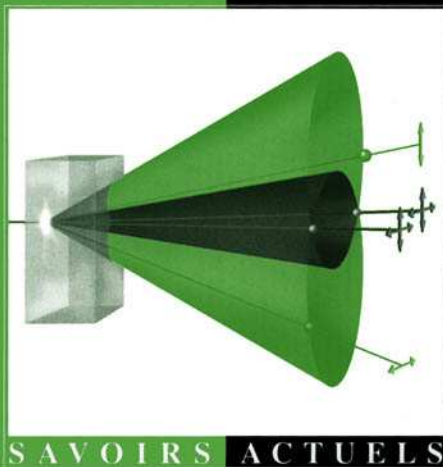


PHYSIQUE

Michel LE BELLAC

• Physique quantique •



SAVOIRS ACTUELS



CNRS EDITIONS

EDP
SCIENCES

Physique quantique

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Michel Le Bellac

Physique Quantique

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

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Illustration de couverture :

Paire de photons intriqués produits par conversion paramétrique dans un cristal non linéaire © Laurie Grace.

© **2003, EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A

et

CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

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

ISBN EDP Sciences 2-86883-655-0

ISBN CNRS ÉDITIONS 2-271-06147-4

Table des matières

Préface	xv
Avant-propos	xvii
1 Introduction	1
1.1 Structure de la matière	1
1.1.1 Échelles de longueur : de la cosmologie aux particules élémentaires	1
1.1.2 États de la matière	3
1.1.3 Constituants élémentaires	6
1.1.4 Interactions (ou forces) fondamentales	8
1.2 Physique classique et physique quantique	10
1.3 Un peu d'histoire	14
1.3.1 Le rayonnement du corps noir	14
1.3.2 L'effet photoélectrique	17
1.4 Ondes et particules : interférences	19
1.4.1 Hypothèse de de Broglie	19
1.4.2 Diffraction et interférences avec des neutrons froids . . .	20
1.4.3 Interprétation des expériences	23
1.4.4 Inégalités de Heisenberg I	27
1.5 Niveaux d'énergie	30
1.5.1 Niveaux d'énergie en mécanique classique et modèles classiques de l'atome	30
1.5.2 L'atome de Bohr	33
1.5.3 Ordres de grandeur en physique atomique	34
1.6 Exercices	37
1.6.1 Ordres de grandeur	37
1.6.2 Le corps noir	38
1.6.3 Inégalités de Heisenberg	39
1.6.4 Diffraction de neutrons par un cristal	39
1.6.5 Atomes hydrogénoïdes	42
1.6.6 Interféromètre de Mach-Zehnder	42
1.6.7 Interféromètre à neutrons et gravité	43

1.6.8	Diffusion cohérente et diffusion incohérente de neutrons par un cristal	44
1.7	Bibliographie	45
2	Mathématiques de la mécanique quantique I : dimension finie	47
2.1	Espaces de Hilbert de dimension finie	48
2.2	Opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$	49
2.2.1	Opérateurs linéaires, hermitiques, unitaires	49
2.2.2	Projecteurs et notation de Dirac	51
2.3	Décomposition spectrale des opérateurs hermitique	53
2.3.1	Diagonalisation d'un opérateur hermitique	53
2.3.2	Diagonalisation d'une matrice 2×2 hermitique	55
2.3.3	Ensemble complet d'opérateurs compatibles	57
2.3.4	Opérateurs unitaires et opérateurs hermitiques	58
2.3.5	Fonctions d'un opérateur	59
2.4	Exercices	60
2.4.1	Produit scalaire et norme	60
2.4.2	Commutateurs et traces	61
2.4.3	Déterminant et trace	61
2.4.4	Projecteur dans $\mathbb{R}^3$	62
2.4.5	Théorème de la projection	62
2.4.6	Propriétés des projecteurs	62
2.4.7	Intégrale gaussienne	62
2.4.8	Commutateurs et valeur propre dégénérée.	63
2.4.9	Matrices normales	63
2.4.10	Matrices positives	63
2.4.11	Identités opératorielles	64
2.4.12	Diviseur de faisceau	64
2.5	Bibliographie	66
3	Polarisation : photon et spin 1/2	67
3.1	Polarisation de la lumière et polarisation d'un photon	68
3.1.1	Polarisation d'une onde électromagnétique	68
3.1.2	Polarisation d'un photon	74
3.1.3	Cryptographie quantique	80
3.2	Spin 1/2	83
3.2.1	Moment angulaire et moment magnétique en physique classique	83
3.2.2	Expérience de Stern-Gerlach et filtres de Stern-Gerlach	85
3.2.3	États de spin d'orientation arbitraire	88
3.2.4	Rotation d'un spin 1/2	90
3.2.5	Dynamique et évolution temporelle	95
3.3	Exercices	97
3.3.1	Décomposition et recombinaison de polarisations	97
3.3.2	Polarisation elliptique	99

3.3.3	Opérateur de rotation pour le spin du photon	100
3.3.4	Autres solutions de (3.45)	100
3.3.5	Décomposition d'une matrice 2×2	100
3.3.6	Exponentielles de matrices de Pauli	101
3.3.7	Tenseur ε_{ijk}	101
3.3.8	Rotation de 2π d'un spin $1/2$	102
3.3.9	Diffusion de neutrons par un cristal : noyaux de spin $1/2$	103
3.4	Bibliographie	104
4	Postulats de la physique quantique	105
4.1	Vecteurs d'état et grandeurs physiques	106
4.1.1	Principe de superposition	106
4.1.2	Grandeurs physiques et mesure	108
4.1.3	Inégalités de Heisenberg II	114
4.2	Évolution temporelle	115
4.2.1	Équation d'évolution	115
4.2.2	Opérateur d'évolution	117
4.2.3	États stationnaires	119
4.2.4	Inégalité de Heisenberg temporelle	121
4.2.5	Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg	124
4.3	Approximations et modélisation	125
4.4	Exercices	127
4.4.1	Dispersion et vecteurs propres	127
4.4.2	Méthode variationnelle	127
4.4.3	Théorème de Feynman-Hellmann	128
4.4.4	Évolution temporelle d'un système à deux niveaux	128
4.4.5	Résonance magnétique nucléaire	129
4.4.6	L'énigme des neutrinos solaires	131
4.4.7	Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg	133
4.4.8	Le système des mésons K neutres	133
4.5	Bibliographie	136
5	Systèmes à nombre de niveaux fini	137
5.1	Chimie quantique élémentaire	137
5.1.1	Molécule d'éthylène	137
5.1.2	Molécule de benzène	140
5.2	Système à deux niveaux dans un champ extérieur	145
5.2.1	La molécule d'ammoniac comme système à deux niveaux	145
5.2.2	La molécule dans un champ électrique	147
5.2.3	Transitions à la résonance et maser	151
5.2.4	Transitions hors résonance	153
5.2.5	Atome à deux niveaux	155

5.3	Exercices	158
5.3.1	Base orthonormée de vecteurs propres	158
5.3.2	Moment dipolaire électrique du formaldéhyde	159
5.3.3	Le butadiène	159
5.3.4	Vecteurs propres du hamiltonien (5.22)	161
5.3.5	L'ion moléculaire H_2^+	161
5.4	Bibliographie	163
6	États intriqués	165
6.1	Produit tensoriel de deux espaces vectoriels	165
6.1.1	Définition et propriétés du produit tensoriel	165
6.1.2	Système de deux spins $1/2$	168
6.1.3	Opérateur densité	169
6.2	Exemples	175
6.2.1	Inégalités de Bell	175
6.2.2	Interférences et états intriqués	183
6.2.3	États intriqués à trois particules : états GHZ	186
6.3	Applications	190
6.3.1	Mesure et décohérence	190
6.3.2	Information quantique	195
6.4	Exercices	201
6.4.1	Indépendance du produit tensoriel par rapport au choix de la base	201
6.4.2	Produit tensoriel de deux matrices 2×2	201
6.4.3	Propriétés des opérateurs densité	201
6.4.4	Opérateur densité pour le spin $1/2$	202
6.4.5	Structure fine et effet Zeeman du positronium	203
6.4.6	Ondes de spin et magnons	205
6.4.7	Calcul de $E(\hat{a}, \hat{b})$	206
6.4.8	Inégalités de Bell avec des photons	206
6.4.9	Interférences avec deux photons	208
6.4.10	Interférences des temps d'émission	210
6.5	Bibliographie	211
7	Mathématiques de la dimension infinie	213
7.1	Espaces de Hilbert	213
7.1.1	Définitions	213
7.1.2	Réalisations d'espaces séparables et de dimension infinie	216
7.2	Opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$	218
7.2.1	Domaine et norme d'un opérateur	218
7.2.2	Conjugaison hermitique	220
7.3	Décomposition spectrale	221
7.3.1	Opérateurs hermitiques	221
7.3.2	Opérateurs unitaires	224

7.4	Exercices	225
7.4.1	Espaces de dimension infinie	225
7.4.2	Spectre d'un opérateur hermitique	225
7.4.3	Relations de commutation canoniques	225
7.4.4	Opérateurs de dilatation et de tranformation conforme	226
7.5	Bibliographie	227
8	Symétries en physique quantique	229
8.1	Transformation d'un état dans une opération de symétrie	230
8.1.1	Invariance des probabilités dans une opération de symétrie	230
8.1.2	Théorème de Wigner	233
8.2	Générateurs infinitésimaux	235
8.2.1	Définitions	235
8.2.2	Lois de conservation	237
8.2.3	Relations de commutation des générateurs infinitésimaux	238
8.3	Relations de commutation canoniques	243
8.3.1	Cas de la dimension $d = 1$	243
8.3.2	Réalisation explicite et commentaires	245
8.3.3	L'opération parité	246
8.4	Invariance galiléenne	249
8.4.1	Hamiltonien en dimension $d = 1$	249
8.4.2	Hamiltonien en dimension $d = 3$	252
8.5	Exercices	254
8.5.1	Rotations	254
8.5.2	Rotations et $SU(2)$	254
8.5.3	Relations de commutation entre l'impulsion et le moment angulaire	255
8.5.4	Algèbre de Lie d'un groupe continu	256
8.5.5	Règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn	257
8.5.6	Centre de masse et masse réduite	257
8.5.7	Transformation de Galilée	258
8.6	Bibliographie	258
9	Mécanique ondulatoire	259
9.1	Diagonalisation de X et de P ; fonctions d'onde	260
9.1.1	Diagonalisation de X	260
9.1.2	Réalisation dans $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$	262
9.1.3	Réalisation dans $L_p^{(2)}(\mathbb{R})$	264
9.1.4	Évolution du paquet d'ondes libre	265
9.2	Équation de Schrödinger	270
9.2.1	Hamiltonien de l'équation de Schrödinger	270
9.2.2	Probabilité de présence et vecteur courant	271

9.3	Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps	274
9.3.1	Généralités	274
9.3.2	Réflexion et transmission par une marche de potentiel	276
9.3.3	États liés du puits carré	281
9.4	Diffusion par un potentiel	284
9.4.1	Matrice de passage	284
9.4.2	Effet tunnel	288
9.4.3	Matrice S	293
9.5	Potentiel périodique	295
9.5.1	Théorème de Bloch	295
9.5.2	Bandes d'énergie	296
9.6	Mécanique ondulatoire en dimension $d = 3$	301
9.6.1	Généralités	301
9.6.2	Espace de phase et densité de niveaux	303
9.6.3	Règle d'or de Fermi	306
9.7	Exercices	311
9.7.1	Inégalités de Heisenberg	311
9.7.2	Étalement du paquet d'ondes	311
9.7.3	Paquet d'ondes gaussien	312
9.7.4	Heuristique de l'inégalité de Heisenberg	313
9.7.5	Potentiel de Lennard-Jones pour l'hélium	313
9.7.6	Retard à la réflexion	314
9.7.7	Potentiel en fonction δ	314
9.7.8	Transmission par un puits	316
9.7.9	Niveaux d'énergie du puits cubique infini en dimension $d = 3$	316
9.7.10	Courant de probabilité à trois dimensions	316
9.7.11	Densité de niveaux	316
9.7.12	Règle d'or de Fermi	317
9.7.13	Étude de l'expérience de Stern-Gerlach	317
9.7.14	Modèle de mesure de von Neumann	318
9.7.15	Transformation de Galilée	320
9.8	Bibliographie	320
10	Moment angulaire	323
10.1	Diagonalisation de $\vec{J}^2$ et de J_z	323
10.2	Matrices de rotation	327
10.3	Moment angulaire orbital	332
10.3.1	Opérateur moment angulaire orbital	332
10.3.2	Propriétés des harmoniques sphériques	336
10.4	Particule dans un potentiel central	339
10.4.1	Équation d'onde radiale	339
10.4.2	Atome d'hydrogène	344

10.5	Distributions angulaires des désintégrations	348
10.5.1	Rotations de π , parité, réflexion par rapport à un plan	348
10.5.2	Transitions dipolaires	350
10.5.3	Désintégrations : cas général	355
10.6	Composition de deux moments angulaires	357
10.6.1	Composition de deux spins $1/2$	357
10.6.2	Cas général : composition de deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$	359
10.6.3	Composition des matrices de rotation	362
10.6.4	Théorème de Wigner-Eckart (opérateurs scalaires et vectoriels)	363
10.7	Exercices	366
10.7.1	Propriétés de $\vec{J}$	366
10.7.2	Rotation d'un moment angulaire	366
10.7.3	Rotations (θ, ϕ)	366
10.7.4	Moments angulaires $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$	366
10.7.5	Moment angulaire orbital	367
10.7.6	Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques	367
10.7.7	Indépendance de l'énergie par rapport à m	368
10.7.8	Puits sphérique	368
10.7.9	Atome d'hydrogène pour $l \neq 0$	369
10.7.10	Éléments de matrice d'un potentiel	369
10.7.11	Équation radiale en dimension $d = 2$	370
10.7.12	Propriété de symétrie des matrices $d^{(j)}$	370
10.7.13	Diffusion de la lumière	371
10.7.14	Mesure du moment magnétique du Λ^0	371
10.7.15	Production et désintégration du méson ρ^+	373
10.7.16	Interaction de deux dipôles	375
10.7.17	Désintégration du Σ^0	375
10.7.18	Opérateurs tensoriels irréductibles	376
10.8	Bibliographie	377
11	Oscillateur harmonique	379
11.1	L'oscillateur harmonique simple	380
11.1.1	Opérateurs de création et d'annihilation	380
11.1.2	Diagonalisation du hamiltonien	381
11.1.3	Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique	384
11.2	États cohérents	386
11.2.1	Définition et propriétés des états cohérents	386
11.3	Introduction aux champs quantifiés	389
11.3.1	Ondes sonores et phonons	389
11.3.2	Quantification du champ scalaire à une dimension	394

11.3.3	Quantification du champ électromagnétique	398
11.3.4	Fluctuations quantiques du champ électromagnétique	403
11.4	Mouvement dans un champ magnétique	407
11.4.1	Invariance de jauge locale	407
11.4.2	Champ magnétique uniforme : niveaux de Landau	411
11.5	Exercices	414
11.5.1	Éléments de matrice de Q et de P	414
11.5.2	Propriétés mathématiques	414
11.5.3	États cohérents	414
11.5.4	Couplage à une force classique	416
11.5.5	États comprimés	419
11.5.6	Énergie de point zéro du modèle de Debye	420
11.5.7	Potentiels scalaire et vecteur en jauge de Coulomb	420
11.5.8	Relations de commutation et hamiltonien du champ électromagnétique	420
11.5.9	Quantification dans une cavité	421
11.5.10	Conservation du courant en présence d'un champ magnétique	422
11.5.11	Transformations de jauge non abéliennes	422
11.5.12	Effet Casimir	424
11.6	Bibliographie	426
12	Théorie élémentaire de la diffusion	429
12.1	Section efficace et amplitude de diffusion	430
12.1.1	Sections efficaces différentielle et totale	430
12.1.2	Amplitude de diffusion	432
12.2	Ondes partielles et déphasages	435
12.2.1	Développement en ondes partielles	435
12.2.2	Diffusion à basse énergie	439
12.2.3	Potentiel effectif	443
12.2.4	Diffusion neutron-proton à basse énergie	445
12.3	Diffusion inélastique	447
12.3.1	Théorème optique	447
12.3.2	Potentiel optique	449
12.4	Développements formels	451
12.4.1	Équation intégrale de la diffusion	451
12.4.2	Diffusion d'un paquet d'ondes	453
12.5	Exercices	455
12.5.1	Pic de Gamow	455
12.5.2	Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène	457
12.5.3	Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton	458
12.5.4	Approximation de Born	461

12.5.5	Optique neutronique	461
12.5.6	Section efficace d'absorption de neutrinos	464
12.6	Bibliographie	466
13	Particules identiques	467
13.1	Bosons et fermions	467
13.1.1	Symétrie ou antisymétrie du vecteur d'état	467
13.1.2	Spin et statistique	471
13.2	Diffusion de particules identiques	476
13.3	États collectifs	478
13.4	Exercices	481
13.4.1	Particule Ω^- et couleur	481
13.4.2	Parité du méson π	482
13.4.3	Fermions de spin $1/2$ dans un puits infini	482
13.4.4	Désintégration du positronium	482
13.5	Bibliographie	483
14	Physique atomique	485
14.1	Méthodes d'approximation	485
14.1.1	Généralités	485
14.1.2	Cas d'une valeur propre simple de H_0	487
14.1.3	Cas d'un niveau dégénéré	488
14.1.4	Méthode variationnelle	489
14.2	Atomes à un électron	491
14.2.1	Niveaux d'énergie en l'absence de spin	491
14.2.2	Structure fine	491
14.2.3	Effet Zeeman	494
14.2.4	Structure hyperfine	496
14.3	Interaction atome-champ électromagnétique	498
14.3.1	Théorie semi-classique	498
14.3.2	Approximation dipolaire	500
14.3.3	Effet photo-électrique	502
14.3.4	Champ électromagnétique quantifié : émission spontanée	505
14.4	Manipulation d'atomes par laser	510
14.4.1	Équations de Bloch optiques	510
14.4.2	Forces dissipatives et forces réactives	514
14.4.3	Refroidissement Doppler	516
14.4.4	Piège magnéto-optique	522
14.5	Exercices	524
14.5.1	Perturbation au second ordre et forces de van der Waals	524
14.5.2	Corrections d'ordre α^2 aux niveaux d'énergie	525
14.5.3	Atomes muoniques	527
14.5.4	Atomes de Rydberg	528

14.5.5	Terme diamagnétique	529
14.5.6	Oscillations de Rabi du vide	530
14.5.7	Forces réactives	532
14.5.8	Énergie de l'état fondamental de l'atome d'héliu	534
14.6	Bibliographie	535
A	Théorème de Wigner et renversement du temps	537
A.1	Démonstration du théorème	538
A.2	Renversement du sens du temps	540
B	Mesure et décohérence	547
B.1	Modèle élémentaire pour la mesure	547
B.2	Franges de Ramsey	550
B.3	Interaction avec un champ dans la cavité	554
B.4	Décohérence	557
C	Méthode de Wigner et Weisskopf	561
D	Constantes physiques	567
	Références générales	569
	Index	571

Préface

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

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

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

pour accroître sa motivation de mieux comprendre des phénomènes physiques dont l'importance conceptuelle et pratique est de plus en plus évidente. C'est ce défi qu'essaie de relever avec succès Michel Le Bellac dans le présent ouvrage.

