal{N} = \frac{R}{k}$ nombre d'Avogadro. Alors

$$\langle U \rangle = \frac{3R\Theta}{2} \coth \left(\frac{\Theta}{2T} \right)$$

et donc la capacité calorifique molaire est

$$C = \frac{d\langle U \rangle}{dT} = \frac{3R\Theta}{2} \frac{(-1)}{\sinh^2 \left(\frac{\Theta}{2T} \right)} \left(\frac{-\Theta}{2T^2} \right) = 3R \left(\frac{\Theta}{2T} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2 \left(\frac{\Theta}{2T} \right)}$$



Pour $T \ll \Theta$, on a $C \sim \frac{1}{T^2} e^{-\Theta/T} \rightarrow 0$. On remarque que

$$\Theta = \frac{\hbar\omega}{k} = \frac{\hbar}{k} \sqrt{\frac{K}{m}}$$

où K est la "constante de raideur" de la liaison entre atomes. Donc **Corps dur (diamant)** $\Leftrightarrow K$ élevé $\Leftrightarrow \Theta$ élevé.

Pour $T \gg \Theta$ on a $C \rightarrow 3R$. Cette valeur s'obtient aussi par le théorème d'équipartition de l'énergie (valable en mécanique classique pour des Hamiltoniens quadratiques seulement).

Exercice 2.2.8 page 119

1. On a $\lambda_x = 2L/a$, $\lambda_y = 2L/b$, $\lambda_z = 2L/d$, avec $a, b, d \in \mathbb{N}^*$ entiers. Donc $k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = \frac{\pi}{L}a$, etc.... La fréquence de ce mode (a, b, d) est $\omega_{a,b,d} = ck = c(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} = \pi c \left(\frac{a^2}{L^2} + \frac{b^2}{L^2} + \frac{d^2}{L^2} \right)^{1/2}$. L'énergie du vide quantique dans la boîte est alors (en pensant aux deux états de polarisations possibles)

$$\mathcal{E}(l) = 2 \sum_{a,b,d>0} \frac{1}{2} \hbar \omega_{a,b,d}$$

La divergence de $\mathcal{E}(l)$ est due aux hautes fréquences ω ; appelée **divergence ultraviolette**.

2. On a

$$\mathcal{E}(l) = \hbar \sum_{a,b,d>0} \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

et $\omega_{a,b,d} = \frac{\pi c}{L} \left(\left(\frac{l}{L} \right)^2 (a^2 + b^2) + d^2 \right)^{1/2}$. Comme $(l/L) \ll 1$, on peut traiter a, b comme des variables continues dans la somme (approximation de Riemann d'une intégrale), et donc

$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar \sum_{d>0} \int da db \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

Ensuite, on utilise des coordonnées polaires $(a, b) \rightarrow (u, \theta)$, c'est à dire $(a^2 + b^2) = u^2$ et $dad b = u du d\theta$, et $\theta = 0 \rightarrow \pi/2$. Alors

$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar \left(\frac{\pi}{2} \right) \sum_{d>0} \int_0^\infty du u \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

Finalement, le changement de variable $u \rightarrow \omega = \frac{\pi c}{L} \left(\left(\frac{l}{L} \right)^2 u^2 + d^2 \right)^{1/2}$, donne $\omega d\omega = u du \left(\frac{\pi c}{L} \right)^2$ et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(l) &\simeq \hbar \left(\frac{\pi}{2} \right) \left(\frac{L}{\pi c} \right)^2 \sum_{d>0} \int_{\omega_0}^\infty d\omega \omega^2 e^{-\omega/\omega_c} \\ &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \sum_{d>0} \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_{\omega_0}^\infty d\omega e^{-\alpha\omega} \\ &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \sum_{d>0} \frac{d^2}{d\alpha^2} \left(\frac{1}{\alpha} e^{-\alpha\omega_0} \right) \end{aligned}$$

avec $\omega_0 = \frac{\pi c}{L} d$, et $\alpha = 1/\omega_c$. Ensuite $\sum_{d>0} e^{-\alpha\omega_0} = \sum_{d>0} \left(e^{-\alpha \frac{\pi c}{L}} \right)^d = \frac{-e^{-\alpha \frac{\pi c}{L}}}{1 - e^{-\alpha \frac{\pi c}{L}}} =$

$\frac{1}{e^{\alpha \frac{\pi c}{l}} - 1}$ (suite géométrique). Donc

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \frac{d^2}{d\alpha^2} \left(\frac{1}{\alpha e^{\alpha \frac{\pi c}{l}} - 1} \right) \\ &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2l^3} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{1}{x(e^x - 1)} \right)\end{aligned}$$

avec $x = \alpha \pi c / l = \pi c / (\omega_c l)$.

3. Ensuite

$$\frac{1}{x(e^x - 1)} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{12} - \frac{1}{30 \times 24} x^2 + O(x^3)$$

donc

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{1}{x(e^x - 1)} \right) = \frac{6}{x^4} - \frac{1}{x^3} - \frac{1}{15 \times 24} + O(x)$$

et

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2l^3} \left(6 \left(\frac{\omega_c l}{\pi c} \right)^4 - \left(\frac{\omega_c l}{\pi c} \right)^3 - \frac{1}{15 \times 24} + O(1/\omega_c) \right) \\ &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left(6 \left(\frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 l - \left(\frac{\omega_c}{\pi c} \right)^3 - \frac{1}{15 \times 24} \frac{1}{l^3} + O(1/\omega_c) \right)\end{aligned}$$

4. On a

$$\begin{aligned}U(l) &= \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l) = \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left(6 \left(\frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 L - \frac{1}{15 \times 24} \left(\frac{1}{l^3} + \frac{1}{(L-l)^3} \right) + \dots \right) \\ &\simeq \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left(6 \left(\frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 L - \frac{1}{15 \times 24} \left(\frac{1}{l^3} \right) + \dots \right),\end{aligned}$$

pour $L \gg l$. Donc $F_{Casimir}(l) = -\frac{dU}{dl} = -\frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left(\frac{3}{15 \times 24} \frac{1}{l^4} + \dots \right)$ et pour $\omega_c \rightarrow \infty$, les termes suivants s'annulent, donc

$$F_{Casimir}(l) = -\frac{\hbar c \pi^2 L^2}{240} \frac{1}{l^4}$$

Exercice 2.2.13 page 126

1. Utiliser la relation (A.2.1), qui s'applique car $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar Id$, $[a, a^+] = Id$.
2. Utiliser les expressions (2.2.29), et pour montrer la dernière ligne, le fait que $a|0\rangle = 0$, donc $\exp(-\bar{z}a)|0\rangle = \sum_n \frac{(-\bar{z}a)^n}{n!} |0\rangle = |0\rangle$.
3. Calculer $d(e^{\alpha a}|qp\rangle)/d\alpha$ en $\alpha = 0$.

Exercice 2.2.15 page 128

1. On vérifie que cette représentation par des matrices 3×3 vérifie bien les règles (2.2.15). Par exemple, on calcule : $[\varphi(a), \varphi(a^+)] = \varphi(a)\varphi(a^+) - \varphi(a^+)\varphi(a) = \dots = \varphi(\hat{I})$; etc...