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

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

Claude Cohen-Tannoudji

Avant-propos

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

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

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

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

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

Les chapitres clés du livre, c'est-à-dire ceux qui divergent de la façon la plus évidente de l'exposé traditionnel, sont les chapitres 3, 4, 5, 6, et 8. Le chapitre 3 introduit l'espace des états sur l'exemple de la polarisation des photons et montre comment passer d'une amplitude ondulatoire à une amplitude de probabilité. Le spin $1/2$ introduit d'emblée le lecteur à un problème sans analogue classique (ou si peu...). Les propriétés essentielles du spin $1/2$ (algèbre des matrices de Pauli, matrices de rotation...) sont obtenues à partir des deux seules hypothèses : (1) la dimension deux de l'espace des états ; (2) l'invariance par rotation. La précession de Larmor du spin quantique permet d'introduire l'équation d'évolution. Ce chapitre prépare le lecteur à l'énoncé des postulats de la mécanique quantique au

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

chapitre suivant : il lui est possible dans chaque cas d'illustrer ces postulats de façon concrète en revenant aux exemples du chapitre 3. La distinction entre le cadre conceptuel général de la mécanique quantique et la modélisation d'un problème concret est soigneusement expliquée. Le chapitre 5 met en pratique la mécanique quantique sur des applications simples et physiquement importantes, dans le cas de systèmes dont le nombre de niveaux est fini, avec comme cas particulier la diagonalisation d'un hamiltonien en présence d'une symétrie périodique. Ce chapitre introduit également sur l'exemple de la molécule d'ammoniac l'interaction d'un système à deux niveaux atomique ou moléculaire avec un champ électromagnétique et les notions fondamentales d'émission et d'absorption.

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

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

Les six derniers chapitres sont consacrés à des applications plus classiques. Le chapitre 9 présente la mécanique ondulatoire et ses applications usuelles (effet tunnel, états liés du puits carré, potentiel périodique...). Les relations de commutation du moment angulaire ayant été établies au chapitre 8, le chapitre 10 débute par la construction des états propres de $\vec{J}^2$ et J_z et se termine par le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels.

Le chapitre 11 développe la théorie de l'oscillateur harmonique et celle du mouvement dans un champ magnétique constant, ce qui est l'occasion de donner quelques explications sur l'invariance de jauge locale. Une section importante traite des champs quantifiés : champ de vibrations et phonons, champ électromagnétique et ses fluctuations quantiques. Les chapitres 12 et 13 sont consacrés à la diffusion et aux particules identiques. Enfin le chapitre 14 est une brève introduction à la physique de l'atome à un électron, l'objectif principal étant de calculer les forces sur un atome à deux niveaux placé dans le champ d'un laser et d'en discuter les applications, dont le refroidissement Doppler et les pièges magnéto-optiques.

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

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

Nice, mars 2003
Michel Le Bellac

N.B. Cet ouvrage utilise le point décimal.

Chapitre 1

Introduction

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

1.1 Structure de la matière

1.1.1 Échelles de longueur : de la cosmologie aux particules élémentaires

Le tableau 1.1 donne l'ordre de grandeur en mètres des dimensions de quelques objets typiques, en partant des dimensions de l'Univers pour

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

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

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

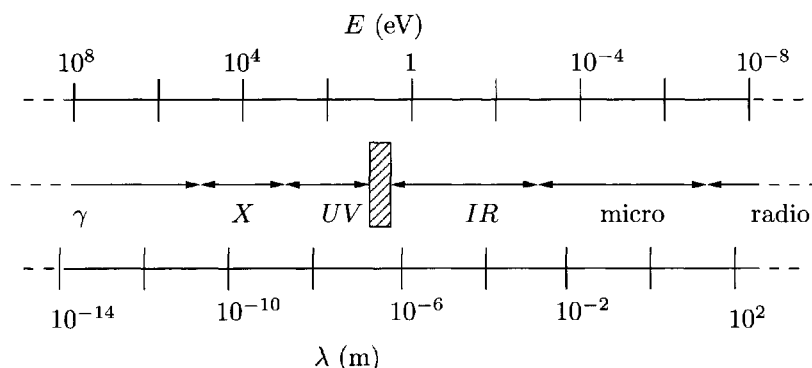


FIG. 1.1 – Longueur d'onde de rayonnements électromagnétiques et énergie des photons correspondants. Les frontières entre les différents types de rayonnement (par exemple la frontière entre les rayons γ et les rayons X) ne sont pas définies de façon stricte. Un photon d'énergie $E = 1 \text{ eV}$ a une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

1. D'autres techniques d'exploration sont la diffusion de neutrons (exercice 1.6.4), la microscopie électronique, la microscopie à effet tunnel (§ 9.4.2) etc.

1.1.2 États de la matière

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

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

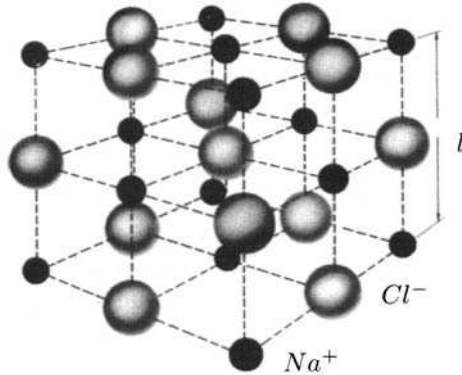


FIG. 1.2 – Arrangement des atomes dans le cristal de chlorure de sodium. Les ions chlore Cl^- sont plus gros que les ions sodium Na^+ .

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

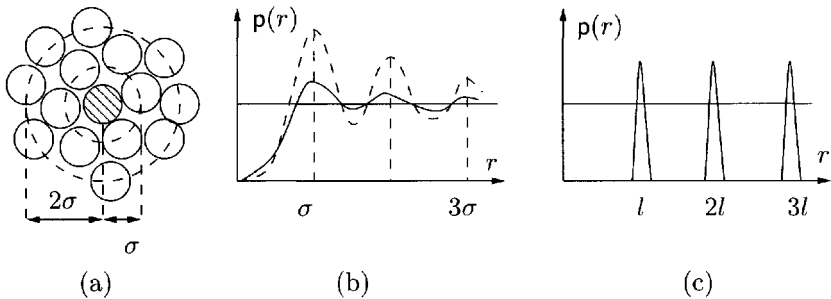
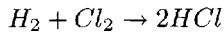


FIG. 1.3 – (a) Arrangement des atomes dans l'argon liquide. (b) Probabilité $p(r)$ pour un liquide (tirets) et pour un gaz (trait continu). (c) Probabilité $p(r)$ pour un cristal simple.

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

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

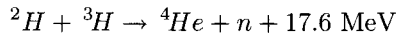


L'atome est composé d'un noyau atomique (ou simplement noyau) chargé positivement et d'électrons chargés négativement. Plus de 99.9 % de la masse de l'atome se trouve dans le noyau atomique, car le rapport de la masse de l'électron m_e à celle du proton m_p est $m_e/m_p \simeq 1/1836$. L'atome est de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

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

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

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



La réaction dégage une énergie de 17.6 MeV et pourrait être utilisée dans un futur (probablement lointain) pour produire de l'énergie à grande échelle, l'énergie de fusion.

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

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

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

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

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

où nous avons indiqué en exposant la charge des particules. Cette désintégration est possible, car les masses⁴ des particules dans (1.2) vérifient

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

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

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

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

et la désintégration

$${}^2H \rightarrow 2p + e + \bar{\nu}_e$$

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

1.1.3 Constituants élémentaires

Nous avons décomposé les molécules en atomes, les atomes en électrons et noyaux, les noyaux en protons et neutrons. Peut-on aller encore plus loin, par exemple décomposer le proton ou l'électron en constituants plus élémentaires ? Peut-on dire par exemple à partir de (1.2) que le neutron est « formé » d'un proton, d'un électron et d'un antineutrino ? Un argument simple fondé sur les inégalités de Heisenberg montre que l'électron ne peut pas préexister dans le neutron (exercice 9.7.4), et qu'il est créé au moment de la désintégration : on ne peut donc pas dire que le neutron est « composé » d'un proton, d'un électron et d'un neutrino. On pourrait aussi penser à « casser » un proton ou un neutron en des composants plus élémentaires, en les bombardant par des particules énergiques, et répéter ce qui se passe par exemple quand on bombarde un deutéron avec des électrons de quelques MeV

$$e + {}^2H \rightarrow e + p + n$$

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

$$e + p \rightarrow e + p$$

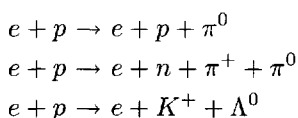
mais pour des électrons d'énergie suffisante (quelques centaines de MeV), au lieu de casser le proton, on crée d'autres particules, par exemple dans des

4. Trois expériences récentes : S. Fukuda *et al.* (SuperKamiokande Collaboration) *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5651 (2001), Q. Ahmad *et al.* (SNO Collaboration) *Phys. Rev. Lett.* **87**, 071301 (2001) et K. Eguchi *et al.* (Kamland Collaboration) *Phys. Rev. Lett.* **90**, 021802 (2003) montrent de façon convaincante que la masse du neutrino est non nulle, probablement de l'ordre de $10^{-2} \text{ eV}/c^2$: cf. l'exercice 4.3.6 sur les oscillations neutrinos.

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

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

réactions du type



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

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

Dans l'état actuel de nos connaissances⁶, il existe trois familles de particules élémentaires, ou « particules de matière » de spin $1/2$ ⁷. Le tableau 1.2 en donne la liste ; la charge électrique q est exprimée en unités de la charge du proton. Chaque famille se compose de leptons et de quarks, et à chaque particule correspond une antiparticule de charge opposée. Les leptons de la première famille sont l'électron et son antiparticule le positron e^+ , ainsi que le neutrino électronique ν_e et son antiparticule l'antineutrino électronique $\bar{\nu}_e$, et les quarks de cette famille sont le quark « up » (u) de charge $2/3$ et le quark « down » (d) de charge $-1/3$, avec bien sûr les antiquarks $\bar{u}$ et $\bar{d}$ correspondants, de charge $-2/3$ et $1/3$ respectivement. Le proton est

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

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

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

une combinaison *uud* et le neutron une combinaison *udd*. Cette première famille suffit à notre vie courante, puisqu'elle permet de fabriquer la matière ordinaire, le neutrino étant indispensable dans le cycle des réactions nucléaires assurant la bonne marche du Soleil. Si l'existence de la première famille peut se justifier par un argument anthropocentrique (si elle n'existait pas, nous ne serions pas là pour en parler !) la raison d'être des deux autres familles reste aujourd'hui tout à fait mystérieuse⁸.

À ces particules, il faut ajouter celles qui « transportent les interactions » : le photon pour les interactions électromagnétiques, les bosons *W* et *Z* pour les interactions faibles, les gluons pour les interactions fortes et le graviton pour les interactions gravitationnelles⁹, ce qui nous amène naturellement à présenter ces interactions.

1.1.4 Interactions (ou forces) fondamentales

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

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

où $\hat{r}$ est le vecteur unitaire¹¹ $\vec{r}/r$, $r = |\vec{r}|$ et ϵ_0 la permittivité du vide. Si les charges sont en mouvement avec une vitesse *v*, on doit aussi tenir compte des forces magnétiques, mais celles-ci sont plus faibles que la force de Coulomb par un facteur $\sim (v/c)^2$. Pour les électrons des couches externes, $(v/c)^2 \sim (1/137)^2 \ll 1$, mais, compte tenu de la très grande précision des expériences de physique atomique, les forces magnétiques sont facilement mises en évidence dans des phénomènes comme la structure fine ou l'effet Zeeman (§ 14.2.3). La

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

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

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

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

force de Coulomb (1.3) est caractérisée par :

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

Le point de vue moderne, celui de la théorie quantique des champs, est que les forces électromagnétiques sont dues à l'échange de photons « virtuels »¹² entre particules chargées. La théorie quantique des champs résulte du mariage (conflictuel¹³) entre la mécanique quantique et la relativité restreinte. Les interactions entre atomes ou entre molécules sont représentées par des forces effectives, par exemple les forces de van der Waals (exercice 14.5.1). Ces forces n'ont pas de caractère fondamental car elles se déduisent de la force de Coulomb : c'est le déguisement sous lequel apparaît la force de Coulomb pour des systèmes complexes électriquement neutres.

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

Les *interactions faibles* sont responsables de la radioactivité β

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

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

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

De même que les interactions fortes, les interactions faibles sont à courte portée, mais, comme l'indique leur nom, elles sont beaucoup moins intenses.

12. Ce terme sera expliqué au § 4.2.4.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2 Physique classique et physique quantique

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

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

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

Sous cette forme, l'équation fondamentale de la dynamique survit aux modifications apportées par Einstein en 1905 avec la relativité restreinte, à condition d'utiliser l'expression relativiste de l'impulsion en fonction de la vitesse $\vec{v}$, de la masse m de la particule et de la vitesse de la lumière c

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

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

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

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

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

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

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

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

3. La troisième branche est la *thermodynamique*, qui se déduit du second principe¹⁵: il n'existe pas de dispositif fonctionnant suivant un cycle dont le

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

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

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

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

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

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

16. La probabilité $p(E)$ est le produit de $p_B(E)$ (1.12) et d'un facteur $\mathcal{D}(E)$, la « densité des niveaux d'énergie », qui en physique classique s'obtient par une intégration sur l'espace de phase : voir note 21. Le calcul quantique de la densité de niveaux est décrit au § 9.6.2.

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

fluides découlent de (1.6) et de diverses lois phénoménologiques, comme la loi qui relie en mécanique des fluides force, gradient de vitesse et viscosité. Il importe de bien faire la distinction entre le petit nombre de lois fondamentales et les multiples lois phénoménologiques que la physique classique utilise, faute de mieux, pour décrire la matière.

Bien que la physique classique soit d'une utilité indiscutable, elle n'en présente pas moins une lacune de taille : alors que la physique se veut une théorie de la matière, la physique classique est complètement incapable d'expliquer le comportement de la matière étant donné ses constituants et les forces entre ces constituants¹⁸. Elle ne peut pas prédire l'existence des atomes, car on ne peut pas construire une échelle de longueur avec les constantes de la physique classique : masses et charges du noyau et des électrons¹⁹. Elle n'explique pas pourquoi le Soleil brille, pourquoi la vapeur de sodium émet une lumière jaune, elle n'a rien à dire sur les propriétés chimiques des alcalins, sur le fait que le cuivre conduit l'électricité alors que le soufre est un isolant, etc. Lorsque le physicien classique a besoin d'une propriété de la matière, une résistance électrique, une chaleur spécifique, il n'a pas d'autre choix que de la mesurer expérimentalement. Au contraire la mécanique quantique a la prétention d'expliquer le comportement de la matière à partir des constituants et des forces. Naturellement des prédictions précises à partir des premiers principes ne sont possibles que pour les systèmes les plus simples, comme l'atome d'hydrogène ou celui d'hélium. La complexité des calculs ne permet pas par exemple de prédire la structure cristalline de l'argent à partir des données sur cet atome, mais étant donné cette structure, on saura expliquer pourquoi l'argent est un conducteur, ce que la physique classique est incapable de faire.

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

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

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

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

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

Simplement il existe des problèmes que par nature la physique classique ne peut pas aborder.

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

La grande majorité des physiciens ne se préoccupent pas des propriétés déroutantes de la mécanique quantique et s'en servent comme d'un outil sans se poser de questions de principe. Cependant, les progrès théoriques et surtout expérimentaux des ces vingt dernières années ont permis de mieux cerner certains aspects du comportement des objets quantiques : bien que tout soit encore loin d'être clair, nous verrons au chapitre 6 et dans l'appendice B que nous sommes sans doute sur la voie d'une compréhension plus satisfaisante de la mécanique quantique. Dans quelques années, on pourra peut-être trouver obsolète l'affirmation de Feynman : « Je pense que l'on peut affirmer aujourd'hui que personne ne comprend la mécanique quantique. ». Avant de nous lancer dans ces développements récents, revenons quelques instants une centaine d'années en arrière, aux débuts de la physique quantique.

1.3 Un peu d'histoire

1.3.1 Le rayonnement du corps noir

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

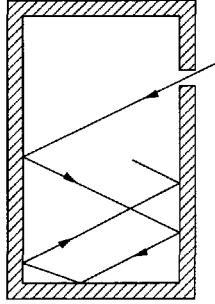


FIG. 1.4 – Enceinte pour le rayonnement du corps noir.

ressortir, puisqu'à chaque réflexion il a une bonne probabilité d'être absorbé par la paroi intérieure de l'enceinte (figure 1.4).

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

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

où (n_x, n_y, n_z) sont des nombres entiers positifs ou négatifs et $\omega = c|\vec{k}| = ck$. On montre que chaque onde stationnaire se comporte comme un oscillateur harmonique²⁰ de fréquence ω dont l'énergie est proportionnelle au carré de l'amplitude, et donc à E_0^2 . D'après la loi de Boltzmann (1.12), la probabilité que cet oscillateur ait une énergie E comprend un facteur $\exp(-E/k_B T) = \exp(-\beta E)$. En fait, dans ce cas, la densité de niveaux $\mathcal{D}(E)$ (cf. note 16) est une constante²¹, et l'énergie moyenne de cet oscillateur est simplement

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

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

20. Ceci sera expliqué au § 11.3.3.

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

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

x et p étant la position et l'impulsion.

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

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

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

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

La thermodynamique permet de montrer la loi d'échelle

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

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

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

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

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

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

Parmi toutes les hypothèses conduisant au résultat inacceptable d'une énergie infinie, Planck remet en cause celle qui conduit au calcul (1.14) de l'énergie moyenne d'un oscillateur²² : au lieu de supposer que E peut prendre toutes les valeurs possibles entre zéro et l'infini, il admet que cette énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes E_n qui sont des multiples entiers de la fréquence ω de l'oscillateur, avec un coefficient de proportionnalité $\hbar$

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

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

La constante $\hbar$ est appelée *constante de Planck* ; plus exactement, c'est la constante de Planck h divisée²³ par 2π : $\hbar = h/(2\pi)$. La constante de Planck se mesure en J.s : elle a pour dimension $\mathcal{ML}^2\mathcal{T}^{-1}$ et elle a pour valeur numérique

$$\hbar \simeq 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s} \quad \text{ou} \quad h \simeq 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

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

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

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

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

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

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

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

L'exemple le plus connu de rayonnement du corps noir est le rayonnement fossile qui remplit l'Univers²⁴, ou rayonnement à 3 K. La distribution de fréquence de ce rayonnement suit remarquablement la loi de Planck (1.22) avec une température de 2.73 K $\simeq$ 3 K (figure 1.5), mais ce rayonnement n'est plus à l'équilibre thermodynamique. Il s'est découpé des atomes environ 400 000 ans après le big-bang, c'est-à-dire la naissance de l'Univers. Au moment de ce découplage, la température était de 10^4 K environ. Ensuite l'expansion de l'Univers a réduit cette valeur à la valeur actuelle de 3 K.