2. On a $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$, donc $\varphi(-i\alpha'\hat{Q}) = (-i\alpha') \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, et $\varphi(\exp(-i\alpha'\hat{Q})) =$

$$\exp\left(\varphi(-i\alpha'\hat{Q})\right) = \begin{pmatrix} 1 & (-i\alpha')/\sqrt{2} & -\alpha'^2/4 \\ 0 & 1 & (-i\alpha')/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \text{ Pour cette dernière égalité,}$$

on utilise le fait que, posant $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, on a $M^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ et

$M^n = 0$ pour $n > 2$. Donc $\exp(\lambda M) = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} (\lambda M)^n = M^0 + \lambda M + \frac{1}{2} \lambda^2 M^2 =$

$\begin{pmatrix} 1 & \lambda & \lambda^2/2 \\ 0 & 1 & \lambda \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. On procède de même pour les quatre autres expressions. Finalement, on calcule le produit de matrices,¹ :

$$\begin{aligned} \varphi(\exp(-i\gamma'\hat{I})) \varphi(\exp(-i\alpha'\hat{Q})) \varphi(\exp(-i\beta'\hat{P})) \varphi(\exp(-i\theta\hat{n})) \\ = \begin{pmatrix} 1 & A' & B' \\ 0 & e^{-i\theta} & C' \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$A' = -\bar{z}'e^{-i\theta}, \quad B' = -i\gamma' + \frac{1}{2}|z'|^2 - \frac{i}{2}\Im(z'^2), \quad C' = z'$$

que l'on identifie avec (2.2.37), pour obtenir (2.2.34).

Exercice 2.3.2 page 133 $E_F \simeq 3eV$, $V_F \simeq 10^6 m/s$.

Exercice 6 page 133

1. Un mode occupe le volume élémentaire $\Delta^3 \vec{x} \Delta^3 \vec{k} = (2\pi)^3$ dans l'espace de phase (\vec{x}, \vec{k}) . Considérons un intervalle de fréquence $d\nu$. D'après $\omega = 2\pi\nu = ck$, cela correspond à

$$dk = \frac{2\pi}{c} d\nu$$

et à un volume dans l'espace \vec{k} de

$$\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$$

1. Pour ces produits de matrices, ainsi que ces exponentielles de matrices, on aura intérêt à utiliser un logiciel de calcul formel (comme Maple, Mathematica ou Xcas qui est un logiciel gratuit et libre).

(volume de la sphère de rayon k et épaisseur dk). Donc dans un volume V et un intervalle de fréquence $d\nu$ contiennent

$$dn = 2(V \mathcal{V}_k) / (2\pi)^3$$

modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode (droite/gauche). Donc

$$dn = \frac{2V \left(4\pi k^2 \frac{(2\pi)}{c} d\nu \right)}{(2\pi)^3} = \frac{8\pi V \nu^2}{c^3} d\nu$$

2. On a $\langle N_{mode} \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} P_N N$, avec la probabilité $P_N = \frac{1}{Z} \exp(-E_N/kT)$. Comme $1 = \sum_N P_N$, on déduit que la constante Z est donnée par

$$\begin{aligned} Z &= \sum_N \exp(-E_N/kT) = \sum_N \exp(-\alpha(N + 1/2)) \\ &= e^{-\alpha/2} \underbrace{\sum_{N \geq 0} e^{-\alpha N}}_S \end{aligned}$$

avec $\alpha = (\hbar\omega) / kT$ et la série géométrique $S = \sum_{N \geq 0} e^{-\alpha N} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha}}$. Alors

$$\begin{aligned} \langle N_{mode} \rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} P_N N \\ &= \frac{1}{Z} \sum_N N \exp(-\alpha(N + 1/2)) \\ &= \frac{1}{e^{-\alpha/2} S} e^{-\alpha/2} \left(-\frac{dS}{d\alpha} \right) = \frac{1}{S} \left(-\frac{dS}{d\alpha} \right) = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} \\ &= \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1} \end{aligned}$$

appelée **distribution de Bose-Einstein**. Ensuite

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{dN}{dn} \frac{dn}{d\nu} = \langle N_{mode} \rangle \frac{dn}{d\nu}$$

$$3. u(\nu) = \frac{1}{V} (h\nu) \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3 \left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)}$$

1. Un mode occupe $\Delta^3 \vec{x} \Delta^3 \vec{k} = (2\pi)^3$. Considérons un intervalle de fréquence $d\nu$. Pour les ondes S, cela correspond à $dk = \frac{2\pi}{v_S} d\nu$, et un volume dans l'espace \vec{k} de $\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$ (volume de la sphère de rayon k et épaisseur dk). Donc dans un volume V et un intervalle de fréquence $d\nu = \frac{v_S}{2\pi} dk$ contiennent $dn_S = 2(V \mathcal{V}_k) / (2\pi)^3$ modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode. Donc

$$dn_S = \frac{2(4\pi)V\nu^2 d\nu}{v_S^3}$$

de même pour les ondes P :

$$dn_P = \frac{(4\pi)V\nu^2 d\nu}{v_P^3}$$

2. D'après l'hypothèse d'équidistribution entre les modes, le rapport d'énergie est égal au rapport du nombre de modes :

$$\frac{E_P}{E_S} = \frac{dn_P}{dn_S} = \frac{1}{2} \left(\frac{v_S}{v_P} \right)^3 = \frac{1}{2(1,73)^3} \simeq \frac{1}{10}$$

Exercice 9 page 136

1. On a $\hat{T}_q \hat{B}_p = \exp(-iq\hat{p}/\hbar) \exp(ip\hat{x}/\hbar)$. Utiliser (A.2.1), avec $A = -iq\hat{p}/\hbar$, $B = ip\hat{x}/\hbar$, $[A, B] = (qp/\hbar^2)(-i\hbar)$ donnant $e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]}$ donc $\hat{T}_q \hat{B}_p = e^{-iS/\hbar} \hat{B}_p \hat{T}_q$, avec $S = qp$ qui est la surface du carré dans l'espace de phase concerné par les translations. En terme de mécanique analytique, c'est une action. Les opérateurs commutent lorsque $S = nh$, $n \in \mathbb{N}$ c'est à dire lorsque la surface contient un nombre entier de cellules de Planck.
2. Utiliser (A.2.1) : $e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]}$. On a $B = i(P_2 - P_1)(\hat{Q} - Q_1) - i(Q_2 - Q_1)(\hat{P} - P_1)$, $A = i(P_3 - P_2)(\hat{Q} - Q_2) - i(Q_3 - Q_2)(\hat{P} - P_2)$, et $\frac{1}{2}[A, B] = -\frac{i}{2}(P_2 - P_1)(Q_3 - Q_2) + \frac{i}{2}(Q_2 - Q_1)(P_3 - P_2) = -\frac{i}{2} \vec{23} \wedge \vec{12} = -iS/\hbar$: produit vectoriel et S est la surface hachurée (dans les unités q, p). On a $S/\hbar = \frac{1}{2}(P_2 Q_3 - P_1 Q_3 + P_1 Q_2 - Q_2 P_3 + Q_2 P_1 - P_3 Q_1)$. On a donc

$$\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = e^{-iS/\hbar} \exp(A + B) = e^{-iS/\hbar} \exp\left(i(P_3 - P_1)\hat{Q} - i(Q_3 - Q_1)\hat{P}\right) \exp\left(i(-P_2 Q_1 + Q_2 P_1 - P_3 Q_1)\right)$$

. Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \hat{D}_{1,3} &= \exp\left(i(P_3 - P_1)(\hat{Q} - Q_1) - i(Q_3 - Q_1)(\hat{P} - P_1)\right) \\ &= \exp\left(i(P_3 - P_1)\hat{Q} - i(Q_3 - Q_1)\hat{P}\right) \exp\left(i(-P_3 Q_1 + Q_3 P_1)\right) \end{aligned}$$

. Finalement, $\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \hat{D}_{1,3} e^{-iS/\hbar} e^{i2S/\hbar} = e^{+iS/\hbar} \hat{D}_{1,3}$.