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

24. On trouvera un exposé remarquable du big-bang dans S. Weinberg, *Les Trois Premières Minutes de l'Univers*, Éditions du Seuil, Paris (1978).

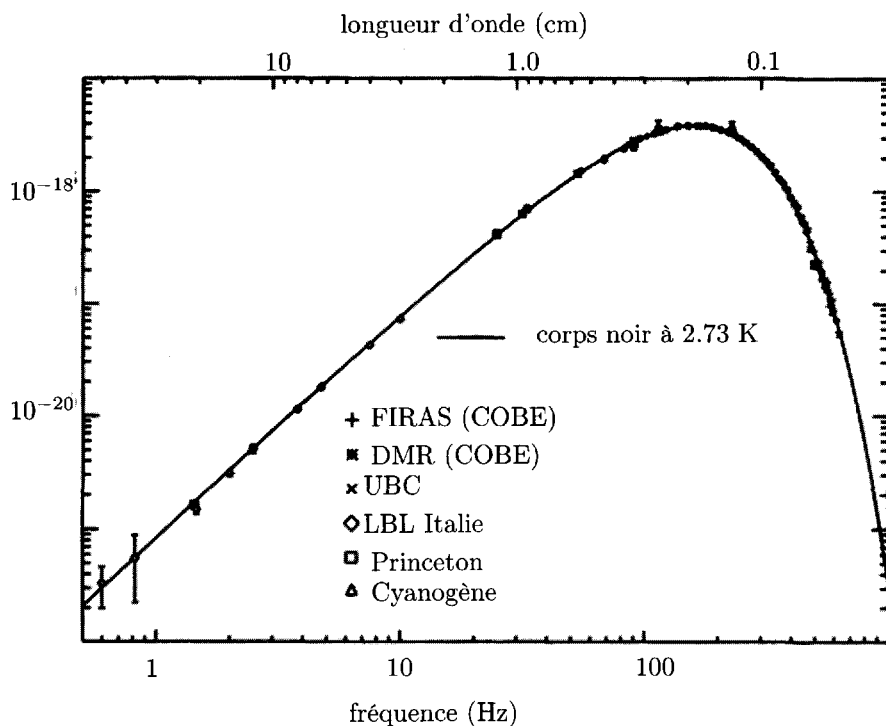


FIG. 1.5 – Le rayonnement du corps noir à 3 K. L'axe vertical donne l'intensité du rayonnement en $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1}$. On observera l'accord remarquable avec la loi de Planck pour $T = 2.73 \text{ K}$. D'après J. Rich, *Principes de la cosmologie*,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

1.3.2 L'effet photoélectrique

Le nombre entier n dans (1.19) possède une interprétation physique particulièrement importante : la raison pour laquelle l'énergie d'une onde stationnaire de fréquence ω est un multiple entier $n\hbar\omega$ de $\hbar\omega$ est que l'on y trouve précisément n photons (ou particules de lumière) d'énergie $\hbar\omega$. C'est cette interprétation qui a conduit Einstein à introduire le concept de photon pour expliquer l'effet photoélectrique. Lorsqu'un métal est illuminé par un rayonnement électromagnétique, des électrons sont arrachés au métal, avec un effet de seuil qui dépend de la fréquence, et non de l'intensité. L'expérience de Millikan (figure 1.6) confirme l'interprétation d'Einstein : les électrons sont arrachés au métal avec une énergie cinétique E_c

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

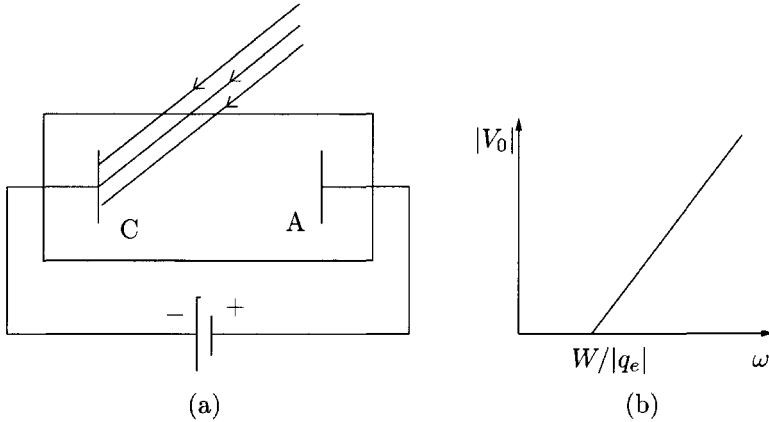


FIG. 1.6 – L'expérience de Millikan. (a) Schéma de l'expérience. (b) $|V_0|$ en fonction de ω .

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

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

Porter $|V_0|$ en fonction de ω donne une droite de pente $\hbar/|q_e|$, et la valeur de $\hbar$ coïncide avec celle du rayonnement du corps noir, ce qui confirme l'hypothèse d'Einstein²⁵: le rayonnement électromagnétique est composé de photons²⁶. Le fait que la valeur de $\hbar$ soit la même que pour le corps noir montre bien que l'on est en présence d'une nouvelle constante fondamentale.

1.4 Ondes et particules : interférences

1.4.1 Hypothèse de de Broglie

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

25. Encore une réécriture de l'histoire ! Certains résultats qualitatifs sur l'effet photoélectrique avaient été obtenus par Lenard au début des années 1900, mais les mesures précises de Millikan sont postérieures de 10 ans à l'hypothèse d'Einstein, qui semble avoir été motivé non par l'effet photoélectrique, mais par la similitude entre la loi de transformation relativiste de la fréquence et celle de l'énergie. Voir G. Margaritondo, *Physics World*, avril 2001.

26. Toutefois l'argument n'est pas entièrement convaincant, car l'effet photoélectrique peut s'expliquer dans le cadre d'une théorie semi-classique, où le champ électromagnétique n'est pas quantifié et où le concept de photon n'existe pas : cf. § 14.3.3. En revanche on ne peut pas expliquer l'effet photoélectrique sans introduire $\hbar$.

possède une impulsion

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

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

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

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

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

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

1.4.2 Diffraction et interférences avec des neutrons froids

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

Les expériences ont été réalisées dans les années 1980 par un groupe d'Innsbrück auprès du réacteur nucléaire de recherche de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble. Les neutrons de masse m_n sont produits par la fission d'atomes d'uranium²³⁵ dans le cœur du réacteur, et sont ensuite guidés vers les expériences. En ordre de grandeur, leur énergie cinétique est $k_B T$, où $T \sim 300$ K est la température ambiante : on appelle ces neutrons des neutrons thermiques dont l'énergie cinétique $\sim k_B T \simeq 1/40$ eV pour $T = 300$ K. L'impulsion $p = \sqrt{2m_n k_B T}$ correspond à une vitesse $v = p/m_n$ d'environ 1000 m.s⁻¹ et d'après (1.26) la longueur d'onde λ_{th} vaut $h/\sqrt{2m_n k_B T} \simeq 1.8$ Å. On

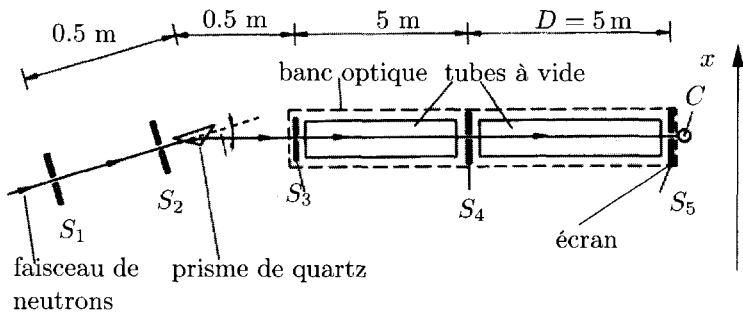
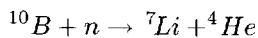


FIG. 1.7 – Dispositif expérimental pour la diffraction et les interférences de neutrons. S_1 et S_2 : fentes collimatrices. S_3 : fente d'entrée. S_4 : fente objet. S_5 : position du compteur C . D'après A. Zeilinger *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

augmente la longueur d'onde en faisant passer les neutrons dans des matériaux à basse température : par exemple si la température du matériau est 1 K, la longueur d'onde passera à $\lambda = \lambda_{th} \sqrt{300} \simeq 31 \text{ \AA}$. De tels neutrons sont appelés « neutrons froids ». Dans l'expérience du groupe d'Innsbrück, les neutrons sont « refroidis » dans du deutérium²⁷ liquide à 25 K. En sélectionnant les neutrons après leur passage dans le deutérium liquide, on obtient des neutrons dont la longueur d'onde moyenne est de 20 Å.

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



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

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

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

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

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

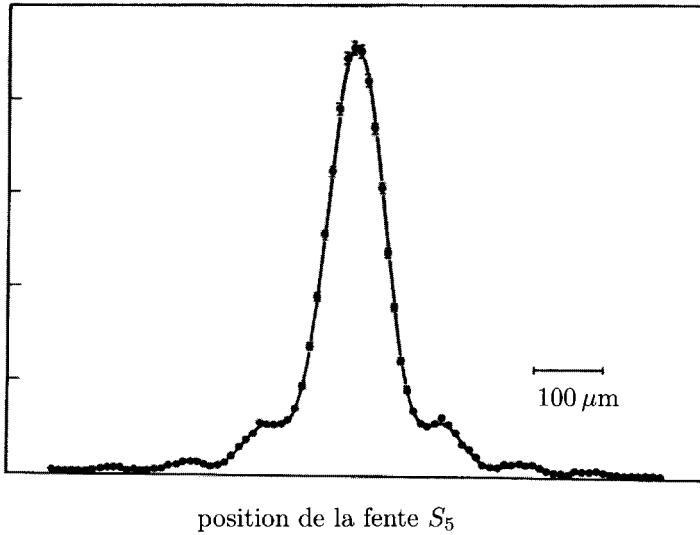


FIG. 1.8 – Diffraction de neutrons par une fente. D'après A. Zeilinger *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

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

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

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

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

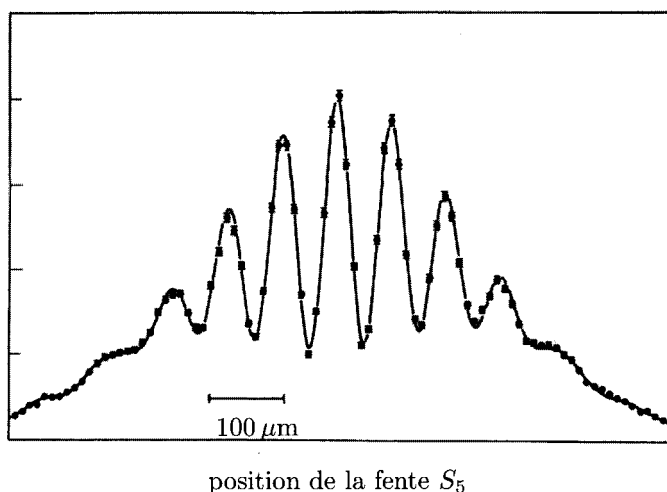


FIG. 1.9 – Expérience des fentes d’Young avec des neutrons. D’après A. Zeilinger *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

mais des atomes froids que l’on laisse tomber à travers des fentes d’Young : les impacts des atomes tombant sur l’écran sont enregistrés pour donner l’aspect de la figure 1.10.

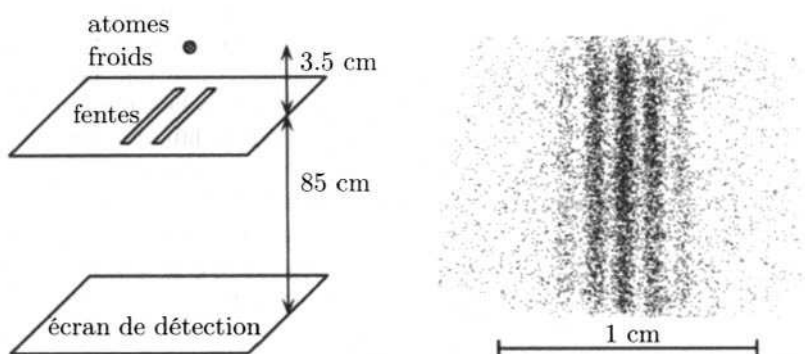


FIG. 1.10 – Interférences avec des atomes froids. D’après Basdevant et Dalibard [2001].

1.4.3 Interprétation des expériences

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

- avec des photons, en réduisant l'intensité de telle sorte que les photons arrivent un à un sur l'écran,
- avec des électrons,
- avec des molécules légères (Na_2),
- avec des fullerènes C_{60} (exercice 1.6.1),

et il y a tout lieu de penser que les résultats sont universels, indépendants du type de particule : atomes, molécules, virus²⁸... Cependant ces résultats expérimentaux incontournables souffrir d'une difficulté d'interprétation : dans une expérience classique d'interférences de fentes d'Young réalisée avec des ondes, l'onde incidente se divise en deux ondes qui se recombinent ensuite et interfèrent, phénomène visible à l'oeil nu pour des ondes à la surface de l'eau. Dans le cas des neutrons, chaque neutron arrive isolément ; l'intervalle de temps entre deux neutrons successifs est tel que lorsqu'un neutron est détecté sur l'écran, le neutron suivant est encore dans le réacteur, confiné dans un atome d'uranium. Est-il envisageable que le neutron se scinde en deux fractions de neutron, chaque fraction passant par une fente ? Il est facile de se convaincre que cette hypothèse est absurde : un compteur détecte toujours un neutron entier, jamais une fraction de neutron ! Il en est de même si l'on scinde à l'aide d'un miroir semi-transparent une onde lumineuse d'intensité suffisamment réduite pour pouvoir détecter les photons individuellement ; les photodétecteurs D_1 et D_2 détectent toujours un photon entier, jamais une fraction de photon (figure 1.11). Le photon, comme le neutron, est insécable, du moins dans le vide, car par interaction avec un milieu non-linéaire, un photon peut se scinder en deux photons d'énergie plus faible : voir § 6.2.2.

Il nous faut donc admettre qu'une particule quantique présente à la fois un aspect ondulatoire et un aspect corpusculaire: c'est donc *un objet entièrement nouveau et étrange*, du moins pour notre intuition formée par la pratique d'objets macroscopiques. Comme l'écrivent Lévy-Leblond et Balibar, paraphrasant Feynman, « les objets quantiques sont complètement cinglés », mais ils ajoutent « au moins le sont-ils tous de la même façon ». En effet photons, électrons, neutrons, atomes, molécules... ont tous ce même comportement, à la fois ondulatoire et corpusculaire. Afin de mettre en valeur cette unicité du comportement quantique, certains auteurs ont

28. Cependant l'observation d'effets ondulatoires est de plus en plus difficile quand les objets deviennent plus gros, d'abord parce que les longueurs d'onde sont de plus en plus courtes, mais aussi parce que les effets de la décohérence (§ 6.3.1) sont de plus en plus importants lorsque la taille de l'objet augmente.

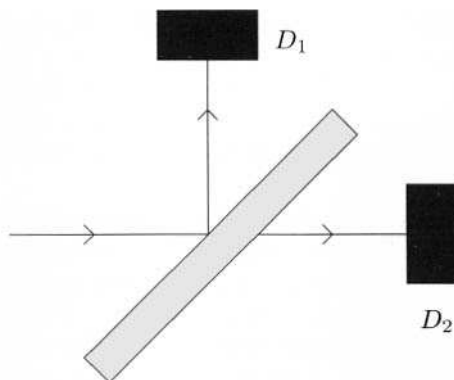


FIG. 1.11 – lame séparatrice et comptage de photons par des photodétecteurs D_1 et D_2 .

proposé le néologisme « quanton » pour désigner un objet doté d'un tel comportement. Nous continuerons à utiliser « particule quantique », ou simplement « particule », car les particules considérées dans ce livre auront un comportement quantique, et nous préciserons « particule classique » si nous voulons revenir à des petites boules de billard.

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

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

Une remarque fondamentale est que l'on ne peut pas savoir *a priori* en quel point de l'écran va arriver un neutron donné. On peut seulement affirmer que la *probabilité* d'arrivée sur l'écran est grande en un point de maximum de la figure d'interférences, et petite en un point où la figure

d'interférences présente un minimum. Plus précisément, la probabilité d'arrivée en un point d'abscisse x est proportionnelle à l'intensité $\mathcal{I}(x)$ de la figure d'interférences en ce point. De même, dans l'expérience de la figure 1.11, chaque photomultiplicateur a une probabilité 1/2 d'être déclenché par un photon donné, mais il est impossible de savoir à l'avance lequel des deux le sera.

Essayons de donner une formulation quantitative de la discussion précédente. Tout d'abord, par analogie avec les ondes, nous introduirons une fonction complexe de x , $a_1(x)$ (resp. $a_2(x)$), appelée amplitude de probabilité, associée au passage par la fente supérieure (resp. inférieure) d'un neutron arrivant en x sur l'écran. Le module au carré de l'amplitude de probabilité donne l'intensité : si la fente 2 est fermée $\mathcal{I}_1(x) = |a_1(x)|^2$ et inversement $\mathcal{I}_2(x) = |a_2(x)|^2$ si la fente 1 est fermée. Dans le cas (i) on ajoute les amplitudes avant de calculer l'intensité

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

et dans le cas (ii) on ajoute les intensités

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

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

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

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

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

En résumé, on doit sommer les *amplitudes* pour des états finaux²⁹ identiques, et les *probabilités* pour des états finaux différents, même si ces états finaux concernent d'autres paramètres physiques que ceux auxquels on s'intéresse. Il suffit que ces paramètres soient accessibles en principe, même s'ils ne sont pas effectivement observés, pour que l'on doive considérer des états finaux comme différents. Nous illustrerons ce point au paragraphe suivant sur un exemple concret. Une façon imagée d'exprimer les propriétés ci-dessus consiste à dire que des états finaux identiques définissent des *chemins indiscernables*, et que l'on doit sommer les amplitudes correspondant à tous les chemins indiscernables.