3. Par récurrence.

Exercice 10 page 137

1. $H(q, p) = H(q_0, p_0) + (q - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (p - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p} + o(\Delta q, \Delta p)$, avec $\Delta q = q - q_0$, $\Delta p = p - p_0$.
2. $\hat{H}|q_0, p_0 \rangle \simeq \left(H(q_0, p_0) Id + (\hat{q} - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (\hat{p} - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p} \right) |q_0, p_0 \rangle$. (On a remplacé q et p par les \hat{q} et \hat{p}).
3. Ainsi

$$\begin{aligned} \hat{U}(\Delta t)|q_0, p_0 \rangle &= \exp\left(-i\hat{H}\Delta t/\hbar\right)|q_0, p_0 \rangle \\ &\simeq \exp\left(-i\left(H(q, p) Id + (\hat{q} - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (\hat{p} - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p}\right)\Delta t/\hbar\right)|q_0, p_0 \rangle \end{aligned}$$

donc $\hat{U}(\Delta t)|q_0, p_0 \rangle = \exp(-iE\Delta t/\hbar)\hat{D}_{0,1}|q_0, p_0 \rangle$, avec $q_1 - q_0 = \frac{\partial H}{\partial p}\Delta t$ et $p_1 - p_0 = -\frac{\partial H}{\partial q}\Delta t$ sont les déplacements du point (q_0, p_0) par la dynamique classique, et $E = H(q_0, p_0)$ est l'énergie du point classique, conservée au cours du temps. Sur la durée Δt infinitésimale, le paquet d'onde est donc translaté dans l'espace de phase, comme le point classique.

4. Alors en sommant des déplacements infinitésimaux,

$$\hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle \simeq \exp(-iEt/\hbar) \prod_{i=0}^{N-1} \hat{D}_{i,i+1}|q_0, p_0 \rangle = \exp(-iEt/\hbar) \exp(iS/\hbar) \hat{D}_{0,M(t)}|q_0, p_0 \rangle$$

, où $M(t)$ est l'évolution classique.

5. On a $\hat{U}(t')|\phi \rangle = \int_0^T e^{iE(t+t'-t')/\hbar} \hat{U}(t+t')|q_0, p_0 \rangle = e^{-iEt'/\hbar} \int_0^{T+t'} e^{iEt/\hbar} \hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt = e^{-iEt'/\hbar}|\phi \rangle$, à condition que $e^{iET/\hbar}\hat{U}(T)|q_0, p_0 \rangle = |q_0, p_0 \rangle$, car alors

$$\int_T^{T+t'} e^{iEt/\hbar} \hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt = \int_0^{t'} e^{iEt/\hbar} \hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt$$

6. D'après ci-dessus, la condition s'écrit : $\exp(iS/\hbar) \hat{D}_{0,M(T)}|q_0, p_0 \rangle = |q_0, p_0 \rangle$, où S est la surface de la trajectoire (action). Or $M(T) = M(0)$, donc il faut $\exp(iS/\hbar) = 1$, soit

$$S = hn, \quad n \in \mathbb{N}$$

appelée **règle de quantification de Bohr-Sommerfeld** : la surface doit contenir un nombre entier de cellules de Planck.

Pour l'oscillateur Harmonique, cela donne (voir section précédente) $E_n \simeq \hbar\omega n$. (Il manque l'indice 1/2).

Exercice 2.3.3 page 140 (Voir [CBF] p571). On a $J = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp |x, p, \sigma\rangle \langle x, p, \sigma| = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp D(z)|0\rangle \langle 0|D^\dagger(z)$. Or $D(z)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp(za^+) \exp(-\bar{z}a^-)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) e^{za^+}|0\rangle$. Or $e^{za^+}|0\rangle = \sum_{n \geq 0} \frac{z^n a^{+n}}{n!}|0\rangle = \sum_{n \geq 0} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$.

Donc $J = \sum_{n,n'} \int \frac{dx dp}{h} \frac{z^n \bar{z}^{n'}}{\sqrt{n!n'}} e^{-|z|^2} |n\rangle \langle n'|$. Mais d'une part $\frac{dx \wedge dp}{h} = dQ \wedge dP$ et $\int dQ dP z^n \bar{z}^{n'} e^{-|z|^2} = \int dp d\theta e^{-\rho^2} \rho^{n+n'} e^{i\theta(n-n')} = n! \delta_{n,n'}$ en coordonnées polaires (ρ, θ) et intégration sur ρ par parties. Donc $J = \sum_{n \geq 0} |n\rangle \langle n| = \hat{I}$. De façon plus élégante, cette relation de fermeture est une simple conséquence du lemme de Schur (théorie des groupes) voir [Per86] p.15.

Exercice 8 page 136 @@ revoir, voir correction de JJB @@

1. Le Hamiltonien classique est :

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Soit une valeur $E < 0$ fixée. On cherche le volume de l'espace de phase des points :

$$\Sigma_E = \{(\vec{x}, \vec{p}) / H(\vec{x}, \vec{p}) \leq E\}$$

On utilise naturellement les coordonnées sphériques : $\vec{p} \equiv (p, \varphi_p, \theta_p)$ et $\vec{x} \equiv (r, \varphi, \theta)$. Alors (utilisant $d\vec{x} = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$)

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(E) &= Vol(\Sigma_E) = \int_{\Sigma_E} d\vec{x} d\vec{p} \\ &= (4\pi)^2 \int_{E \geq \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}} r^2 p^2 dr dp \\ &= (4\pi)^2 \frac{e^4}{3(4\pi\epsilon_0)^2} \int_0^\infty p^2 dp \frac{1}{\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)^3} \\ &= (4\pi)^2 \frac{e^4}{3(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{m^{3/2}\pi}{4\sqrt{2}(-E)^{3/2}} \right) = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{12\sqrt{2}(-E)^{3/2} \epsilon_0^2} \end{aligned}$$

Ensuite d'après (2.3.2),

$$N(E) = \frac{\mathcal{V}(E)}{h^3} = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{12\sqrt{2}(-E)^{3/2} \epsilon_0^2 h^3}$$

2. On déduit la densité de niveaux semi-classique $\rho_{sc}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{8\sqrt{2}(-E)^{5/2} \epsilon_0^2 h^3}$, qui est une expression valable lorsque les niveaux deviennent denses, c'est à dire pour $E \rightarrow 0^-$.
3. A partir de l'expression $E_n^{exact} = -\frac{\epsilon_1}{n^2}$ avec $\epsilon_1 = \frac{me^4}{2h^2} = 13,6 \text{ eV}$, on a (sans oublier la dégénérescence du niveau E_n qui est n^2) $dN = n^2 dn$ donc $dN/dE = n^2 dn/dE = \frac{1}{2} \frac{m^{3/2} e^6}{2^{3/2} h^3 (-E)^{5/2}}$.

@@

B.3 Chapitre 3

Exercice 3.1.2 page 149 on a $\vec{x} = R^{-1}\vec{x}'$ et la valeur de la fonction d'onde n'est pas changée lors de la rotation : $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$, donc :

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R^{-1}\vec{x}') \quad (\text{B.3.1})$$

(situation semblable au cas de la translation, figure (2.1.1)).

On peut obtenir le même résultat avec la notation d'opérateurs : $\psi'(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | R | \psi \rangle = \langle R^+ \vec{x}' | \psi \rangle = \langle R^{-1} \vec{x}' | \psi \rangle = \psi(R^{-1}\vec{x}')$, où on a utilisé le fait que l'opérateur rotation est unitaire.