1.4.4 Inégalités de Heisenberg I

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

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

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

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

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

Nous allons maintenant utiliser (1.29) pour discuter la question de l'observation des trajectoires dans l'expérience d'interférences avec des neutrons. Einstein avait proposé le dispositif de la figure 1.12 pour déterminer

29. La grammaire classique imposerait « états finaux »...

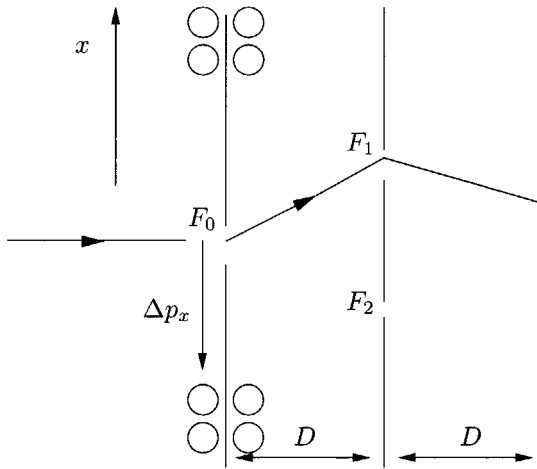


FIG. 1.12 – Une controverse Bohr-Einstein. Les fentes F_1 et F_2 sont les fentes d'Young. La fente F_0 est percée dans un écran mobile verticalement.

la trajectoire du neutron : passe-t-il par la fente supérieure ou inférieure ? Quand le neutron franchit la première fente F_0 , il donne par conservation de l'impulsion une impulsion vers le bas à l'écran E_0 s'il franchit la fente supérieure F_1 et une impulsion vers le haut s'il franchit la fente inférieure F_2 . On peut donc déterminer par quelle fente est passé le neutron ! La réponse de Bohr fut la suivante : si l'écran E_0 reçoit une impulsion Δp_x que l'on mesure, alors sa position est déterminée au mieux avec une précision de l'ordre de $h/\Delta p_x$. Cette imprécision dans la position de la source suffit à faire disparaître la figure d'interférences (exercice 1.6.3). Tous les dispositifs imaginés pour déterminer la trajectoire du neutron sont, soit efficaces, mais dans ce cas il n'y a pas d'interférences, soit inefficaces, et dans ce cas les interférences persistent, mais on ne sait pas par quelle fente est passé le neutron. La figure d'interférences se brouille au fur et à mesure que le dispositif devient de plus en plus efficace.

La discussion précédente est en tout point correcte, mais elle masque le point essentiel : ce n'est pas la perturbation causée à la trajectoire du neutron par le choc sur le premier écran qui brouille les interférences³⁰. Ce qui est

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

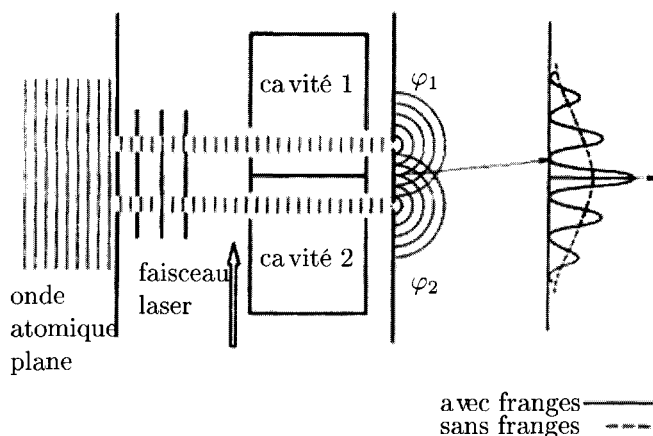


FIG. 1.13 – Étiquetage des trajectoires dans l'expérience des fentes d'Young. D'après B. Englert, M. Scully et H. Walther, *Nature* **351**, 111 (1991).

crucial est la possibilité *d'étiqueter la trajectoire*. On peut imaginer et même réaliser expérimentalement des dispositifs qui étiquettent les trajectoires sans perturber en quoi que ce soit les degrés de liberté observés, et cet étiquetage suffit à détruire les interférences. Nous allons décrire brièvement un tel dispositif, qui n'a pas encore été réalisé expérimentalement, mais qui ne semble pas hors de portée de développements technologiques futurs. D'autres dispositifs d'étiquetage sans perturbation qui ont été *effectivement* réalisés sont discutés dans l'exercice 3.3.9, au § 6.2.2 et dans l'annexe B. Cependant le principe de ces dispositifs repose sur des notions qui n'ont pas encore été introduites, et nous revenons pour l'instant à l'exemple familier des fentes d'Young. Le dispositif proposé³¹ utilise des atomes, ce qui permet de jouer sur leurs degrés de liberté internes sans affecter la trajectoire de leur centre de masse. Avant leur passage à travers les fentes d'Young, les atomes sont portés dans un état excité par un faisceau laser (figure 1.13). Devant chacune des fentes d'Young se trouve une cavité supraconductrice micro-onde, décrite plus en détail au § 6.3.1 et à l'annexe B. L'atome en passant dans la cavité revient à son état fondamental en émettant avec une probabilité voisine de 100 % un photon qui reste confiné dans la cavité. La présence du photon dans l'une ou l'autre des cavités permet d'étiqueter la trajectoire de l'atome, ce qui détruit les interférences. La perturbation apportée à la trajectoire du centre de masse de l'atome est totalement négligeable : il n'y a pratiquement aucun transfert d'impulsion entre le photon et l'atome. Cependant les deux

31. Ce dispositif a été imaginé par B. Englert, M. Scully et H. Walther, *Nature* **351**, 111 (1991) et une version grand public en est donnée dans *Pour la Science* **208**, 60 (1995). Les atomes sont supposés se trouver dans des états de Rydberg (cf. exercice 14.5.4.) Une expérience voisine dans son principe mais dont le schéma est plus complexe a été effectivement réalisée par S. Dürr, T. Nonn et G. Rempe, *Nature* **395**, 33 (1998).

états finaux : atome arrivant au point d'abscisse x sur l'écran et photon dans la cavité 1, et atome arrivant au point x sur l'écran et photon dans la cavité 2 sont *différents*. Il faut donc prendre le module carré de chacune des amplitudes correspondantes et ajouter les probabilités. On note qu'il n'est pas nécessaire de détecter le photon, ce qui introduirait d'ailleurs une complication expérimentale supplémentaire. Il suffit de savoir que l'atome émet un photon de façon quasi-certaine au cours de son passage dans la cavité. Comme nous l'avons déjà souligné, il n'est pas indispensable que l'observation de l'état final soit effectivement réalisée et il suffit qu'elle soit possible en principe, même si les technologies d'aujourd'hui ou de demain sont incapables de permettre cette observation. Nous reviendrons sur cette discussion au § B.1, en lui donnant un cadre mathématique.

1.5 Niveaux d'énergie

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

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

Considérons une particule classique se déplaçant pour simplifier sur une droite choisie comme axe des x , et dont l'énergie potentielle est $U(x)$. En mécanique quantique, on appelle en général $U(x)$ le *potentiel*. Il est bien connu que l'énergie mécanique E , somme de l'énergie cinétique K et de l'énergie potentielle U est une constante : $E = K + U = \text{cste}$. Supposons que l'énergie potentielle a la forme de la figure 1.14, celle d'un « puits de potentiel » : elle tend vers une même constante pour $x \rightarrow \pm\infty$. Il sera commode de fixer le zéro d'énergie de telle sorte que $E = 0$ pour une particule d'énergie cinétique nulle à l'infini.

Deux situations sont possibles

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

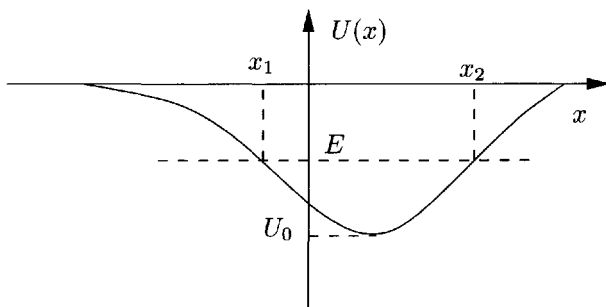


FIG. 1.14 – Puits de potentiel.

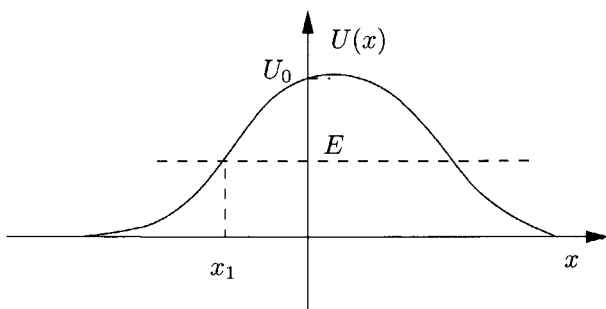


FIG. 1.15 – Barrière de potentiel.

Lorsque l'énergie potentielle est positive³² (figure 1.15), on a affaire à une « barrière de potentiel » : dans ce cas $E > 0$ et on observe seulement des états de diffusion. Si $E < U_0$ la particule partant de $x = -\infty$ est d'abord freinée, puis elle repart en arrière au point x_1 qui vérifie $U(x_1) = E$: elle rebondit sur la barrière de potentiel. Si $E > U_0$, la particule franchit la barrière de potentiel et rejoint $x = +\infty$ en retrouvant sa vitesse initiale.

En mécanique classique, l'énergie d'un état lié peut prendre toutes les valeurs possibles entre U_0 et 0. En mécanique quantique, cette énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes. En revanche, comme en mécanique classique, l'énergie d'un état de diffusion est arbitraire. Cependant on trouvera (sections 9.3 et 9.4) des différences notables avec la mécanique classique. Par exemple la particule peut franchir une barrière de potentiel même si $E < U_0$: c'est « l'effet tunnel ». Inversement elle peut repartir en arrière même si $E > U_0$.

Appliquons ces considérations de mécanique classique aux atomes : le premier modèle d'atomes fut proposé par Thomson (figure 1.16a), qui le

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

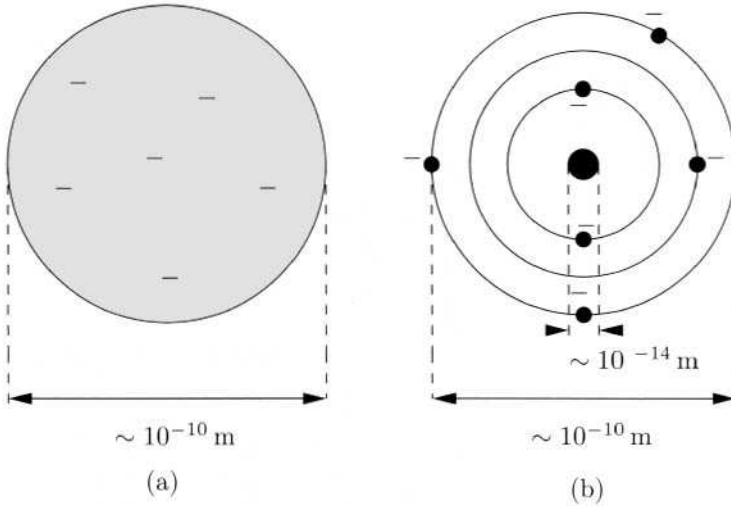


FIG. 1.16 – Modèles d'atome : (a) Thomson : les électrons sont situés dans une distribution de charge positive continue. (b) Rutherford : les électrons décrivent des orbites autour du noyau.

représentait par une sphère uniformément chargée positivement, avec des électrons en mouvement dans cette distribution de charge. Un résultat élémentaire d'électromagnétisme montre que les électrons se trouvent dans un potentiel harmonique, et leur niveau d'énergie fondamental (stable) est celui où ils sont immobiles au fond du puits de potentiel ; les états excités correspondent à des vibrations autour de la position d'équilibre. Ce modèle fut éliminé³³ par les expériences de Geiger et Marsden, qui montrèrent que la diffusion de particules α (noyaux d' ${}^4\text{He}$) par des atomes était incompatible avec ce modèle. Rutherford déduisit de ces expériences l'existence du noyau atomique, de dimension inférieure à 10 fm, et proposa le *modèle planétaire de l'atome* (figure 1.16b) : les électrons tournent autour du noyau, tout comme les planètes tournent autour du Soleil, l'attraction gravitationnelle étant remplacée par l'attraction coulombienne. Ce modèle présente deux défauts majeurs, non indépendants : aucune échelle ne fixe les dimensions de l'atome et l'atome est instable, car les électrons sur orbite rayonnent et finissent par tomber sur le noyau. Dans ce processus, un spectre continu de fréquences est émis. Au contraire, les résultats expérimentaux de la fin du XIX^e siècle montraient que (figure 1.17)

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

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

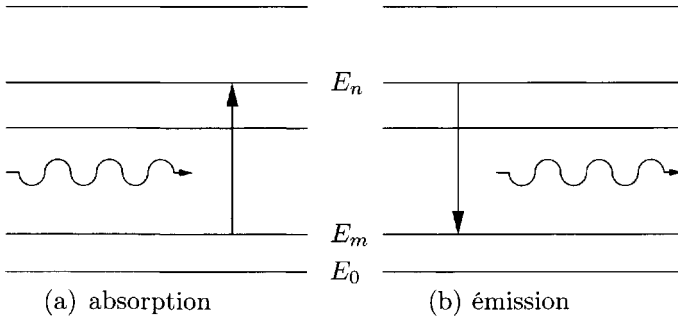


FIG. 1.17 – Émission et absorption de rayonnement entre deux niveaux E_n et E_m .

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

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

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m \quad (1.31)$$

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

1.5.2 L'atome de Bohr

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

$$2\pi a = n\lambda \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.32)$$

Intuitivement, ceci peut s'expliquer, car cette condition revient à exiger que la phase de l'onde de de Broglie revienne à sa valeur initiale après un tour complet, et on forme ainsi une onde stationnaire. On déduit de (1.32) et (1.26)

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

D'après la loi de Newton

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

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

$$a = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (1.33)$$

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

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.53 \text{ \AA} \quad (1.34)$$

L'énergie du niveau étiqueté par n est

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

Les niveaux d'énergie E_n s'expriment en fonction de la *constante de Rydberg*³⁴ R_∞

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (1.35)$$

sous la forme

$$E_n = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad (1.36)$$

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

$$\hbar\omega_{nm} = -R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad n > m \quad (1.37)$$

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

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

$$\int p_i dq_i = nh \quad (1.38)$$

où q_i et p_i sont les coordonnées et les moments conjugués au sens de la mécanique classique et n un entier ≥ 1 . Cependant on sait aujourd'hui que les conditions (1.38) ne sont valables que pour certains systèmes très particuliers et pour n grand, sauf exception. La théorie de Bohr-Sommerfeld est incapable de décrire les atomes à plusieurs électrons, ainsi que les états de diffusion. Le succès de la théorie de Bohr pour l'atome d'hydrogène est un hasard heureux !

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

1.5.3 Ordres de grandeur en physique atomique

Les unités MKS, adaptées au monde à notre échelle, sont malcommodes en physique atomique. *A priori* doivent intervenir les constantes fondamentales $\hbar$ et c , ainsi que la masse m_e de l'électron ; le proton peut être considéré comme infiniment lourd, ou mieux la masse de l'électron peut être remplacée par la masse réduite (*cf.* note 34). Rappelons la valeur de ces constantes, avec une précision de $\sim 10^{-3}$ qui nous suffira pour les applications numériques

$$\begin{aligned}\hbar &= 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s} \\ c &= 3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1} \\ m_e &= 0.911 \times 10^{-30} \text{ kg}\end{aligned}$$

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

- Unité de longueur³⁵ : $\frac{\hbar}{m_e c} = 3.86 \times 10^{-13} \text{ m}$
- Unité de temps : $\frac{\hbar}{m_e c^2} = 1.29 \times 10^{-21} \text{ s}$
- Unité d'énergie : $m_e c^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV}$

Ces unités sont déjà plus proches que les unités MKS des ordres de grandeur caractéristiques de la physique atomique, mais il manque encore quelques ordres de grandeur. En fait, on doit faire intervenir une quantité mesurant l'intensité de la force, la constante de couplage $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$. À partir de $\hbar$, c et e^2 , on forme une quantité sans dimension, la *constante de structure fine*³⁶ α

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (1.39)$$

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

36. Cette terminologie est utilisée pour des raisons historiques et prête à confusion ; il vaudrait bien mieux utiliser « constante atomique ». α est la *constante de couplage de l'électrodynamique* ; « constante » est à mettre entre guillemets, car α n'est pas vraiment une constante, en raison de propriétés subtiles de la théorie quantique des champs. Les fluctuations quantiques du champ électron-positron ont un effet d'écran sur la charge : en raison des paires (virtuelles) électron-positron, la charge d'une particule testée à grande distance est plus petite que la même charge testée à courte distance. D'après l'inégalité de Heisenberg (1.30), courte distance implique grande impulsion, et donc grande énergie : pour explorer à courte distance, il faut utiliser des particules de haute énergie. On peut donc conclure que la constante de structure fine est une fonction croissante de l'énergie, et de fait, si l'on se place à des échelles d'énergie de l'ordre de l'énergie au repos du boson Z^0 , $m_{Z^0} c^2 \simeq 90 \text{ GeV}$, alors $\alpha \simeq 1/129$, au lieu de la valeur de basse énergie $\alpha \simeq 1/137$. La procédure de renormalisation, qui élimine les infinis, permet de choisir une échelle d'énergie (ou de distance) arbitraire pour définir α . En résumé, α dépend de l'échelle d'énergie caractéristique du processus étudié, et aussi du détail de la procédure de renormalisation (*cf.* note 13). Cette dépendance en énergie de α est visible depuis quelques années dans les expériences de précision de la physique des hautes énergies. Voir aussi l'exercice 14.5.3.

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

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar}{m_e c} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} \simeq 0.53 \text{ \AA} \quad (1.40)$$

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

$$R_\infty = \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 m_e c^2 = \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (1.41)$$

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

$$T = \frac{2\pi a_0}{v} = 2\pi \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} \frac{1}{\alpha c} = \frac{2\pi}{\alpha^2} \frac{\hbar}{m_e c^2} \simeq 1.5 \times 10^{-16} \text{ s} \quad (1.42)$$

Les équations (1.40–1.42) montrent qu'unités naturelles et unités atomiques sont reliées par des puissances de α .

Comme dernier exemple, donnons une estimation de la vie moyenne d'un électron dans un état excité. Nous allons utiliser une image classique, en admettant que cet électron tourne sur une orbite de rayon³⁷ a , image que nous allons corriger en la complétant judicieusement le moment venu par des considérations quantiques : c'est ce que l'on appelle un *raisonnement semi-classique*. Un calcul d'électromagnétisme classique montre qu'un électron sur une orbite circulaire parcourue avec une vitesse $v = \omega a \ll c$ rayonne une puissance

$$P = \frac{2}{3c^3} e^2 a^2 \omega^4 = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{a^2 \hbar \omega^4}{c^2} \sim \alpha \omega^2 \hbar \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 \quad (1.43)$$

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

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{P}{\hbar \omega} \sim \alpha \omega \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 \quad (1.44)$$

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

$$\frac{T}{\tau} \sim \frac{1}{\tau \omega} \sim \alpha^3 \sim 10^{-6} \quad (1.45)$$

37. On peut aussi assimiler l'atome à un dipôle oscillant de fréquence ω , comme dans le modèle de Thomson. La seule différence est que le facteur $2/3$ dans (1.43) devient $1/3$, ce qui est sans influence sur les ordres de grandeur.

L'orbite est parcourue environ un million de fois avant l'émission d'un photon : un état excité est donc bien défini. Pour l'état fondamental de l'atome d'hydrogène dont l'énergie est ~ 10 eV, nous avons vu que $T \sim 10^{-16}$ s ; pour l'électron externe d'un alcalin avec une énergie ~ 1 eV, nous avons plutôt $T \sim 10^{-15}$ s, et l'ordre de grandeur de la vie moyenne d'un état excité est $\sim 10^{-7} - 10^{-9}$ s. Par exemple le premier niveau excité du rubidium a une vie moyenne de 2.7×10^{-8} s.

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

1.6 Exercices

1.6.1 Ordres de grandeur

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

2. Lorsque la longueur d'onde λ d'une onde sonore est grande par rapport au pas du réseau cristallin où se propage la vibration, la fréquence ω de cette onde sonore est linéaire dans le vecteur d'onde $k = 2\pi/\lambda$: $\omega = c_s k$, où c_s est la vitesse du son (*cf.* § 11.3.1). Dans le cas de l'acier $c_s \simeq 5 \times 10^3$ m.s⁻¹. Quelle est l'énergie $\hbar\omega$ d'une onde sonore pour $k = 1$ nm⁻¹ ? La particule analogue du photon pour les ondes sonores est appelée *phonon* : voir § 11.3.1, et $\hbar\omega$ est l'énergie d'un phonon. Sachant qu'un phonon peut être créé par collision inélastique sur le cristal, doit-on utiliser des neutrons ou des photons pour étudier les phonons ?

3. Dans une expérience d'interférences avec des fullerènes C_{60} , qui sont aujourd'hui les plus gros objets avec lesquels on a vérifié le comportement ondulatoire³⁸, la vitesse moyenne des molécules est de 220 m.s⁻¹. Quelle est leur longueur d'onde de de Broglie ? Comment se compare-t-elle aux dimensions de la molécule ?

4. Une molécule diatomique est formée de deux atomes de masse M_1 et M_2 ; elle a la forme d'une haltère. Les deux noyaux atomiques sont distants de $r_0 = ba_0$, où a_0 est le rayon de Bohr (1.34) et b un coefficient numérique ~ 1 .

38. M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw et A. Zeilinger, *Nature* **401**, 680 (1999).

On suppose que la molécule tourne autour de son centre d'inertie suivant un axe perpendiculaire à la droite joignant les noyaux, appelée droite des noyaux. Montrer que son moment d'inertie est $I = \mu r_0^2$ où $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ est la masse réduite. On suppose que son moment angulaire est $\hbar$. Quelle est alors la vitesse angulaire de rotation et quelle est l'énergie ε_{rot} correspondante ? Montrer que cette énergie est proportionnelle à $(m_e / \mu) R_\infty$ où m_e est la masse de l'électron et $R_\infty = m_e e^4 / (2 \hbar^2) = e^2 / (2 a_0)$.

5. La molécule peut aussi vibrer le long de la droite des noyaux autour de sa position d'équilibre $r = r_0$, la force de rappel étant de la forme $-K(r - r_0)$, avec $K r_0^2 = c R_\infty$ où c est un coefficient numérique ~ 1 . Quelles sont la fréquence de vibration ω_v et l'énergie $\hbar \omega_v$ correspondante ? Montrer que cette énergie est proportionnelle à $\sqrt{m_e / \mu} R_\infty$. Exemple : la molécule de HCl^{35} , où les valeurs expérimentales sont $r_0 = 1.27 \text{ \AA}$, $\varepsilon_{\text{rot}} = 1.3 \times 10^{-3} \text{ eV}$, $\hbar \omega_v = 0.36 \text{ eV}$. Calculer les valeurs numériques de b et c . Quelle serait la longueur d'onde d'un photon ayant l'énergie ε_{rot} , $\hbar \omega_v$? Dans quels domaines se trouvent ces longueurs d'onde ?

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

1.6.2 Le corps noir

1. Démontrer l'équation (note 21)

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

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

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

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

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

et en déduire (1.15).

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

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

où A est un coefficient numérique.

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

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

et en déduire A .

5. Démontrer (1.22) et vérifier que l'on retrouve l'expression classique pour $\hbar\omega \ll kT$, c'est-à-dire pour une température suffisamment grande à ω fixé. Ceci est un résultat très général : *l'approximation classique est valable à haute température.*

1.6.3 Inégalités de Heisenberg

Dans l'expérience théorique de la figure 1.12, quel doit être l'ordre de grandeur de la composante Δp_x de l'impulsion communiquée à l'écran si l'on veut pouvoir distinguer entre le passage par la fente F_1 et la fente F_2 ? Que peut-on en déduire pour la position de la fente F_0 ? Montrer que les interférences sont détruites si l'on peut distinguer entre F_1 et F_2 .

1.6.4 Diffraction de neutrons par un cristal

La diffraction des neutrons est une des principales techniques d'analyse de la structure des cristaux. On considère pour simplifier un cristal bidimensionnel composé d'atomes identiques, les vecteurs d'onde étant situés dans le plan du cristal³⁹. Les atomes du cristal se trouvent aux points du réseau (figure 1.18)

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

Les neutrons interagissent avec les noyaux des atomes⁴⁰ par une interaction de type nucléaire. On appelle $f(\theta)$ l'amplitude de probabilité pour qu'un neutron d'impulsion $\hbar\vec{k}$ soit diffusé dans la direction $\hat{k}'$ par un atome situé à l'origine des coordonnées, θ étant l'angle entre $\hat{k}$ et $\hat{k}'$. Comme l'énergie

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

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

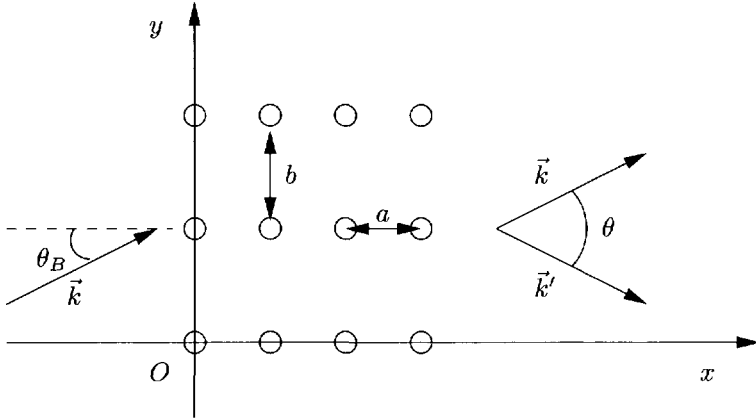


FIG. 1.18 – Diffraction de neutrons par un cristal.

des neutrons est très faible, ~ 0.01 eV, $f(\theta)$ est indépendant de θ (§ 12.2.4) : $f(\theta) = f$. La collision entre le neutron et le noyau atomique est élastique et l'état du cristal est inchangé dans la collision : il est impossible de savoir quel atome a diffusé un neutron.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

les nombres n_x et n_y étant des nombres entiers : lorsque les composantes de $\vec{q}$ sont de cette forme, on dit que $\vec{q}$ appartient au *réseau réciproque* du réseau

cristallin. On obtient des maxima de diffraction si $\vec{q}$ est un vecteur du réseau réciproque. Quelle est la largeur du pic de diffraction autour d'un maximum ? En déduire que l'intensité dans le pic est proportionnelle à NM .

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

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

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

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

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

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

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

et deux atomes de type 2 en

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

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

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

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

6. Les atomes 1 et 2 forment un alliage⁴¹: à basse température les atomes sont dans la configuration de la question 5, mais au-dessus d'une certaine température chaque atome a une probabilité de 50 % d'occuper un site quelconque et tous les sites sont équivalents. Comment va évoluer la figure de diffraction ?

1.6.5 Atomes hydrogénoïdes

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

1.6.6 Interféromètre de Mach-Zehnder

Dans un interféromètre de Mach-Zehnder (figure 1.19), le faisceau lumineux arrive sur un premier séparateur de faisceau. Les deux faisceaux ainsi obtenus sont ensuite réfléchis par deux miroirs et recombinaison par un second séparateur de faisceau. L'intensité lumineuse incidente est réduite au point où les photons arrivent un à un : plus précisément, le temps qui sépare deux photons successifs est très grand par rapport au temps de résolution des photodétecteurs D_1 et D_2 . Si un photon arrive sur un séparateur de faisceau avec une amplitude de probabilité a_0 , il sera transmis avec une amplitude ta_0 et réfléchi avec une amplitude ra_0 , où t et r sont des nombres complexes

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

et $|t| = |r| = 1/\sqrt{2}$. On peut introduire sur le bras supérieur de l'interféromètre un déphasage δ à l'aide d'une lame à faces parallèles

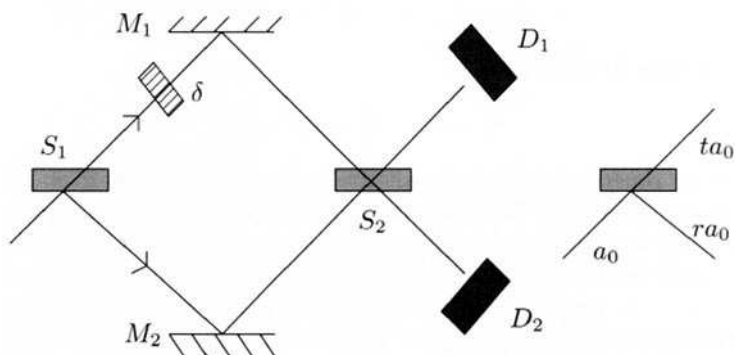


FIG. 1.19 – Interféromètre de Mach-Zehnder.

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

d'épaisseur variable. En l'absence de la lame, $\delta = \delta_0 \neq 0$ car les deux bras de l'interféromètre ne sont jamais exactement égaux. On appelle p_1 et p_2 les probabilités de détection d'un photon par D_1 et D_2 .

1. Calculer p_1 et p_2 en fonction de α , β et δ . Qu'observe-t-on en faisant varier δ ?

2. Quelle relation doit-on avoir entre p_1 et p_2 ? En déduire

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2} \pm n\pi \quad n \text{ entier}$$

1.6.7 Interféromètre à neutrons et gravité

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

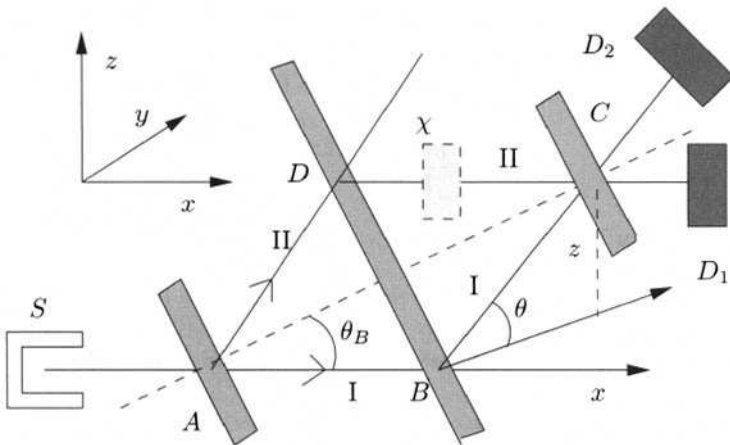


FIG. 1.20 – Interféromètre à neutrons.

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

$$a_1 = a_0(e^{i\chi} t r r + r r t)$$

et que la probabilité de détection par D_1 est

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

a_0 étant l'amplitude incidente sur le premier cristal.

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

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

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

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

montrer que

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

3. On tient compte de la gravité : comment varie en fonction de l'altitude z le vecteur d'onde $k = 2\pi/\lambda$ d'un neutron lorsqu'il est placé dans un champ de pesanteur, l'accélération de la pesanteur étant g ? Comparer les valeurs numériques de l'énergie cinétique du neutron et de son énergie gravitationnelle⁴² $m_n g z$ (m_n est la masse du neutron) et en déduire une approximation pour k . Le plan $ABDC$ étant initialement horizontal, on fait tourner autour de AB ce plan qui devient vertical. Montrer que cette rotation induit une différence de phase entre les deux trajets

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

où S est l'aire du losange $ABDC$.

4. Si le plan $ABDC$ fait un angle variable θ avec la verticale, discuter qualitativement la variation de la probabilité de détection des neutrons en fonction de θ . Données numériques⁴³ : $\lambda = 1.44 \text{ \AA}$, $S = 10.1 \text{ cm}^2$.

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

43. R. Colella, A. Overhauser et S. Werner, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1472 (1975).

1.6.8 Diffusion coh rente et diffusion incoh rente de neutrons par un cristal

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

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

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

1. On note $\langle \bullet \rangle$ la moyenne sur toutes les configurations possibles du cristal, en supposant que les occupations des sites ne sont pas corr l es (par exemple l'occupation d'un site par un noyau de type 1 ne doit pas augmenter la probabilit  qu'un site voisin soit aussi occup  par un noyau de type 1). D montrer les identit s

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

2. D duire de ces identit s la moyenne sur les configurations de $|f_{\text{tot}}|^2$

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

Le premier terme d crit la *diffusion coh rente* et donne lieu   des pics de diffraction. Le deuxi me est proportionnel au nombre de sites et est ind pendant des angles : ce terme correspond   la *diffusion incoh rente*.

1.7 Bibliographie

On trouve une introduction  l mentaire   la physique quantique dans le livre de V. Scarani, *Initiation   la physique quantique*, Vuibert (2003). Il est  galement recommand  de lire les chapitres introductifs 1   3 de Feynman *et al.* [1965], volume III, et 1   5 de Wichman [1974]. On pourra aussi consulter les chapitres 1   3 de L vy-Leblond et Balibar [1984]. Pour une introduction p dagogique et actualis e   la physique des particules  l mentaires, voir D. Perkins, *An Introduction to High Energy Physics*, 4 e  dition, Cambridge University Press, Cambridge (2000) ; voir aussi l'article grand public de M. Jacob, « Le mod le standard de la physique des particules », *Pour la Science*,

p. 58, octobre 2002. On trouvera une étude détaillée du rayonnement du corps noir par exemple dans Diu *et al.* [1990], chapitre 4 ou Le Bellac et Mortessagne [2001], chapitre 4. Les expériences d'interférences et de diffraction de neutrons froids ont été réalisées par A. Zeilinger, R. Gähler, C. Shull, W. Treimer et W. Mampe, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988), et les expériences d'interférences avec des atomes froids par F. Shimizu, K. Shimizu et H. Takuma, *Phys. Rev.* **A46**, R17 (1992). Pour la diffraction des neutrons par un cristal, on pourra se reporter à Kittel [1970], chapitre 2. Un livre récent sur l'interférométrie neutronique est celui de H. Rauch et S. Werner, *Neutron Interferometry*, Clarendon Press, Oxford (2000).

Chapitre 2

Mathématiques de la mécanique quantique I : dimension finie

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

2.1 Espaces de Hilbert de dimension finie

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

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

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

et vérifie la propriété de conjugaison complexe

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

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

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

Enfin le produit scalaire est défini positif

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Choisissant

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

on obtient

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

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

2.2 Opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$

2.2.1 Opérateurs linéaires, hermitiques, unitaires

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

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

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

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

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

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

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

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

L'élément de matrice A_{mn} est donc

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

tandis que

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Notons également la loi de transformation des éléments de matrice

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

2.2.2 Projecteurs et notation de Dirac

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

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

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

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

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

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

On remarque également que

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

On peut donc écrire⁵

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3 Décomposition spectrale des opérateurs hermitiques

2.3.1 Diagonalisation d'un opérateur hermitique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Soit a_n une valeur propre dégénérée, et soit $G(n)$ sa multiplicité dans (2.26) ; on dit aussi que a_n est $G(n)$ fois dégénérée. Il existe alors $G(n)$ vecteurs propres indépendants correspondant à cette valeur propre. Ces $G(n)$ vecteurs

propres sous-tendent un sous-espace vectoriel de dimension $G(n)$, appelé *sous-espace de la valeur propre* a_n , où l'on peut trouver une base orthonormée (non unique) $|n, r\rangle$, $r = 1, \dots, G(n)$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3.2 Diagonalisation d'une matrice 2×2 hermitique

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

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

est

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$A = aI + bU_P$$

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

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

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

où l'angle θ est défini par

$$c = \sqrt{b^2 + c^2} \cos \theta \\ b = \sqrt{b^2 + c^2} \sin \theta$$

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

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

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

2.3.3 Ensemble complet d'opérateurs compatibles

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Il est alors évident que

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

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

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

On dira alors que A et B forment un ensemble complet d'opérateurs compatibles. S'il y a encore indétermination, c'est-à-dire s'il existe plusieurs vecteurs linéairement indépendants satisfaisant (2.36), il pourra arriver que la donnée des valeurs propres d'un troisième opérateur C commutant avec A et B lève l'indétermination. Un ensemble d'opérateurs hermitiques $A_1, \dots, A_M$ commutant deux à deux et dont les valeurs propres définissent sans ambiguïté les vecteurs d'une base de $\mathcal{H}$ est appelé : ensemble complet d'opérateurs compatibles (ou ensemble complet d'opérateurs qui commutent).

2.3.4 Opérateurs unitaires et opérateurs hermitiques

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

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

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

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

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

Les opérateurs A et B sont hermitiques et $[A, B] = 0$; (2.39) généralise aux opérateurs unitaires la décomposition en partie réelle et partie imaginaire d'un nombre complexe, les opérateurs hermitiques jouant le rôle des nombres réels. On peut diagonaliser simultanément A et B , et les vecteurs propres communs

à A et B sont aussi vecteurs propres de U ; les valeurs propres de A et B sont $\cos \alpha_n$ et $\sin \alpha_n$ respectivement. L'opérateur C

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

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

$$U = \sum_n e^{i\alpha a_n} \mathcal{P}_n = e^{i\alpha A} \quad (2.40)$$

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

2.3.5 Fonctions d'un opérateur

En écrivant (2.40), nous avons introduit l'exponentielle d'un opérateur. Plus généralement il est utile de savoir construire une fonction $f(A)$ d'un opérateur. Cette construction est immédiate si l'opérateur A peut être diagonalisé : $A = XDX^{-1}$, où D est une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont d_n . Supposons la fonction f définie par un développement de Taylor convergent dans un certain domaine du plan complexe $|z| < R$

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

L'opérateur $f(A)$ sera donné par

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$f(A) = \sum_n f(a_n) \mathcal{P}_n \quad (2.43)$$

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

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

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

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

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

2.4 Exercices

2.4.1 Produit scalaire et norme

Soit une norme $\|\varphi\|$ dérivant d'un produit scalaire: $\|\varphi\|^2 = (\varphi, \varphi)$.