Exercice 3.3.1 page 169 Électrons bidimensionnels dans un champ magnétique constant, avec un potentiel périodique : le spectre fractal de Hofstadter.²

1. $\vec{B} = \text{rot}(\vec{A}) = (\partial_x A_y - \partial_y A_x) \vec{e}_z = B \vec{e}_z$. Alors

$$\begin{aligned} H(x, p_x, y, p_y) &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(x, y) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\left(p_x + \frac{eB}{2} y \right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2} x \right)^2 \right) + V(x, y) \end{aligned}$$

2. Pour les unités, $[Q] \equiv \frac{[p_x]}{[\sqrt{\hbar e B}]} \equiv \frac{[p_x]}{\sqrt{[p_x] m [p_x] / m}} \equiv 1$ (pensant à $\frac{d\vec{p}}{dt} \equiv e\vec{v} \wedge \vec{B}$) et $[q] \equiv \frac{[p_x]}{[eBX]} \equiv \frac{[p_x]}{([p_x]/m)m} \equiv 1$. Donc $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$ sont sans dimension. A partir de $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ et $[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$, on calcule

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i, \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i \hbar_{eff}$$

et les autres commutateurs sont nuls. On a finalement :

$$2\pi \hbar_{eff} = \frac{\phi_0}{\phi}$$

3. On obtient

$$H(Q, P, q, p) = \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2) + V\left(-X \left(p + \sqrt{\hbar_{eff} P}\right), -X \left(q + \sqrt{\hbar_{eff} Q}\right)\right)$$

2. Ce spectre a été étudié dans *D. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields" Phys.Rev.B 14,2239, (1976)*. Il est (partiellement) observé expérimentalement dans : *Albrecht et al. "Evidence of the Hofstadter Fractal energy spectrum in the Quantized Hall Conductance" Phys.Rev.Lett. 86,147 (2001)*. Chercher "hofstadter butterfly" dans Google.

4. Si $V = 0$, alors $H(Q, P, q, p) = \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2)$ est un oscillateur harmonique. Ses niveaux d'énergie (**niveaux de Landau**) sont donc :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

mais les variables (q, p) n'interviennent pas. Cela montre que chaque niveau est infiniment dégénéré (comme la dimension de l'espace de Hilbert des opérateurs \hat{q}, \hat{p}).

(La suite est facultative)

5. La périodicité est 1 selon q et selon p . Les générateurs des translations sont respectivement $(\hat{p}, -\hat{q})$, et $[\hat{q}, \hat{p}] = i \hbar_{eff}$. Par conséquent

$$\hat{T}_q = \exp(-i\hat{p}/\hbar_{eff}), \quad \hat{T}_p = \exp(i\hat{q}/\hbar_{eff}).$$

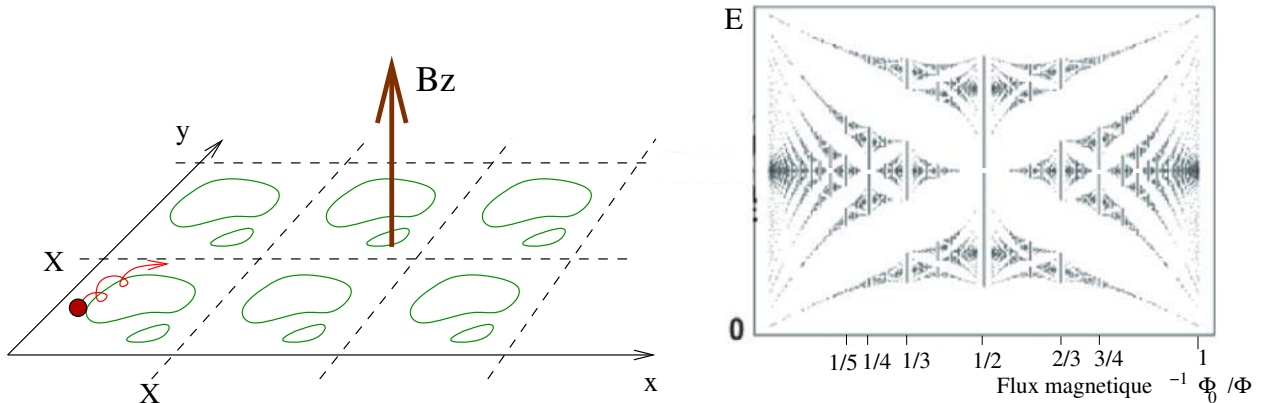
6. La relation de Glauber donne $\hat{T}_q \hat{T}_p = e^{[-i\hat{p}/\hbar_{eff}, i\hat{q}/\hbar_{eff}]} \hat{T}_p \hat{T}_q = e^{\frac{-i2\pi}{2\pi\hbar_{eff}}} \hat{T}_p \hat{T}_q$. Donc $[\hat{T}_q, \hat{T}_p] = 0$ si et seulement si

$$\frac{1}{2\pi\hbar_{eff}} = N \in \mathbb{N} \quad : \text{entier}$$

Cela donne $\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{2\pi\hbar_{eff}} = N$. Autrement dit, il doit y avoir un nombre entier de quanta de flux à travers la surface élémentaire X^2 .

A.N. : $N = \frac{X^2 e B}{h}$, avec $X = 2.10^{-7} m$, $B = 0,21 T.$, $h = 6,6.10^{-34} J.s.$, $e = 1,6.10^{-19} C$, $N = \frac{10^{-14} 41,6.10^{-19} 0,21}{6,6.10^{-34}} \simeq 2$.

7. Avec cette condition, on peut (comme dans la théorie de Bloch), chercher les états stationnaires parmi les vecteurs propres communs de \hat{T}_q et \hat{T}_p qui vérifient, $\hat{T}_q|\psi\rangle = e^{i\theta_1}|\psi\rangle$ et $\hat{T}_p|\psi\rangle = e^{i\theta_2}|\psi\rangle$. Les états stationnaires ainsi trouvés $|\psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$ vont dépendre des paramètres continus (θ_1, θ_2) et d'un indice discret n . Cela donnera un spectre en bandes. Chaque bande est indiquée par n .
8. Avec les notation ci-dessus, appelons $\mathcal{H}(\theta_1, \theta_2)$ l'espace des fonctions de Bloch vérifiant $\hat{T}_q|\psi\rangle = e^{i\theta_1}|\psi\rangle$ et $\hat{T}_p|\psi\rangle = e^{i\theta_2}|\psi\rangle$. Comme $\hat{T}_q|\psi\rangle = e^{i\theta_1}|\psi\rangle$, la fonction d'onde $\psi(q)$, est périodique (à une phase près), de période 1. Par conséquent, sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ est discrète, avec un pas $\Delta p = \hbar_{eff} = \frac{1}{N}$. Or $\hat{T}_p|\psi\rangle = e^{i\theta_2}|\psi\rangle$, ce qui signifie que $\tilde{\psi}(p)$ est elle même périodique, de période 1. Dans l'intervalle $p \in [0, 1[$ il y a $1/\Delta p = N$ composantes, et l'état $|\psi\rangle$ n'a donc que N composantes indépendantes. L'espace des fonctions de Bloch $\mathcal{H}(\theta_1, \theta_2)$ est donc de dimension N . Avec la perturbation V , le premier niveau de Landau perd sa dégénérescence et il apparait donc N bandes de Bloch. (Cela est aussi vrai pour les autres niveaux de Landau).



9. La condition $2\pi\hbar_{eff} = \frac{1}{N}$ est exceptionnelle. Par contre, si $2\pi\hbar_{eff} = \frac{h}{eBX^2} = \frac{\phi_0}{\phi} = \frac{a}{b} \in \mathbb{Q}$, on considère une cellule de base de côtés X et $Y = aX$, donc de surface $XY = aX^2$. Pour cette cellule de base, la constante effective $2\pi\hbar'_{eff} = \frac{2\pi\hbar}{eB(XY)} = \frac{1}{b}$. Donc $(2\pi\hbar'_{eff})^{-1} = b \in \mathbb{N}$ est entier, les résultats précédents s'appliquent et on déduit que le spectre est formé de b **bandes**. Ainsi lorsque ϕ/ϕ_0 varie continuellement, le dénominateur b (et donc le nombre de bandes) varie discontinuellement, ce qui explique l'aspect fractal du spectre obtenu. Voir figure.

B.4 Chapitre 4

Exercice 11 page 188 le résultat (4.5.1) montre que cette relation est vraie pour les trois vecteurs de base e_i de \mathbb{R}^3 , ce qui peut s'écrire $[\hat{S}_{e_i}, \hat{S}_{e_j}] = i\hbar\hat{S}_{e_i \wedge e_j} = i\hbar e_i \wedge e_j \cdot \hat{S}$. Alors $[\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] = \sum_{i,j} [U_i \hat{S}_{e_i}, U_j \hat{S}_{e_j}] = \sum_{i,j} U_i U_j [\hat{S}_{e_i}, \hat{S}_{e_j}] = i\hbar \sum_{i,j} U_i U_j e_i \wedge e_j \cdot \hat{S} = i\hbar (\vec{U} \wedge \vec{V}) \cdot \hat{S}$.

Exercice 4.4.1 page ??

1. Soit un état de spin 1/2 quelconque noté :

$$|\psi\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle$$

avec $a, b \in \mathbb{C}$. Si $b \neq 0$, alors on écrit $|\psi\rangle = b|\varphi\rangle$ avec $|\varphi\rangle = z|+_z\rangle + |-_z\rangle$ et $z = a/b$. De façon très générale, les probabilités associées au résultat d'une mesure sur un état quantique, ne change pas si l'état est multiplié par une constante complexe. Plus précisément, si $|\psi\rangle = b|\varphi\rangle$, et \hat{A} est une observable (opérateur) :

$$\frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|b|^2 \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}{|b|^2 \langle\varphi|\varphi\rangle} = \frac{\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$$

Par conséquent $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ décrivent les mêmes "états physiques"

2. On calcule

$$s_x = \frac{\langle \psi | \widehat{S}_x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{1}{|a|^2 + |b|^2} \frac{\hbar}{2} (\bar{a}, \bar{b}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{2\Re(z)}{1 + |z|^2}$$

de même :

$$s_y = \frac{\langle \psi | \widehat{S}_y | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = -\frac{\hbar}{2} \frac{2\Im(z)}{1 + |z|^2}, \quad s_z = \frac{\langle \psi | \widehat{S}_z | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\hbar}{2} \frac{|z|^2 - 1}{1 + |z|^2}$$

Donc $s^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$. (Ne pas confondre $s^2 = \langle S_x \rangle^2 + \langle S_y \rangle^2 + \langle S_z \rangle^2$ avec $\langle S^2 \rangle = \hbar^2 \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + 1\right)$).

3. En coordonnées sphériques (s, θ, φ) , $s_x = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi$, $s_y = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi$, $s_z = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$, on obtient

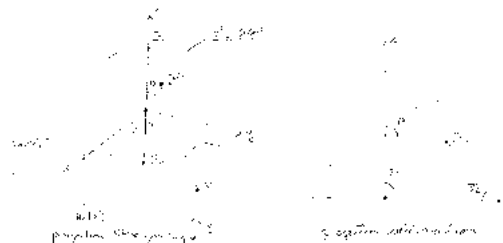
$$z\bar{z} = \frac{1 + 2\frac{s_z}{\hbar}}{1 - 2\frac{s_z}{\hbar}} = \frac{1 + \cos \theta}{1 - \cos \theta} = \cotg^2 \frac{\theta}{2}$$

et

$$z = (1 + |z|^2)^{-1/2} \left(\frac{s_x}{\hbar} - i \frac{s_y}{\hbar} \right) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\cos^2 \frac{\theta}{2}}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^{-1/2} (\cos \varphi - i \sin \varphi) \sin \theta$$

donc $z = \cotg \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}$.

4. D'après les schémas :



Exercice 12 page 189

1. On a vu en cours, que les générateurs $\widehat{S}_x, \widehat{S}_y, \widehat{S}_z$ s'expriment respectivement dans la base o.n. $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$ par les matrices de Pauli $(\frac{\hbar}{2}\sigma_x, \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \frac{\hbar}{2}\sigma_z)$; ce sont des matrices hermitienne 2×2 de trace nulle. Par conséquent, l'opérateur $\widehat{S}_{\vec{U}} = U_x \widehat{S}_x + U_y \widehat{S}_y + U_z \widehat{S}_z = \vec{U} \cdot \vec{\widehat{S}} \in \mathcal{R}$, $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z) \in \mathbb{R}^3$ (générateur des rotations du spin 1/2) s'exprime par la matrice $\frac{\hbar}{2}\sigma_{\vec{U}}$ avec

$$\sigma_{\vec{U}} = U_x \sigma_x + U_y \sigma_y + U_z \sigma_z = \vec{U} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} U_z & U_x - iU_y \\ U_x + iU_y & -U_z \end{pmatrix}$$

2. Soit $M \in SU(2)$. On a (a) : $M^+ = M^{-1}$ et (b) : $\det(M) = 1$. Écrivons $M = \exp(-i\lambda G)$, avec $\lambda \in \mathbb{R}$, et G matrice 2×2 qui est un "générateur" i.e. élément de l'algèbre de Lie $su(2)$. Pour $\lambda \rightarrow 0$, la relation (a) donne $(1 + i\lambda G^+) = (1 + i\lambda G)$, soit $G = G^+$. La relation (b) donne $1 = \det(M) = \exp(-i\lambda \text{Trace}(G))$, donc $\text{Trace}(G) = 0$. (La relation matricielle très générale $\det(M) = \exp(-i\lambda \text{Trace}(G))$, se démontre en écrivant G dans une base propre, où elle est diagonale). Ainsi l'algèbre de Lie $su(2)$ du groupe $SU(2)$ est formé par les matrices hermitienne 2×2 de trace nulle forme. Comme expliqué en (1), G est de la forme $G = \begin{pmatrix} u_z & u_x - iu_y \\ u_x + iu_y & -u_z \end{pmatrix} = \vec{u} \cdot \vec{\sigma}$, et donc les matrices de Pauli forment une base de cette algèbre.
3. Soit $\varphi : \hat{O} \rightarrow M_{\hat{O}}$ l'application qui à un opérateur de \mathcal{H}_{spin} associe la matrice 2×2 , qui est son expression dans la base $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$. On a vu que $\varphi(\hat{S}_{\vec{U}}) = \frac{\hbar}{2}\sigma_{\vec{U}}$ et que $\varphi : \mathcal{R}_{spin} \rightarrow su(2)$ est un isomorphisme d'algèbres de Lie. Pour $\hat{R} \in R_{spin}$, on a $\varphi(\hat{R}) = \varphi\left(\exp\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right)\right) = \exp\left(\varphi\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right)\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\sigma_{\vec{U}}\right)$ qui montre que $\varphi : R_{spin} \rightarrow SU(2)$ est un isomorphisme de groupes.

Exercice 13 page 191 Voir eq(B.4.1). Cette fois ci l'opérateur de rotation agit à la fois sur l'espace ordinaire et sur le spin : $\psi'_{\pm}(\vec{x}') = \langle \vec{x}', \pm | \hat{R} | \psi, \vec{s} \rangle = \langle R^+ \vec{x}', R^+ \pm | \psi, \vec{s} \rangle = \langle R^{-1} \vec{x}', R^{-1} \pm | \psi, \vec{s} \rangle$, c'est à dire :

$$\begin{pmatrix} \psi'_+(\vec{x}') \\ \psi'_-(\vec{x}') \end{pmatrix} = \hat{R}_{spin}^{-1} \begin{pmatrix} \psi_+(R_{espace}^{-1} \vec{x}') \\ \psi_-(R_{espace}^{-1} \vec{x}') \end{pmatrix} \quad (\text{B.4.1})$$

B.5 Chapitre 7

Exercice 6.5.1 Diffusion nucléon-pion page 277. On a vu que $\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1$ qui est la décomposition de Clebsh-Gordan. Si \hat{H} est un opérateur vérifiant $[\hat{H}, \vec{S}] = 0$ (invariance par rotation) alors d'après le **Lemme de Shur**, \hat{H} exprimé dans la décomposition $\mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1$ est de la forme bloc:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \lambda \hat{I} & 0 \\ \underbrace{0}_{\mathcal{D}_0} & \underbrace{\mu \hat{I}}_{\mathcal{D}_1} \end{pmatrix}, \quad \lambda, \mu \in \mathbb{R}$$

Or on a vu que l'opérateur $A \cdot \hat{I} + B \cdot \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = A + \frac{B}{2} \hbar^2 (J(J+1) - \frac{3}{2})$ s'exprime dans cette même décomposition par

$$\begin{pmatrix} E_0 = A - \frac{3}{4} B \hbar^2 & 0 \\ 0 & E_1 = A + \frac{1}{4} B \hbar^2 \end{pmatrix}$$

Il suffit donc de prendre A, B tels que $A - \frac{3}{4} B \hbar^2 = \lambda$ et $\mu = A + \frac{1}{4} B \hbar^2$.