1. Montrer que cette norme vérifie l'inégalité triangulaire

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

ainsi que

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

2. Vérifier également

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

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

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

définit un produit scalaire. Ce produit scalaire doit vérifier

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

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

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

2.4.2 Commutateurs et traces

1. Montrer que

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

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

$$\text{Tr } A = \sum_n A_{nn} \quad (2.48)$$

Montrer que

$$\text{Tr } AB = \text{Tr } BA \quad (2.49)$$

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

3. Montrer que la trace est invariante par permutation circulaire

$$\text{Tr } ABC = \text{Tr } BCA = \text{Tr } CAB \quad (2.50)$$

2.4.3 Déterminant et trace

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

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

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

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

2. Montrer que

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

En déduire

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

ou de façon équivalente

$$\det B = e^{\text{Tr } \ln B} \quad (2.51)$$

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

2.4.4 Projecteur dans $\mathbb{R}^3$

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

$$\mathcal{P}\vec{V} = \sum_{i,j=1}^2 C_{ij}^{-1} (\vec{V} \cdot \vec{u}_i) \vec{u}_j \quad (2.52)$$

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

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

2.4.5 Théorème de la projection

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

2.4.6 Propriétés des projecteurs

1. Si $\mathcal{P}_1$ et $\mathcal{P}'_1$ sont des projecteurs sur $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}'_1$ respectivement, $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$. $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette alors sur l'intersection $\mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}'_1$.

2. $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ est un projecteur si et seulement si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = 0$. Dans ce cas $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}'_1$ sont orthogonaux et $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1$ projette sur la somme directe $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}'_1$.

3. Si $\mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1 = \mathcal{P}'_1\mathcal{P}_1$, alors $\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}'_1 - \mathcal{P}_1\mathcal{P}'_1$ projette sur l'union $\mathcal{H}_1 \cup \mathcal{H}'_1$. La propriété **2.** est un cas particulier de ce résultat.

4. Soit un opérateur Ω tel que $\Omega^\dagger\Omega$ soit un projecteur

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

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

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

2.4.7 Intégrale gaussienne

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

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

vaut

$$I(b) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det A}} \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{jk} b_j A_{jk}^{-1} b_k \right) \quad (2.53)$$

Suggestion: écrire

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

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

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

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

2.4.8 Commutateurs et valeur propre dégénérée.

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

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

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

2.4.9 Matrices normales

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

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

En écrivant

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

montrer que C est diagonalisable.

2.4.10 Matrices positives

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

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

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

2.4.11 Identités opératorielles

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

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

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

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

En déduire

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

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

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

et en déduire

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]} \quad (2.55)$$

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

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (2.56)$$

2.4.12 Diviseur de faisceau

On considère un diviseur (ou séparateur) de faisceau (miroir semi-transparent pour une onde lumineuse, cristal suivant une incidence de Bragg pour un neutron, etc.) supposé sans absorption. Des ondes arrivent avec la même incidence du côté gauche et du côté droit du séparateur de faisceau avec des amplitudes respectives A_G et A_D : figure 2.1. Les amplitudes sortantes B_G et B_D , provenant à la fois de la réflexion et de la transmission, sont reliées linéairement aux amplitudes entrantes par⁶

$$\begin{pmatrix} B_D \\ B_G \end{pmatrix} = R' \begin{pmatrix} A_D \\ A_G \end{pmatrix} \quad R' = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

1. Montrer que R' est unitaire et en déduire $\det R' = \exp(i\theta)$.

2. Comme on s'intéresse à des expériences où l'on fait interférer les ondes sortantes, un facteur de phase global n'a pas de conséquences physiques et on peut remplacer R' par $R = \exp(-i\theta/2)R'$ avec $\det R = -1$. On suppose

6. A. Zeilinger, *Am. Journ. Phys.* **49**, 882 (1981).

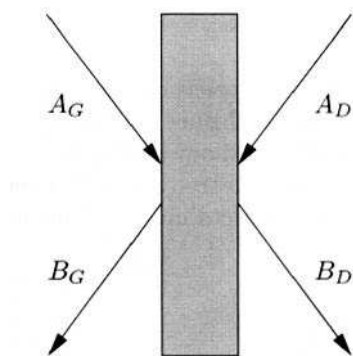


FIG. 2.1 – Diviseur de faisceau.

qu'il n'y aucune absorption par le diviseur de faisceau. En déduire la forme générale de R

$$R = \begin{pmatrix} r & t^* \\ t & -r^* \end{pmatrix} \quad |r|^2 + |t|^2 = 1$$

3. En déduire que R peut s'écrire

$$R = \begin{pmatrix} |r|e^{i\chi} & |t|e^{-i\phi} \\ |t|e^{i\phi} & -|r|e^{-i\chi} \end{pmatrix}$$

Soit δ_D la différence de phase entre l'onde réfléchie et l'onde transmise pour une onde provenant de la droite ($A_D = 1, A_G = 0$), et δ_G cette même différence de phase pour une onde provenant de la gauche ($A_D = 0, A_G = 1$). Montrer que

$$\delta_D + \delta_G = \pi \pm 2n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Ce résultat généralise celui obtenu avec l'interféromètre de Mach-Zehnder de l'exercice 1.6.5, au cas où le diviseur de faisceau n'est pas symétrique. S'il est symétrique, $\delta_D = \delta_G = \pi/2$. Quelle est la forme de R dans le cas symétrique ? Retrouver les résultats de l'exercice 1.6.5 et montrer que par un choix adéquat des phases on peut écrire dans le cas symétrique

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad R = H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

La matrice H est appelée *matrice de Hadamard* et elle est utilisée de façon intensive en calcul quantique.

2.5 Bibliographie

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

Chapitre 3

Polarisation : photon et spin $1/2$

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

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

3.1 Polarisation de la lumière et polarisation d'un photon

3.1.1 Polarisation d'une onde électromagnétique

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

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

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

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

où k est une constante de proportionnalité qu'il ne sera pas indispensable de préciser. Lorsque $\delta = 0$ ou π , la polarisation est *linéaire* : si l'on pose $E_{0x} = E_0 \cos \theta$, $E_{0y} = E_0 \sin \theta$, l'équation (3.1) pour $\delta_x = \delta_y = 0$ montre que le champ électrique vibre dans une direction $\hat{n}_\theta$ du plan xOy faisant

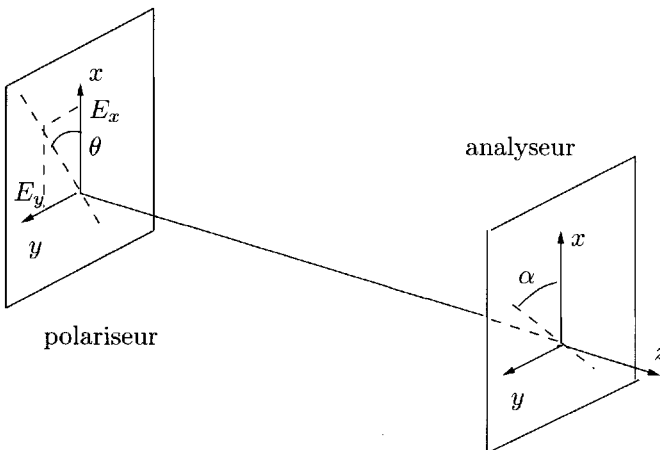


FIG. 3.1 – Ensemble polariseur-analyseur.

un angle θ avec l'axe Ox . Une telle onde lumineuse s'obtient à l'aide d'un polariseur linéaire dont l'axe est parallèle à $\hat{n}_\theta$.

Lorsque nous nous intéressons uniquement à la polarisation de cette onde lumineuse, les paramètres pertinents sont les rapports $E_{0x}/E_0 = \cos \theta$ et $E_{0y}/E_0 = \sin \theta$, où l'on peut choisir θ dans l'intervalle $[0, \pi]$; E_0 est un simple facteur de proportionnalité qui ne joue aucun rôle dans la description de la polarisation. Nous pouvons faire correspondre aux ondes polarisées linéairement suivant Ox et Oy des vecteurs unitaires orthogonaux $|x\rangle$ et $|y\rangle$ du plan xOy formant une base orthonormée de ce plan. À l'état de polarisation *linéaire* le plus général suivant $\hat{n}_\theta$ correspondra le vecteur $|\theta\rangle$ du plan xOy

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

également de norme unité

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

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

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

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

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

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

L'addition de deux états de polarisation est illustrée sur le dispositif de la figure 3.3 : les deux faisceaux sont recombinaés par une seconde lame

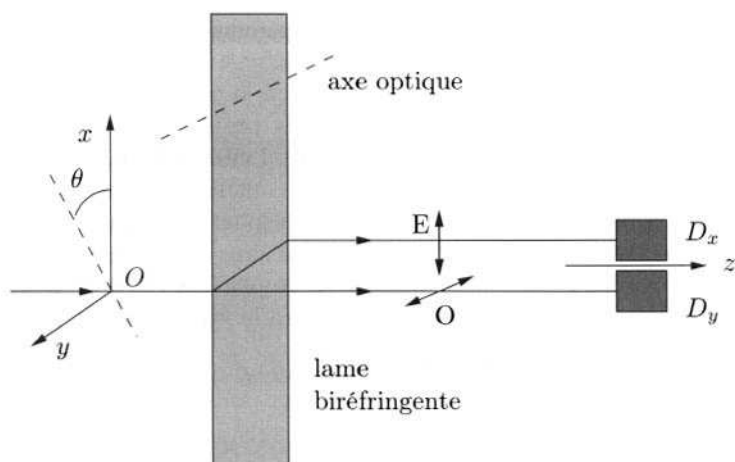


FIG. 3.2 – Décomposition de la polarisation par une lame biréfringente. Le rayon ordinaire O est polarisé horizontalement, le rayon extraordinaire E est polarisé verticalement.

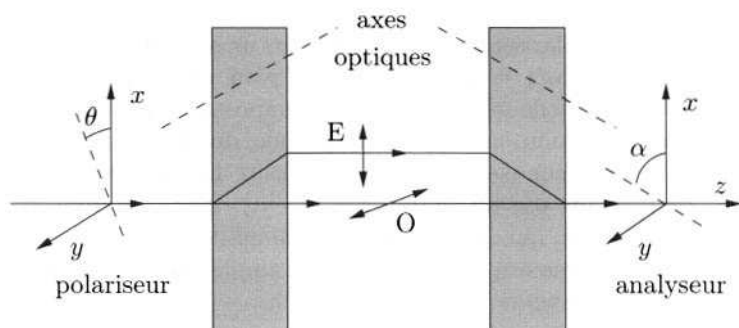


FIG. 3.3 – Décomposition et recombinaison de polarisations à l'aide de lames biréfringentes.

biréfringente symétrique de la première par rapport à un plan vertical avant de passer dans l'analyseur¹. Afin de simplifier le raisonnement, nous négligeons la différence de phase induite par la différence entre les indices ordinaire et extraordinaire dans les lames biréfringentes (ou bien nous supposons que cette différence est compensée par une lame biréfringente intermédiaire convenablement orientée : voir exercice 3.3.1). Dans ces conditions, l'onde

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

lumineuse à la sortie de la seconde lame biréfringente est polarisée suivant $\hat{n}_\theta$: la recombinaison des deux faisceaux x et y donne la lumière initiale, polarisée suivant la direction $\hat{n}_\theta$, et l'intensité à la sortie de l'analyseur est réduite comme précédemment par le facteur $\cos^2(\theta - \alpha)$.

Si nous nous limitons à des états de polarisation linéaire, nous pouvons décrire tout état de polarisation comme un vecteur unitaire réel du plan xOy , dont une base orthonormée possible est formée des vecteurs $|x\rangle$ et $|y\rangle$. Mais si nous voulons décrire une polarisation quelconque, nous devons introduire un espace complexe à deux dimensions $\mathcal{H}$. Cet espace sera *l'espace vectoriel des états de polarisation*. Revenons donc au cas général (3.1) en introduisant une notation complexe $\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y)$ pour les amplitudes ondulatoires

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

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

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

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

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

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

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

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

2. Voir la figure 10.8. Notre définition des polarisations circulaires droite et gauche est celle adoptée en physique des particules élémentaires. Avec cette définition, la polarisation circulaire droite (gauche) correspond à une hélicité positive (négative), c'est-à-dire à une

circulaire gauche : le cercle est parcouru dans le sens inverse du sens trigonométrique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

projection $+\hbar$ ($-\hbar$) du spin du photon sur sa direction de propagation. Cependant cette définition n'est pas universelle : les opticiens utilisent souvent la définition opposée, mais comme le remarque un opticien (E. Hecht, *Optics*, Addison-Wesley, New-York (1987), chapitre 8) à propos de leur choix : « This choice of terminology is admittedly a bit awkward. Yet its use in optics is fairly common, even though it is completely antithetic to the more reasonable convention adopted in elementary particle physics. »

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

Il est toujours possible de choisir λ réel (on vérifiera dans l'exercice 3.3.2 que la physique n'est pas modifiée si λ est complexe). Les nombres λ et μ peuvent alors être paramétrés par deux angles θ et η

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

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

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

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

- Le polariseur linéaire projette suivant $\hat{n}_\theta$

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

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

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

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

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

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

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

le projecteur $\mathcal{P}_\Phi$

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

est représenté par la matrice

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

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

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

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

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

où

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

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

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

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

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

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

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

est complètement arrêté par le polariseur (λ, μ) . L'état de polarisation (3.16) est en général un état de polarisation elliptique. Il est facile de déterminer les caractéristiques de l'ellipse correspondante et le sens de parcours (exercice 3.3.2).

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

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

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

3.1.2 Polarisation d'un photon

Nous allons maintenant montrer que le formalisme mathématique utilisé ci-dessus pour décrire la polarisation d'une onde lumineuse se transpose sans modification à la description de la polarisation d'un photon. Cependant, cette identité du formalisme mathématique ne doit pas masquer que *l'interprétation*

physique subit une modification radicale. Reprenons l'expérience de la figure 3.2 et diminuons l'intensité lumineuse de telle sorte que les photons puissent être enregistrés individuellement par des photomultiplicateurs D_x et D_y détectant respectivement les photons polarisés suivant Ox et ceux polarisés suivant Oy . On observe alors

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

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

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

et $\mathcal{I}_x \propto N_x = N \sin^2 \theta$, $\mathcal{I}_y \propto N_y = N \cos^2 \theta$ à la limite où $N \rightarrow \infty$. Cependant le sort *individuel* d'un photon ne peut pas être prédit : on connaît seulement sa *probabilité* de détection par D_x ou D_y . En physique quantique, le recours aux probabilités est une propriété *intrinsèque*, alors qu'en physique classique le recours aux probabilités est une façon de prendre en compte la complexité de phénomènes que nous ne pouvons pas (ou ne voulons pas) connaître dans le détail. Par exemple, dans le jeu de pile ou face, la connaissance parfaite des conditions initiales du lancer de la pièce, la prise en compte de la résistance de l'air, de la configuration du sol d'arrivée, etc. permettraient en théorie de prévoir le résultat. Quelques physiciens⁴ ont suggéré que le caractère probabiliste de la mécanique quantique avait une origine analogue : si nous avions accès à des variables supplémentaires, inconnues pour le moment, et appelées pour cette raison *variables cachées*, ou *additionnelles*, alors nous pourrions prédire avec certitude le sort individuel de chaque photon. Cette hypothèse de variables cachées est d'une certaine utilité dans les discussions des fondements de la physique quantique. Toutefois nous verrons au chapitre 6 que, moyennant des hypothèses très plausibles, de telles variables sont exclues par l'expérience.

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

4. Dont de Broglie, Bohm, etc.

carré $|a|^2$. Pour mettre en évidence le caractère incomplet de la seule donnée des probabilités, reprenons le dispositif de la figure 3.3. Entre les deux lames, un photon suit soit le trajet du rayon extraordinaire polarisé suivant Ox , étiqueté « trajet x », soit le trajet du rayon ordinaire polarisé suivant Oy , étiqueté « trajet y ». Dans un raisonnement purement probabiliste, un photon suivant le trajet x aurait une probabilité $\cos^2 \theta \cos^2 \alpha$ d'être transmis par l'analyseur, et le photon suivant le trajet y une probabilité $\sin^2 \theta \sin^2 \alpha$, ce qui donnerait une probabilité totale

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et la probabilité correspondante $\cos^2(\theta - \alpha)$, en accord avec le résultat (3.5) de l'optique classique. S'il existe une possibilité de distinguer entre les deux trajets, alors les interférences sont détruites et il faut ajouter les probabilités suivant (3.20).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

dispositif décrit à la sous-section précédente. En résumé, nous avons illustré sur un exemple concret, celui de la polarisation d'un photon, la construction de l'espace de Hilbert des états de polarisation.

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

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

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

nous pouvons seulement prédire une *probabilité* de transmission $|\langle\theta|x\rangle|^2 = \cos^2\theta$ dans le premier cas et $|\langle\theta_\perp|x\rangle|^2 = \sin^2\theta$ dans le second. La grandeur physique « polarisation du photon dans l'état $|x\rangle$ » n'a pas de valeur certaine dans la base $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$. Autrement dit, la grandeur physique polarisation est attachée à une base déterminée et les deux bases $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ et $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ sont dites *incompatibles* (sauf pour $\theta = 0$ et $\theta = \pi/2$).

La discussion précédente mérite d'être précisée sur deux points. Tout d'abord, il est clair que l'on ne peut pas tester la polarisation d'un photon *isolé*. Le test de polarisation suppose que l'on dispose d'un nombre $N \gg 1$ de photons préparés dans des conditions identiques. Supposons que l'on prépare N photons dans un certain état de polarisation et qu'on les teste en orientant un analyseur linéaire suivant Ox ; si on constate – dans la limite des imperfections du dispositif expérimental – que les photons traversent l'analyseur avec une probabilité de 100 %, on pourra en déduire que les photons ont été préparés dans l'état $|x\rangle$. L'observation d'un seul photon ne permet évidemment pas d'arriver à cette conclusion. Le second point est que si les photons sont transmis avec une probabilité $\cos^2\theta$, on ne pourra pas en déduire qu'ils ont été préparés dans l'état de polarisation linéaire (3.23). En effet on observera la même probabilité de transmission si les photons ont été

préparés dans l'état de polarisation elliptique (3.12), avec

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

Seul un test dont les résultats ont une probabilité 0 ou 1 permet de déterminer sans ambiguïté l'état de polarisation des photons.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Ce résultat suggère d'associer à la grandeur physique « polarisation circulaire » un opérateur hermitique Σ_z dont les vecteurs propres sont $|D\rangle$ et $|G\rangle$. Nous verrons au chapitre 10 que $\hbar \Sigma_z = J_z$ est l'opérateur représentant la grandeur physique composante z du moment angulaire (ou spin) du photon. Nous verrons également que $\exp(-i\theta \Sigma_z)$ est l'opérateur qui effectue des

rotations d'un angle θ autour de l'axe Oz . Un calcul simple (exercice 3.3.3) donne en effet

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

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

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

3.1.3 Cryptographie quantique

La cryptographie quantique est une invention récente fondée sur l'incompatibilité de deux bases différentes d'états de polarisation linéaire. La cryptographie usuelle repose sur une clé de chiffage connue seulement de l'expéditeur et du destinataire. Ce système est appelé à *clé secrète*. Il est en principe très sûr⁵, mais il faut que l'expéditeur et le destinataire aient le moyen de se transmettre la clé sans que celle-ci soit interceptée par un espion. Or la clé doit être changée fréquemment, car une suite de messages codés avec la même clé est susceptible de révéler des régularités permettant le déchiffrement du message par une tierce personne. Le processus de transmission d'une clé secrète est un processus à risque, et c'est pour cette raison que l'on préfère maintenant les systèmes fondés sur un principe différent, dits systèmes à *clé publique*, où la clé est diffusée publiquement, par exemple sur Internet. Un système à clé publique courant⁶ est fondé sur la difficulté de décomposer un nombre très grand N en facteurs premiers, alors que l'opération inverse est immédiate : sans calculatrice on obtiendra en quelques secondes $137 \times 53 = 7261$, mais étant donné 7261, cela prendra un certain temps à le décomposer en facteurs premiers. Avec les meilleurs algorithmes actuels, le temps de calcul sur ordinateur nécessaire pour décomposer un nombre N en facteurs premiers croît avec N comme $\exp[(\ln N)^{1/3}]$. Dans le système de chiffage à clé publique, le destinataire, appelé conventionnellement Bob, diffuse publiquement à l'expéditeur, appelé conventionnellement Alice, un nombre très grand $N = pq$ produit de deux nombres premiers p et q . Ce nombre suffit à Alice pour chiffrer le message, mais il faut disposer des nombres p et q pour le déchiffrer. Bien sûr, un espion (appelé par convention Ève) disposant d'un ordinateur suffisamment puissant finira par casser le code, mais on peut en général se contenter de conserver secret le contenu du message pendant un temps limité. Cependant, on ne peut pas exclure que l'on dispose un jour d'algorithmes très performants pour décomposer un nombre en facteurs premiers, et de plus, si des ordinateurs quantiques (§ 6.3.2) voient le jour, aucun nombre ne pourra leur résister. Heureusement la mécanique quantique vient à point nommé pour contrecarrer les efforts des espions !