Plus généralement, pour le couplage $\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2} = \bigoplus_{j=|j_2-j_1|}^{j_1+j_2} \mathcal{D}_j$, un opérateur invariant

s'exprime comme $\lambda_j \hat{I}$ sur chaque espace \mathcal{D}_j de la décomposition. Il y a donc $N = j_2 + j_1 - |j_2 - j_1|$ paramètres indépendants λ_j . Comme l'opérateur de Casimir \vec{S}^2 est $\hbar^2 j(j+1) \hat{I}$ sur un espace \mathcal{D}_j (et distingue donc les espaces \mathcal{D}_j) on déduit que un opérateur invariant peut s'exprimer sous la forme $\hat{H} = \mu_0 \hat{I} + \mu_1 \vec{S}^2 + \mu_2 (\vec{S}^2)^2 + \dots + \mu_{N-1} (\vec{S}^2)^{N-1}$. Il est possible de relier les $(\mu_j)_j$ et les $(\lambda_j)_j$. De façon équivalente on pourrait utiliser $(\vec{S}_1, \vec{S}_2)^k$ à la place de $(\vec{S}^2)^k$, les coefficients seraient différents.

Exercice 6.5.2 Diffusion nucléon-pion page 283.

1. On a $\mathcal{H}_{j=1} \otimes \mathcal{H}_{j=1/2} = \mathcal{H}_{j=1/2} \oplus \mathcal{H}_{j=3/2}$, de dimensions $3 \times 2 = 2 + 4 = 6$ (d'après $\dim \mathcal{H}_j = 2j + 1$).
2. On obtient :

$$\begin{aligned} |p\pi^+\rangle &= \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle \\ |p\pi^0\rangle &= \sqrt{2/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{1/3} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \\ |p\pi^-\rangle &= \sqrt{1/3} \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{2/3} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^+\rangle &= \sqrt{1/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{2/3} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^0\rangle &= \sqrt{2/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{1/3} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^-\rangle &= \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

3. Dans un espace de représentation irréductible, \hat{U} doit agir comme l'identité à une constante complexe près (Lemme de Shur). Donc dans la décomposition $\mathcal{H}_{j=1/2} \oplus \mathcal{H}_{j=3/2}$:

$$\hat{U} \equiv_{\mathcal{H}_{3/2} \oplus \mathcal{H}_{1/2}} \begin{pmatrix} A_{3/2} \hat{I}_4 & 0 \\ 0 & A_{1/2} \hat{I}_2 \end{pmatrix}$$

avec $A_{3/2}, A_{1/2} \in \mathbb{C}$.

4. On obtient :

$$\begin{aligned} \sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) &= \left| \langle p, \pi^+ | \hat{U} | p, \pi^+ \rangle \right|^2 = |A_{3/2}|^2 \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) &= \left| \langle n, \pi^0 | \hat{U} | p, \pi^- \rangle \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2}}{3} A_{3/2} - \frac{\sqrt{2}}{3} A_{1/2} \right|^2 \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) &= \left| \langle p, \pi^- | \hat{U} | p, \pi^- \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{3} A_{3/2} + \frac{2}{3} A_{1/2} \right|^2 \end{aligned}$$

- (a) si $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$, alors $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) = |A_{3/2}|^2$, $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq \frac{2}{9} |A_{3/2}|^2$,
 $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq \frac{1}{9} |A_{3/2}|^2$.
- (b) si $|A_{3/2}| \ll |A_{1/2}|$, alors $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) \simeq 0$, $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq \frac{2}{9} |A_{1/2}|^2$, $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq \frac{4}{9} |A_{1/2}|^2$.
- (c) si $A_{3/2} = A_{1/2}$, alors $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) = |A_{3/2}|^2$, $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq 0$, $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq |A_{3/2}|^2$.

5. L'expérience donne :

$$\frac{\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+)}{\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0)} = 4.33 \simeq 4.5$$

$$\frac{\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+)}{\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-)} = 8.47 \simeq 9$$

On est donc proche de la situation $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$.

6. Durée de vie $\tau \simeq \frac{\hbar}{\Delta E} = 6.510^{-24} \text{s}$. L'espace de degré interne d'isospin de cette particule Δ est $\mathcal{H}_{j=3/2}$, de dimension $2j + 1 = 4$. D'après l'écriture $|j = 3/2, m = 3/2\rangle = |p^+, \pi^+\rangle$, etc... on déduit que $|\Delta^{++}\rangle = |j = 3/2; m = 3/2\rangle$, $|\Delta^+\rangle = |j = 3/2; m = 1/2\rangle$, $|\Delta^0\rangle = |j = 3/2; m = -1/2\rangle$, $|\Delta^-\rangle = |j = 3/2; m = -3/2\rangle$.

Index

- adjoint**, 28
- algèbre de l'oscillateur Harmonique, 127
- algèbre de Lie complexifiée, 103
- algèbre de Lie d'opérateurs, 103
- algèbre de Lie de l'oscillateur Harmonique, 102
- algèbre de Weyl-Heisenberg, 124
- analyse micro locale, 76
- analyse semi classique, 76
- approximation harmonique, 99
- approximation linéaire, 99
- autoadjoint**, 29

- base d'énergie, 63
- base de Fourier, 43, 52
- base de position, 50, 63
- base orthonormée, 41
- Bohr-Sommerfeld, 138
- boost, 94
- bra, 74
- bra**, 25

- capacité calorifique des matériaux, 110
- catastrophe infra-rouge, 117
- catastrophe ultraviolette, 117
- cellule de Planck, 130
- changement de Jauge, 153
- changement de référentiel Galiléen, 94
- choix d'une Jauge, 162
- Chromo-dynamique, 166
- Classique, 10
- collapse, 340
- collapse de la fonction d'onde, 80, 84
- commutateur, 70
- condition de Laue, 302
- connexion sur un fibré vectoriel, 157

- constante de Planck, 72
- corps noir, 133
- corrélées, 148
- courbure de la connexion, 161

- degré de liberté spatial, 146
- degrés de liberté, 112
- densité d'état, 56
- densité de niveaux, 132
- densité de probabilité, 61, 63, 84
- diffusion isotrope, 305
- diffusion s, 305
- dimension finie, 41
- dimension infinie, 41
- dispersion**, 31
- distribution de Bargmann, 141
- distribution de Dirac, 50, 74
- distribution de Husimi, 141
- domaine de définition d'opérateur**, 27
- double fentes de Young, 58
- double puits de potentiel, 38
- dualité onde-corpuscule, 79
- dé-corrélés, 149
- décomposition de Cartan, 104
- dégénérescence, 47
- dégénérée, 55
- dérivée covariante, 153, 158
- détecteur, 83

- E.D.P., 75
- Effet Aharonov-Bohm, 155
- effet photo-électrique, 115
- ensemble statistique d'états, 341
- entropie de Shannon, 349
- entropie statistique, 132
- environnement, 57

- espace bosonique, 223
- espace de Hilbert, 74
- espace de Hilbert**, 24
- espace des phases, 13
- espace des phases**, 31
- espace dual, 25
- espace fermionique, 223
- espace produit tensoriel, 146, 148
- espace propre, 47, 81
- espace quantique du spin, 175
- espace somme directe, 148
- espace vectoriel, 72
- espace vectoriel**, 20
- espace vectoriel complexe, 20
- espace vectoriel réel, 20
- espaces de Sobolev**, 25
- Everett, 66

- facteur gyromagnétique de l'électron, 117
- fentes de Young, 155
- fibré vectoriel, 157
- fil quantique, 25, 42
- fonction d'onde, 72
- fonction d'onde**, 19
- fonction de Dirac, 49
- fonction de Hermite, 105
- fonction de partition, 352
- fonctions d'Hermite, 105
- force, 12
- force de Casimir, 118
- force de Lorentz, 151
- force nucléaire faible, 166
- force nucléaire forte, 166
- force potentielle, 12
- forme linéaire**, 25
- formule de Gutzwiller, 139
- formule de transport, 298
- formule des traces semi-classique, 139
- fréquence de Bohr**, 321

- gaz de photons, 133
- gluons, 166
- gravitation, 168

- group, 90
- groupe**, 20
- groupe commutatif**, 20
- groupe de l'oscillateur Harmonique, 127
- groupe de Lie de dimension 1, 90
- groupe de Weyl-Heisenberg, 125
- Groupes de Lie, 90
- générateur, 88, 90
- géométrie différentielle, 156

- Hamilton**, 10
- Hamiltonien, 13, 26
- harmonique, 99
- hasard quantique, 84
- hermitique**, 29
- holonomie, 161

- impulsion, 13, 72
- incertitude, 67
- intégration par partie, 29
- Invariance de Jauge classique, 153
- Invariance de Jauge quantique, 154
- inégalité de Cauchy-Schwartz, 74
- inégalité de Heisenberg, 71
- inégalité de Schwartz, 71
- isolé, 57
- isolée, 19
- isomorphisme de Riesz**, 25

- ket, 72
- ket**, 20

- l'écart type, 67
- Laser, 115
- Le problème à deux corps, 14
- lemme de Poincaré, 156
- Limite classique-quantique, 64
- localisation forte de Anderson, 56
- loi (faible) des grands nombre, 350
- loi de Boltzmann, 110
- Loi de Newton, 12
- loi de Planck, 133
- loi de probabilité, 346
- Loi de Thomas Fermi, 130

- Loi de Weyl, 130
 Lorentzienne, 50
- Many world interpretation, 66
 matrice densité, 341
 matrices de Pauli, 179
 Modèle d'Einstein, 110
 modèle de Debye, 112
 modèle standard de la physique des particules, 101
 moment d'ordre n , 69
 moyenne expérimentale, 84
 moyenne statistique, 84
 multiplicité, 47, 55
 mécanique classique, 12
 mécanique quantique, 72
- nabla, 146
 niveaux d'énergie, 77
 normalisation, 46
normalisé, 24
 normalisée, 74
 norme, 23, 73
 Notation de Dirac, 28
notation de Dirac, 20
 noyau de Schwartz, 51
- observable, 59, 83, 90
 observables, 81
 onde plane, 51, 72
onde plane, 21
 onde stationnaire, 54, 76
 ondes sismiques, 135
opérateur, 26
opérateur adjoint, 28
 opérateur autoadjoint, 46
 Opérateur d'impulsion, 26
 opérateur d'évolution, 88
 Opérateur de position, 26
 opérateur de spin, 178
 opérateur de translation, 92
 opérateur densité, 341
 opérateur densité partiel, 356
 opérateur identité, 27
 opérateur impulsion, 93
opérateur linéaire, 27
 opérateur partiel, 355
 opérateur positif, 343
 opérateur rotation, 149
 opérateurs d'échelle, 106
 Opérateurs de création et d'annihilation, 103
 opérateurs de création et d'annihilation, 106
opérateurs différentiels, 27
 opérateurs vectoriels, 145
orthogonales, 23
 oscillateur harmonique, 15, 32, 98
- paquet d'onde Gaussien, 73
paquet d'onde Gaussien, 21
 particule, 19, 72
 particule libre, 54
 phonons, 101
 photon, 101
 photons, 115
 polarisation, 345
 polynôme d'Hermite, 105
 position d'une particule, 12
 postulat de la mesure, 58
postulat de la mesure, 80
 potentiel Harmonique, 98
 potentiel quadratique, 54
 potentiel scalaire, 150
 potentiel vecteur, 150
 principe d'équivalence, 14
 principe de correspondance, 76, 150
 principe de superposition, 76
principe de superposition, 30
 probabilité, 84
 problème inverse, 302
 produit scalaire, 73
produit scalaire, 23
produit scalaire de Hilbert-Schmidt, 27
 produit tensoriel, 146
 projecteur orthogonal, 44
 projecteur spectral, 59
 propagateur, 88

- Quantification du champ électromagnétique, 114
- quantification géométrique, 139
- Quantique, 10
- quarks, 166
- rang de Schmidt, 358
- rayonnement du corps noir, 115
- relation d'incertitude, 71
- Relation d'incertitude temps-énergie, 91
- relation de fermeture, 82
- relation de Parseval, 53
- relation de polarisation, 89
- relativiste, 10
- relativité générale, 12
- relativité restreinte, 12
- renormalisation, 117
- représentation dans l'espace de phase, 139
- représentation de Heisenberg, 96
- représentation de Husimi, 32, 139
- représentation de Schrödinger, 96
- représentation en impulsion, 52
- représentation en position, 50
- règle de Leibnitz, 163
- règle de quantification, 138
- réduction de l'état quantique, 340
- réduction du paquet d'onde, 63, 80, 84
- réduction symplectique, 238
- section de l'espace fibré, 159
- simplement connexe, 156
- spectre, 45
- spectre continu, 49
- spectre du corps noir, 133
- spectre ponctuel, 56
- sphère d'Ewald, 302
- symbole de l'opérateur, 97
- systèmes intégrables, 13
- temps de décohérence, 63
- température d'Einstein, 110
- théorie de Jauge, 156, 157
- théorie de Jauge électro-faible, 157
- théorie des connections sur fibrés vectoriels, 156
- théorie des distributions, 50
- théorie du champ moyen, 333
- théorème d'Erhenfest, 70
- Théorème de Wigner-Eckardt, 286
- trace partielle, 355
- trajectoire de la particule, 12
- transformation active, 149
- transformation infinitésimale, 91
- transformation passive, 149
- transformée de Fourier, 52, 79
- trivialisation du fibré, 162
- unitaire, 89
- valeur moyenne, 67, 81
- valeur propre, 45
- valeur propre simple, 47
- variance, 67
- vecteur colonne, 42
- vecteur dual**, 25
- vecteur dual métrique, 74
- vecteur propre, 45
- xcas, 105
- Équations de Hamilton, 13
- élément du groupe, 90
- éléments de matrice, 44
- énergie cinétique, 13
- énergie noire, 117
- énergie potentielle, 13
- équation de Liouville quantique, 345
- équation de Schrödinger, 72, 75
- équation de Schrödinger**, 10, 30
- équation de Schrödinger stationnaire, 53, 76
- équation linéaire aux dérivées partielles, 75
- équations de Maxwell, 112
- état cohérent, 123
- état cohérent du champ, 115
- état de position, 74
- état fondamental, 77

état non polarisé, 345
état physique, 62
état pur, 341
état quantique, 341
état quasi-classique, 73
état stationnaire, 54
états physiques, 74
évolution temporelle, 30