5. Un chiffage absolument sûr a été découvert par Vernam en 1935. Cependant la sécurité absolue suppose que la clé soit aussi longue que le message et ne soit utilisée qu'une seule fois !

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

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

C'est ici que la mécanique quantique et le principe de superposition viennent au secours d'Alice et de Bob, en leur permettant de s'assurer que leur message n'a pas été intercepté. Ce message n'a pas besoin d'être long (le système de transmission par la polarisation est très peu performant). Il s'agira en général de transmettre une clé permettant de chiffrer un message ultérieur, clé qui pourra être remplacée à la demande. Alice envoie vers Bob quatre types de photons : polarisés suivant Ox : $\uparrow$ et Oy : $\leftrightarrow$ comme précédemment, et polarisés suivant des axes inclinés à $\pm 45^\circ$ Ox' : $\nearrow$ et Oy' : $\nwarrow$, correspondant respectivement aux valeurs 1 et 0 des bits. De même, Bob analyse les photons envoyés par Alice à l'aide d'analyseurs pouvant prendre quatre directions : verticale/horizontale et $\pm 45^\circ$. Une possibilité serait d'utiliser un cristal biréfringent orienté aléatoirement soit verticalement, soit à 45° de la verticale et de détecter les photons sortant de ce cristal comme dans la figure 3.3. Cependant, au lieu de faire tourner l'ensemble cristal+détecteurs, on utilise plutôt une cellule de Pockels, qui permet de transformer une polarisation donnée en une polarisation orientée de façon arbitraire et de maintenir fixe l'ensemble cristal+détecteur. La figure 3.4 donne un exemple : Bob enregistre 1 si le photon est polarisé $\uparrow$ ou $\nwarrow$, 0 s'il est polarisé $\leftrightarrow$ ou $\nearrow$. Après enregistrement d'un nombre suffisant de photons, Bob annonce publiquement la suite des analyseurs qu'il a utilisés, mais non ses résultats. Alice compare sa séquence de polariseurs à celle de Bob et lui donne toujours publiquement la liste des polariseurs compatibles avec ses analyseurs. Les

bits qui correspondent à des analyseurs et des polariseurs incompatibles sont rejetés (-), et, pour les bits restants, Alice et Bob sont certains que leurs valeurs sont les mêmes : ce sont les bits qui serviront à composer la clé, et ils sont connus seulement de Bob et Alice, car l'extérieur ne connaît que la liste des orientations, pas les résultats !

polariseurs d'Alice									
séquences de bits	1	0	0	1	0	0	1	1	1
analyseurs de Bob									
mesures de Bob	1	1	0	1	0	0	1	1	1
bits retenus	1	-	-	1	0	0	-	1	1

FIG. 3.4 – Cryptographie quantique : transmission de photons polarisés entre Bob et Alice.

Il reste à s'assurer que le message n'a pas été intercepté et que la clé qu'il contenait peut être utilisée sans risque. Alice et Bob choisissent au hasard un sous-ensemble de leur clé et le comparent publiquement. La conséquence de l'interception de photons par Ève serait une réduction de la corrélation entre les valeurs de leurs bits : supposons par exemple qu'Alice envoie un photon polarisé suivant Ox . Si Ève l'intercepte avec un polariseur orienté suivant Ox' , et que le photon est transmis par son analyseur, elle ne sait pas que ce photon était initialement polarisé suivant Ox ; elle renvoie donc à Bob un photon polarisé dans la direction Ox' , et dans 50 % des cas, Bob ne va pas trouver le bon résultat. Comme Ève a une chance sur deux d'orienter son analyseur dans la bonne direction, Alice et Bob vont enregistrer une différence dans 25 % des cas et en conclure que le message a été intercepté. Cette discussion est bien sûr simplifiée : elle ne tient pas compte des possibilités d'erreurs qu'il faut corriger, et d'autre part il faut réaliser des impulsions à un seul photon et non des paquets d'états cohérents qui ne seraient pas inviolables⁷. Néanmoins la méthode est correcte dans son principe et un prototype a été réalisé récemment pour des transmissions sur plusieurs kilomètres.

7. Dans le cas de transmission de photons isolés, le théorème de non-clonage quantique (§ 6.3.2) garantit qu'il est impossible à Ève de tromper Bob, même s'il lui est possible de faire moins de 50 % d'erreurs en utilisant une technique d'interception plus sophistiquée.

3.2 Spin 1/2

3.2.1 Moment angulaire et moment magnétique en physique classique

Notre second exemple de système quantique élémentaire sera celui du spin 1/2. En l'absence d'une limite ondulatoire classique comme dans le cas du photon, la partie classique sera beaucoup plus sommaire que celle de la section précédente. Considérons une particule de masse m et de charge q décrivant une orbite fermée dans un champ de forces central (figure 3.5), $\vec{r}(t)$ et $\vec{p}(t)$ désignant la position et l'impulsion de cette particule. Soit $d\vec{\mathcal{A}}$ l'aire orientée balayée par le rayon vecteur, qui vérifie

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

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

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

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

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

Le *facteur gyromagnétique* γ défini par (3.30) vaut $q/(2m)$. Le mouvement des électrons dans les atomes entraîne l'existence d'un magnétisme atomique

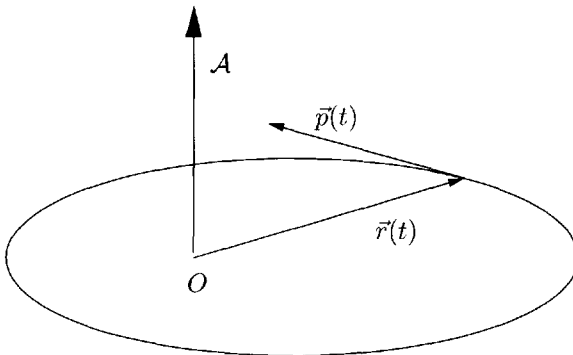


FIG. 3.5 – Facteur gyromagnétique.

et le mouvement des protons dans les noyaux atomiques celle d'un magnétisme nucléaire. Cependant le mouvement des charges ne peut expliquer quantitativement ni le magnétisme atomique ni le magnétisme nucléaire. Il faut tenir compte d'un magnétisme intrinsèque aux particules. L'expérience montre que les particules élémentaires – de spin non nul – portent un moment magnétique associé à un moment angulaire intrinsèque, appelé *spin* de la particule, que nous noterons $\vec{s}$. On peut essayer de se représenter de façon intuitive ce moment angulaire comme provenant d'une rotation de la particule sur elle-même. Cette image intuitive peut être utile, mais il ne faut pas la prendre très au sérieux : prise à la lettre, elle conduit à des contradictions insurmontables, et seule la mécanique quantique permet une description correcte du spin. L'expérience montre que l'électron, le proton et le neutron ont un spin $\frac{1}{2}\hbar$. On omet souvent le facteur $\hbar$, et on dit simplement que *l'électron, le proton et le neutron sont des particules de spin 1/2*. Le facteur gyromagnétique associé au spin est différent de (3.30). Il vaut par exemple pour l'électron⁸ et le proton

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

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

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

Le magnétisme des atomes est dû à la combinaison du mouvement des électrons (magnétisme orbital) et du magnétisme associé au spin des électrons. Le magnétisme des noyaux atomiques est dû au mouvement des protons et au magnétisme associé aux spins des neutrons et des protons. L'équation (3.30) montre que le facteur gyromagnétique est inversement proportionnel à la masse : le magnétisme d'origine nucléaire est plus faible que le magnétisme d'origine électronique par un facteur $\sim m_e/m_p \sim 1/1000$. Malgré ce facteur défavorable, le magnétisme nucléaire joue un rôle pratique considérable en étant à la base de la résonance magnétique nucléaire (RMN : exercice 4.3.5) et de ses dérivés comme l'imagerie par résonance magnétique (IRM).

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

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

Cette équation implique que $\vec{s}$ et $\vec{\mu}$ tournent autour de $\vec{B}$ avec une vitesse angulaire constante $\omega = -qB/(2m)$, appelée *fréquence de Larmor*. Il est

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

commode de donner une valeur algébrique à ω : la rotation se fait dans le sens trigonométrique pour $q < 0$ ($\omega > 0$). Le mouvement de rotation est appelé précession de Larmor (figure 3.6).

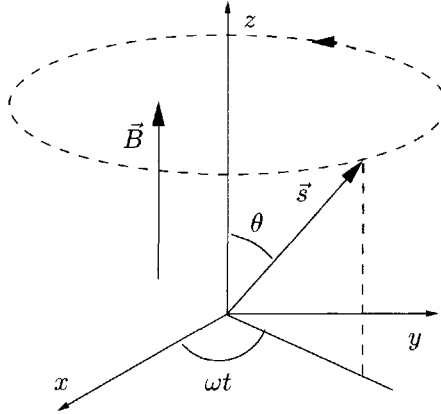


FIG. 3.6 – Précession de Larmor : le spin $\vec{s}$ précesse autour de $\vec{B}$ avec une fréquence angulaire ω .

3.2.2 Expérience de Stern-Gerlach et filtres de Stern-Gerlach

L'expérience réalisée par Stern et Gerlach en 1921 est schématisée sur la figure 3.7. Un jet d'atomes d'argent sort d'un four et est collimaté par deux fentes, avant de passer dans l'entrefer d'un aimant où règne un champ magnétique dirigé suivant⁹ Oz . Le champ magnétique n'est pas homogène : B_z est une fonction de z . L'atome d'argent porte un moment magnétique qui est en fait le moment magnétique de son électron de valence. Du point de vue des forces magnétiques, tout se passe comme si un électron traversait l'entrefer de l'aimant. Cependant on doit utiliser dans la dynamique la masse de l'atome et non celle de l'électron et noter l'absence de force de Lorentz, l'atome d'argent étant électriquement neutre. L'énergie potentielle U d'un moment magnétique dans $\vec{B}$ est $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, et la force correspondante

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U \quad F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (3.32)$$

En réalité $\vec{B}$ ne peut pas être strictement parallèle à Oz : si $\vec{B} = (0, 0, B)$, $\partial B / \partial z \neq 0$ est incompatible avec l'équation de Maxwell $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$. Une

9. Le lecteur prendra garde au fait que l'orientation des axes est différente de celle de la section précédente : la direction de propagation est maintenant Oy . Ce nouveau choix est dicté par le souhait de respecter les conventions usuelles.

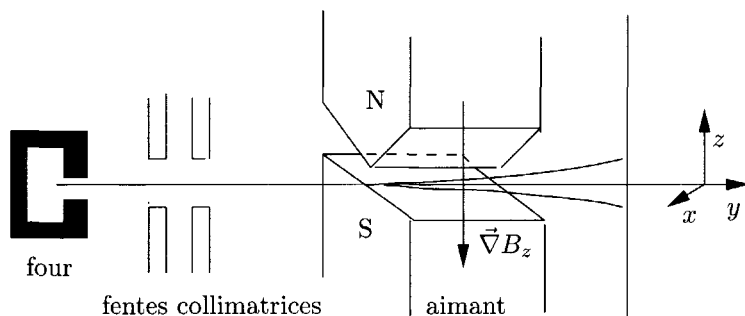


FIG. 3.7 – Expérience de Stern-Gerlach.

justification complète de (3.32) se trouve dans l'exercice 9.7.13, où l'on montre que la force effective sur l'atome est bien donnée par (3.32). Lorsque le champ magnétique est nul, les atomes arrivent au voisinage d'un point de l'écran et forment une tache de dimension finie en raison de la dispersion des vitesses, car la collimation n'est pas parfaite. L'orientation des moments magnétiques à la sortie du four est *a priori* aléatoire, et en présence du champ magnétique, on s'attendrait à un élargissement de la tache : les atomes dont le moment magnétique $\vec{\mu}$ est antiparallèle à Oz , subissent une déviation maximale vers le haut pour $(\partial B_z / \partial z) < 0$, ceux dont $\vec{\mu}$ est parallèle à Oz une déviation maximale vers le bas, toutes les déviations intermédiaires étant possibles. En fait on observe expérimentalement deux taches symétriques par rapport au point d'arrivée en l'absence de champ magnétique. Tout se passe comme si μ_z , et donc s_z , ne pouvait prendre que deux valeurs, et deux seulement, dont on constate¹⁰ qu'elles correspondent à $s_z = \pm \hbar/2$: s_z est *quantifié*. On remarquera que comme le facteur gyromagnétique est négatif ($\gamma < 0$), la déviation vers le haut (resp. bas) correspond à $s_z > 0$ (resp. < 0). L'appareil de Stern-Gerlach agit comme la lame biréfringente de la figure 3.2 : à la sortie de l'appareil, l'électron suit une trajectoire¹¹ où son spin est orienté soit vers le haut : $s_z = +\hbar/2$, soit vers le bas : $s_z = -\hbar/2$. L'analogie avec la polarisation des photons nous suggère de prendre comme espace des états de spin 1/2 un espace vectoriel à deux dimensions, ce qui s'avérera être le bon choix. Une base possible de cet espace est formée des deux vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$, décrivant les états physiques obtenus en sélectionnant les atomes déviés vers le haut ou vers le bas par l'appareil de Stern-Gerlach, et correspondant respectivement aux valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$ de s_z . Les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont souvent appelés

10. La connaissance de $\partial B_z / \partial z$ et de γ permet en principe de remonter à la valeur de s_z à partir de la déviation : exercice 9.7.13.

11. On peut montrer (exercice 9.7.13) que les trajectoires peuvent être traitées classiquement.

« spin up » et « spin down ». Ces états de spin sont l'analogie de deux états de polarisation orthogonale $|\Phi\rangle$ et $|\Phi_\perp\rangle$ dans le cas des photons¹².

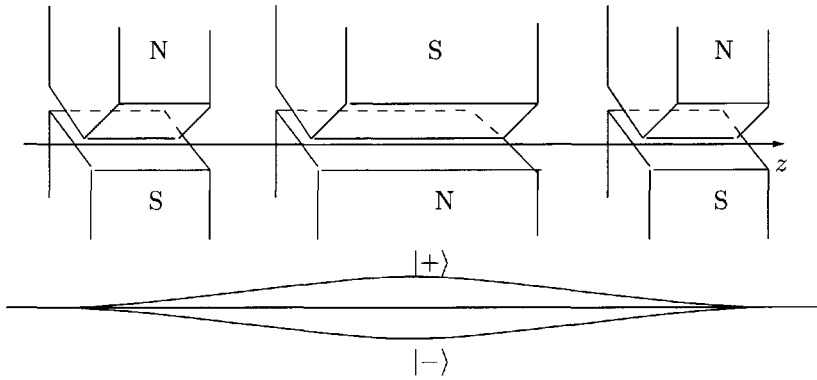


FIG. 3.8 – Filtre de Stern-Gerlach.

Le dispositif schématisé sur la figure 3.8 permet de recombinaison les atomes déviés vers le haut ou vers le bas sur une trajectoire unique, de même que la combinaison de deux lames biréfringentes de la figure 3.3 permettait de recombinaison les trajectoires des photons polarisés suivant Ox et suivant Oy . Ce dispositif, que nous appellerons « filtre de Stern-Gerlach » n'a pas été réalisé expérimentalement par Stern et Gerlach. Il a été imaginé quarante ans plus tard par Wigner afin de permettre une discussion théorique simple. Si l'on place deux filtres de Stern-Gerlach à la suite l'un de l'autre avec la même orientation de $\vec{B}$ en bloquant par exemple les deux voies du bas (figure 3.9a), on constate que 100 % des atomes qui passent le premier filtre sont aussi transmis par le second, de même qu'un photon sélectionné par un polariseur orienté suivant Ox est transmis avec une probabilité de 100 % par un analyseur de même orientation. Si au contraire la voie du bas est bloquée sur le premier filtre et la voie du haut sur le second (figure 3.8b), alors aucun atome n'est transmis, de même qu'aucun photon n'est transmis si l'analyseur et le polariseur sont croisés. Comme dans la section précédente, on rend compte de ces résultats en écrivant les amplitudes de probabilité $a(+ \rightarrow +)$ et $a(+ \rightarrow -)$ comme des produits scalaires de vecteurs de base¹³

$$a(+ \rightarrow +) = \langle +|+ \rangle = 1 \quad a(- \rightarrow -) = \langle -|- \rangle = 1 \quad a(+ \rightarrow -) = \langle -|+ \rangle = 0 \quad (3.33)$$

12. Toutefois il ne faut pas pousser trop loin cette analogie ; comme nous le verrons au chapitre 10, le photon a un spin $\hbar$, et non $\hbar/2$. Un spin $\hbar$ a normalement trois états de polarisation possibles. Il y en a seulement deux dans le cas du photon parce que le photon a une masse nulle.

13. En toute rigueur, on sait seulement que $|a(+ \rightarrow +)| = |a(- \rightarrow -)| = 1$, mais un choix de phase convenable permet toujours de se ramener à (3.33).