Bibliographie

- [ADR82] A. Aspect, Dalibard J., and Roger G. Experimental tests of Bell's inequalities using time-varying analysers. *Physical Review Letters*, 49 :1804–1807, 1982.
- [AM76] Neil W. Ashcroft and D. N. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks Cole, January 1976.
- [Arn76] V.I. Arnold. *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique*. Ed. Mir. Moscou, 1976.
- [Asp76] A Aspect. Proposed experiment to test the non-separability of quantum mechanics. *Physical review D*, 14 :1944–1951, 1976.
- [B.] Parisse B. *Logiciel libre de calcul formel*. Taper xcas dans google.
- [Bac] H. Bacry. *Lessons on group theory*.
- [Bas86] J.L. Basvedant. *Mécanique quantique*. Ellipses, 1986.
- [BC89] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Introduction to quantum mechanics*. Longman, 1989.
- [Bel64] Bell J. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. *Physics*, 1 :195–200, 1964.
- [BPLB13] R. Bach, D. Pope, SH. Liou, and H. Batelaan. Controlled double-slit electron diffraction. *New Journal of Physics*, 15(3) :033018, 2013.
- [CB73] Y. Choquet-Bruhat. *Distributions : theorie et problemes*. 1973.
- [CBF] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Mécanique quantique*.
- [Cla88] Claude Cohen-Tannoudji. *Cours 1988-89-90 : Cohérences quantiques et dissipation*. Cours de Claude Cohen-Tannoudji au Collège de France. http://www.lkb.ens.fr/users/laloe/public_html/PHYS/cours/college-de-france/, 1988.
- [CTDRG87] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Photons et atomes*. 1987.
- [CTDRG88] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Processus d'interaction entre photons et atomes*. ..., 1988.
- [DEC+96] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.O. Stamatescu, and H.D. Zeh. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer-Verlag, 1996.

- [DGLR89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Physique statistique*. 1989.
- [DM02] Dietrich Dehlinger and M. W. Mitchell. Entangled photon apparatus for the undergraduate laboratory. *American Journal of Physics*, 70 :898–902, 2002.
- [EN99] K.J. Engel and R. Nagel. *One-parameter semigroups for linear evolution equations*, volume 194. Springer, 1999.
- [EN06] K.J. Engel and R. Nagel. *A short course on operator semigroups*. Springer, 2006.
- [F. 00] F. Faure. Exposés sur la quantification géométrique. <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure>, pages 1–12, 2000.
- [Faua] F. Faure. *Cours de Mécanique quantique pour Master M1 de physique*. <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement>.
- [Faub] F. Faure. Films d’animations d’ondes quantiques. http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement/meca_q/animations.
- [Fau10a] F. Faure. *Cours de géométrie et topologie pour la physique pour Master M2 de physique*. <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement>, 2010.
- [Fau10b] F. Faure. *Cours de Mathématiques pour la physique. Niveau Master 1*. <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement>, 2010.
- [Fau10c] F. Faure. *Cours de Mécanique Analytique pour Licence L3 de physique*. <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement>, 2010.
- [Fey63] R. Feynman. *Le cours de physique de Feynman, Mécanique quantique*. 1963.
- [GS90] V. Guillemin and S. Sternberg. *Geometric asymptotics*. Amer Mathematical Society, 1990.
- [Gut91] M. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*. Springer-Verlag, 1991.
- [Har02] S. Haroche. *Cours de mécanique quantique*. <http://...>, 2002.
- [HB] Michel Hulin and Odile Betbeder. *Théorie des groupes appliquée à la physique*.
- [HTS⁺01] R. Hennino, N. Tregoures, M Shapiro, L. Margerin, M Campillo, B. van Tiggelen, and R. Weaver. Observation of equipartition of seismic waves. *Phys. Rev. Letters*, 86 :3447–3450, 2001.
- [Jac75] J.D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, 1975.
- [J.J85] J.J. Sakurai. *Modern Quantum mechanics*. Benjamin Cummings Publishing Company, 1985.
- [L.E90] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics*. 1990.
- [LGA] J. Leys, E. Ghys, and A. Alvarez. *Dimension. Videos*. <http://www.dimensions-math.org>.
- [IS02] Dossier Pour la Science. *L’art du Secret. La cryptographie*. Dossier hors Série, juillet/oct 2002.

- [Mar02] A. Martinez. *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*. Universitext. New York, NY : Springer, 2002.
- [Mel95] Richard B. Melrose. *Geometric scattering theory*. Stanford Lectures. <http://www-math.mit.edu/~rbm/book.html>, 1995.
- [Mes64] A. Messiah. *mécanique quantique*. 1964.
- [Mil94] P. Milonni. *The Quantum Vacuum, an introduction to quantum electrodynamics*. Academic Press, 1994.
- [MR90] Philippe Martin and Francis Rothen. *Problèmes \tilde{A} N -corps et champs quantiques*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (PPUR), 1990.
- [Nak03] M. Nakahara. *Geometry, topology and physics*. Institute of Physics Publishing, 2003.
- [NGWH01] Nicolas Gisin, Grégoire Ribordy, Wolfgang Tittel, and Hugo Zbinden. Quantum Cryptography. *to appear in Reviews of Modern Physics, e-print : quant-ph/0101098*, 2001.
- [Omn00] R. Omnes. *Comprendre la mécanique quantique*. EDP Sciences, 2000.
- [Paz83] A. Pazy. *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, volume 198. Springer New York, 1983.
- [Per86] A. Perelomov. *Generalized coherent states and their applications*. Springer-Verlag., 1986.
- [PRK95] G. Papanicolaou, L. Ryzhik, and J. Keller. Stability of the p to s energy ratio in the diffusive regime. 1995.
- [Roo06] Borwein Choi Rooney. *The Riemann hypothesis*. Springer, 2006.
- [RS72] M. Reed and B. Simon. *Mathematical methods in physics, vol I : Functional Analysis*. Academic press, New York, 1972.
- [Sak67] J.J. Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. 1967.
- [Sch66] L. Schwartz. *Theorie des distributions*. 1966.
- [Seg95] C. Segal. *Lectures on Lie groups and Lie Algebras*. 1995.
- [SI00] Gustafson S. and Sigal I. *Mathematical concepts of quantum mechanics*. Springer, 2000.
- [Ste94] S. Sternberg. *Group theory and physics*. Cambridge University Press, 1994.
- [Tay96a] M. Taylor. *Partial differential equations, Vol I*. Springer, 1996.
- [Tay96b] M. Taylor. *Partial differential equations, Vol II*. Springer, 1996.
- [WDG90] W. M. Zhang, D. H. Feng, and R. Gilmore. Coherent states : theory and some applications. *Rev. Mod. Phys.*, 62 :867, 1990.
- [Woo92] N.M.J. Woodhouse. *Geometric quantization*. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [YCB82] M. Dillard-Bleick Y. Choquet-Bruhat, C. Dewitt-Morette. *Analysis, manifolds and physics*. North-Holland, 1982.

- [Zur91] W.H. Zureck. *Phys. Today*, 44 :36, 1991.
- [Zwo12] M. Zworski. *Semiclassical Analysis*. Graduate Studies in Mathematics Series. Amer Mathematical Society, 2012.

#script qui selectionne les chapitres pour faire des fichiers pdf individuels.

```
pdftk cours.pdf cat 1-15 387-end output cours_intro.pdf
pdftk cours.pdf cat 19-85 output cours_chap1.pdf
pdftk cours.pdf cat 87-144 output cours_chap2.pdf
pdftk cours.pdf cat 145-171 output cours_chap3.pdf
pdftk cours.pdf cat 173-202 output cours_chap4.pdf
pdftk cours.pdf cat 203-227 output cours_chap5.pdf
pdftk cours.pdf cat 231-287 output cours_chap6.pdf
pdftk cours.pdf cat 289-307 output cours_chap7.pdf
pdftk cours.pdf cat 309-335 output cours_chap8.pdf
pdftk cours.pdf cat 339-359 output cours_chap9.pdf
pdftk cours.pdf cat 361-367 output cours_annexe.pdf
pdftk cours.pdf cat 369-386 output cours_solutions.pdf
pdftk cours.pdf cat 1-367 387-end output cours_complet_sans_solutions.pdf
```