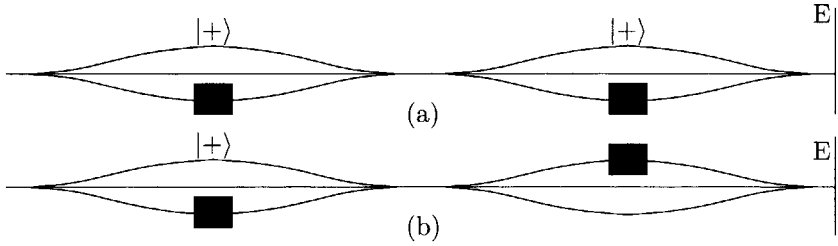


FIG. 3.9 – Filtres de Stern-Gerlach en série.

Si l'on représente les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sous la forme de vecteurs colonnes

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

le vecteur d'état (unitaire) le plus général $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$ s'écrit

$$|\chi\rangle = \lambda|+\rangle + \mu|-\rangle \quad \text{ou} \quad |\chi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

Avec les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ on peut construire un opérateur hermitique S_z tel que ces vecteurs soient vecteurs propres de S_z avec les valeurs propres $\pm\hbar/2$

$$S_z = \frac{1}{2} \hbar (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) = \frac{1}{2} \hbar (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

où $\mathcal{P}_+$ et $\mathcal{P}_-$ sont les projecteurs sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. À la grandeur physique S_z , composante suivant z du spin, on associe un opérateur hermitique S_z agissant dans l'espace des états $\mathcal{H}$. Les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont aussi appelés *états propres de S_z* , et forment la base où S_z est diagonal : dans cette base, S_z est représenté par la matrice diagonale (3.36). La grandeur physique composante suivant z du spin a une valeur bien déterminée $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ si le vecteur d'état $|\chi\rangle$ est égal à $|+\rangle$ ou $|-\rangle$.

3.2.3 États de spin d'orientation arbitraire

Poursuivons l'analogie avec la polarisation d'un photon en faisant tourner la direction du champ magnétique du filtre de Stern-Gerlach et en l'alignant dans la direction $\hat{n}$: seule la composante $B_{\hat{n}} = \vec{B} \cdot \hat{n}$ du champ magnétique est non nulle. Avec cette nouvelle orientation, le filtre de Stern-Gerlach va fabriquer des états que nous noterons $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$, obtenus en sélectionnant les atomes déviés respectivement dans le sens de $\hat{n}$ et dans la direction opposée¹⁴. Par analogie avec le cas des photons, nous dirons que le spin $1/2$

14. Ceci suppose que l'on sache changer la direction de propagation des électrons pour la rendre orthogonale à $\hat{n}$. Comme nous discutons une « expérience théorique », nous ne nous attarderons pas sur les moyens qui pourraient être utilisés pour ce faire.

est *polarisé* dans la direction $+\hat{n}$ ou $-\hat{n}$. Nous procédons comme pour l'étude de la polarisation d'un photon, en utilisant un premier filtre de Stern-Gerlach, jouant le rôle de polariseur, dont le champ magnétique orienté suivant Oz sélectionne les spins dans l'état $|+\rangle$. Le deuxième filtre a son champ magnétique orienté dans la direction $\hat{n}$ et joue le rôle d'analyseur. Il permet de mesurer expérimentalement les probabilités $p(+ \rightarrow [+, \hat{n}]) = |\langle +, \hat{n} | + \rangle|^2$ et $p(+ \rightarrow [-, \hat{n}]) = |\langle -, \hat{n} | + \rangle|^2$; comme dans la section précédente, nous supposons que ces probabilités sont données par le module carré de produits scalaires. De même que les états¹⁵ $|+\rangle$ et $|-\rangle$, les états $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ sont orthogonaux : $\langle +, \hat{n} | -, \hat{n} \rangle = 0$. Si le polariseur et l'analyseur sont orientés dans la même direction, un état préparé par le polariseur est transmis à 100 % par l'analyseur, et à 0 % si leurs orientations sont opposées¹⁶ : le résultat du test de la polarisation est certain. Si les directions ne sont pas les mêmes, on observe seulement une certaine probabilité de transmission. De même que les bases d'états de polarisation d'un photon $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ et $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ étaient incompatibles (§ 3.1.2), les bases $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ et $\{|+, \hat{n}\rangle, |-, \hat{n}\rangle\}$ sont incompatibles pour les états de spin 1/2.

Nous allons maintenant utiliser l'invariance par rotation pour déterminer les probabilités de transmission : la physique de ce problème ne doit pas dépendre de l'orientation du système d'axes. La première conséquence de cette invariance est que la direction Oz n'a aucune raison d'être privilégiée, et qu'il doit exister un opérateur hermitique $S_{\hat{n}} = \vec{S} \cdot \hat{n}$, projection du spin sur l'axe $\hat{n}$, ayant des valeurs propres $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ et la forme (3.36) dans une base $\{|+, \hat{n}\rangle, |-, \hat{n}\rangle\}$ qui reste à déterminer. L'opérateur $S_{\hat{n}}$ s'écrira en fonction de ses valeurs propres et de ses vecteurs propres

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar (|+, \hat{n}\rangle \langle +, \hat{n}| - |-, \hat{n}\rangle \langle -, \hat{n}|) \quad (3.37)$$

Introduisons la notion de *valeur moyenne* de la composante suivant $\hat{n}$ du spin, que nous noterons $\langle S_{\hat{n}} \rangle$. Comme la déviation dans la direction $\pm \hat{n}$ correspond à une valeur $s_{\hat{n}} = \pm \hbar/2$ lorsque le spin est dans un état $|\chi\rangle$ arbitraire, cette valeur moyenne, notée $\langle S_{\hat{n}} \rangle$, sera donnée par

$$\begin{aligned} \langle S_{\hat{n}} \rangle &= \frac{1}{2} \hbar (p(\chi \rightarrow [+, \hat{n}]) - p(\chi \rightarrow [-, \hat{n}])) \\ &= \frac{1}{2} \hbar (\langle \chi | +, \hat{n} \rangle \langle +, \hat{n} | \chi \rangle - \langle \chi | -, \hat{n} \rangle \langle -, \hat{n} | \chi \rangle) \\ &= \langle \chi | \frac{1}{2} \hbar (|+, \hat{n}\rangle \langle +, \hat{n}| - |-, \hat{n}\rangle \langle -, \hat{n}|) | \chi \rangle \\ &= \langle \chi | S_{\hat{n}} | \chi \rangle \end{aligned} \quad (3.38)$$

La matrice représentative de $S_{\hat{n}}$ dans la base (3.34) où S_z est diagonal est *a priori* donnée par la matrice hermitique 2×2 la plus générale de valeurs

15. Les notations $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont donc des notations abrégées pour $|+, \hat{z}\rangle$ et $|-, \hat{z}\rangle$.

16. Et non orthogonales comme dans le cas des photons !

propres $\pm \hbar/2$

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar A \quad (3.39)$$

où a et c sont des nombres réels. L'équation aux valeurs propres $\lambda_{\pm}$ de la matrice A s'écrit

$$\lambda^2 - (a + c)\lambda + ac - |b|^2 = 0$$

On doit avoir $\lambda_+ + \lambda_- = 0$ et $\lambda_+ \lambda_- = -1$ soit

$$a + c = 0 \quad ac - |b|^2 = -1 \Rightarrow a^2 + |b|^2 = 1$$

Paramétrons a et b à l'aide de deux angles α et β : $a = \cos \beta$ et $b = \exp(-i\alpha) \sin \beta$. Nous obtenons pour $S_{\hat{n}}$

$$S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \cos \beta & e^{-i\alpha} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta & -\cos \beta \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

dont les vecteurs propres sont à un facteur de phase près (cf. (2.35))

$$|+, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \sin \beta/2 \end{pmatrix} \quad |-, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2} \sin \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

3.2.4 Rotation d'un spin 1/2

Il nous reste à trouver une interprétation géométrique aux angles α et β . Nous allons faire l'hypothèse que la valeur moyenne $\langle \vec{S} \rangle$, dont les composantes sont $(\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle)$, se transforme par rotation comme un vecteur de l'espace à trois dimensions, c'est-à-dire comme l'objet classique $\vec{s}$ correspondant. Reprenons l'expérience type polariseur/analyseur. Dans un premier temps, le champ magnétique du polariseur est orienté suivant Oz , et de même pour l'analyseur. Nous savons que dans ce cas 100 % des spins traversent l'analyseur. Si le champ de l'analyseur est orienté antiparallèlement à Oz , alors aucun spin ne le traverse. Nous pouvons exprimer ce résultat sous la forme suivante : à la sortie du polariseur, la valeur moyenne de S_z , $\langle S_z \rangle$ est égale à $\hbar/2$. Orientons maintenant le champ magnétique de l'analyseur suivant Ox : on constate expérimentalement que les spins ont alors une chance sur deux d'être déviés vers les x positifs et une chance sur deux d'être déviés vers les x négatifs, ce qui correspond à une valeur moyenne nulle de S_x : $\langle S_x \rangle = 0$. Ce résultat ne doit pas surprendre. Un premier argument fait appel à un raisonnement classique : un spin classique parallèle à Oz n'est pas dévié par un gradient de champ suivant Ox . Un deuxième argument plus général fait appel à l'invariance par rotation¹⁷ : dans notre problème, les variables de spin sont découplées des variables spatiales liées à la propagation de l'atome et, pour les rotations du spin, le problème est invariant par rotation autour de Oz : en l'absence de direction privilégiée dans le plan xOy , $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$. Le vecteur $\langle \vec{S} \rangle$ a donc pour composantes $(0, 0, \hbar/2)$.

17. On peut aussi invoquer l'invariance par parité sans faire appel au découplage des variables de spin et des variables spatiales : voir exercice 9.7.13.

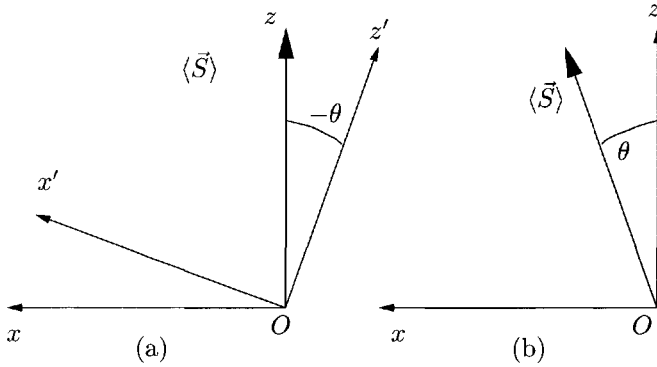


FIG. 3.10 – (a) $\langle \vec{S} \rangle$ dans deux systèmes d'axes. (b) Rotation de $\langle \vec{S} \rangle$ (b).

Supposons maintenant que l'expérimentateur décide d'utiliser un système d'axes $x'Oz'$ obtenu à partir de xOz par une rotation d'angle $-\theta$ autour de Oy (figure 3.10a). Si $\langle \vec{S} \rangle$ est un vecteur, ses composantes dans le nouveau système d'axes seront $\hbar/2(\sin \theta, 0, \cos \theta)$. On obtient une situation physique équivalente¹⁸ en conservant le système d'axes original et en orientant le gradient du champ magnétique du polariseur suivant une direction faisant un angle θ avec Oz (figure 3.10b). Le polariseur prépare alors les spins dans un état que nous noterons $|+, \hat{n}_\theta\rangle$. On a donc pour les valeurs moyennes

$$\langle S_x \rangle = \langle +, \hat{n}_\theta | S_x | +, \hat{n}_\theta \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \quad \langle S_z \rangle = \langle +, \hat{n}_\theta | S_z | +, \hat{n}_\theta \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (3.42)$$

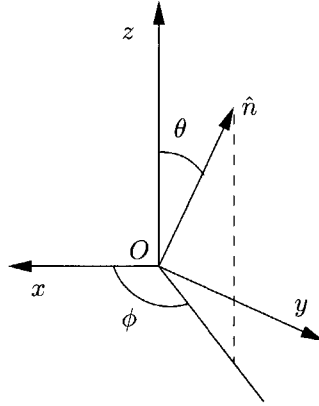
En général, on pourra orienter le champ magnétique $\vec{B}$ du polariseur suivant une direction quelconque $\hat{n}$: le polariseur prépare les spins dans l'état $|+, \hat{n}\rangle$. Soit θ et ϕ les angles polaire et azimutal définissant la direction de $\hat{n}$ (figure 3.11). La généralisation immédiate de l'argument précédent montre que les valeurs moyennes de $\vec{S}$ sont alors

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_x | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \phi = \frac{\hbar}{2} n_x \\ \langle S_y \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_y | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \phi = \frac{\hbar}{2} n_y \\ \langle S_z \rangle &= \langle +, \hat{n} | S_z | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta = \frac{\hbar}{2} n_z \end{aligned} \quad (3.43)$$

ou bien, en notation vectorielle

$$\langle \vec{S} \rangle = \langle +, \hat{n} | \vec{S} | +, \hat{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} \hat{n} \quad (3.44)$$

18. Nous verrons au § 8.1.1 que ceci consiste à passer du point de vue passif au point de vue actif pour une opération de symétrie.

FIG. 3.11 – Orientation de $\hat{n}$.

Nous avons détaillé le raisonnement menant à (3.44), mais nous aurions pu arriver directement au résultat en remarquant que le seul vecteur à notre disposition est $\hat{n}$, et $\langle \vec{S} \rangle$ est nécessairement parallèle à $\hat{n}$. Calculons maintenant les valeurs moyennes compte tenu de (3.41)

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \beta/2 - \sin^2 \beta/2) = \frac{\hbar}{2} \cos \beta$$

On doit donc avoir $\beta = \pm\theta$. Choisissons la solution $\beta = \theta$ et calculons les matrices représentatives de S_x et S_y dans la base (3.34) ; comme $\theta = \beta = \pi/2$ dans les deux cas, (3.40) devient

$$S_x = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_x} \\ e^{i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_y} \\ e^{i\alpha_y} & 0 \end{pmatrix}$$

Ceci donne pour les valeurs moyennes

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{2} \hbar \sin \theta \cos(\alpha - \alpha_x) \quad \langle S_y \rangle = \frac{1}{2} \hbar \sin \theta \cos(\alpha - \alpha_y)$$

On obtient par identification avec (3.43)

$$\cos(\alpha - \alpha_x) = \cos \phi \quad \cos(\alpha - \alpha_y) = \sin \phi \quad (3.45)$$

La solution de (3.45) n'est pas unique¹⁹; nous choisirons par convention

$$\alpha_x = 0 \quad \alpha_y = \pi/2$$

Avec ce choix $\alpha = \phi$ et les opérateurs S_x , S_y et S_z dans la base (3.34) prennent la forme

$$S_x = \frac{1}{2} \hbar \sigma_x \quad S_y = \frac{1}{2} \hbar \sigma_y \quad S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \quad (3.46)$$

19. Les autres solutions correspondent à un système d'axes obtenu par rotation autour de Oz des axes Ox et Oy ou à un système d'axes obtenu par inversion de Oy : cf. exercice 3.3.4.

Les matrices σ_x , σ_y et σ_z sont appelées *matrices de Pauli*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Ces matrices vérifient des relations importantes souvent utilisées

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \quad \text{et permutations} \quad (3.48)$$

que l'on peut rassembler en

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.49)$$

où les indices (i, j, k) prennent les valeurs (x, y, z) et ε_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique, égal à +1 si (ijk) est une permutation paire de (xyz) , à -1 dans le cas d'une permutation impaire et à zéro dans tous les autres cas²⁰. Une forme équivalente de (3.49) est la suivante : si $\vec{a}$ et $\vec{b}$ sont deux vecteurs

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \quad (3.50)$$

où l'on a utilisé pour le produit vectoriel

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \sum_k \varepsilon_{ijk} a_j b_k \quad (3.51)$$

L'équation (3.49) implique aussi les relations de commutation²¹

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.52)$$

ou, de façon équivalente pour les composantes du spin

$$[S_i, S_j] = i \hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k \quad (3.53)$$

Les matrices de Pauli forment avec la matrice identité I une base pour l'espace vectoriel des matrices sur $\mathcal{H}$. En effet toute matrice 2×2 peut s'écrire

$$A = \lambda_0 I + \sum_i \lambda_i \sigma_i \quad (3.54)$$

où les coefficients λ_0 et λ_i sont réels pour une matrice hermitique $A = A^\dagger$; ils sont donnés par (exercice 3.3.5)

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \text{Tr } A \quad \lambda_i = \frac{1}{2} \text{Tr } A \sigma_i \quad (3.55)$$

20. Par exemple $\varepsilon_{yxx} = 1$, $\varepsilon_{yxz} = -1$ et $\varepsilon_{xxz} = 0$.

21. En écrivant les indices explicitement : $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z$ et deux autres relations obtenues par permutation circulaire des indices (x, y, z) .

Le fait que les matrices de Pauli forment une base pour les matrices sur tout espace de Hilbert à deux dimensions entraîne que ces matrices sont souvent utilisées pour des problèmes où l'espace des états est à deux dimensions, même si le problème physique n'a rien à voir avec un spin 1/2. Elles sont par exemple très utiles pour traiter un modèle standard de la physique atomique, l'atome dit « à deux niveaux » (voir § 5.2.5 et § 14.4.1).

Les vecteurs propres $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ de $S_{\hat{n}} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$ se déduisent de (3.41) avec $\beta = \theta$ et $\alpha = \varphi$

$$|+, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad |-, \hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

Les états $|+, \hat{n}\rangle$ et $|-, \hat{n}\rangle$ sont les transformés des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ par une rotation qui amène l'axe Oz sur l'axe $\hat{n}$: un choix possible, cohérent avec celui qui sera fait ultérieurement au chapitre 10, consiste à effectuer une première rotation de θ autour de Oy , suivie d'une rotation de ϕ autour de Oz . On peut écrire (3.56) sous la forme

$$\begin{aligned} |+, \hat{n}\rangle &= D_{++}^{(1/2)}(\theta, \phi)|+\rangle + D_{+-}^{(1/2)}(\theta, \phi)|-\rangle \\ |-, \hat{n}\rangle &= D_{+-}^{(1/2)}(\theta, \phi)|+\rangle + D_{--}^{(1/2)}(\theta, \phi)|-\rangle \end{aligned} \quad (3.57)$$

Cette équation définit une matrice²² $D^{(1/2)}(\theta, \phi)$, appelée *matrice de rotation* pour le spin 1/2

$$D^{(1/2)}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 & -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 & e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Cette matrice est unitaire, car elle effectue un changement de base dans $\mathcal{H}$. De plus on vérifie qu'elle est de déterminant 1, et c'est une matrice appartenant au groupe $S(U2)$: cf. exercice 8.5.2. Il est intéressant de considérer les rotations de 2π qui ramènent le système physique à sa position initiale. On remarque par exemple que $D^{1/2}(\theta = 2\pi, \phi = 0) = -I$. Dans une rotation de 2π autour de Oy , le vecteur d'état $|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle$! Mais il n'y a là aucun paradoxe : les vecteurs $|\chi\rangle$ et $-|\chi\rangle$ représentent le même état physique, et, comme il se doit, une rotation de 2π ne modifie pas l'état physique. Ce comportement du spin 1/2 est à contraster avec celui des photons : d'après (3.28), $\exp(-2i\pi\Sigma_z) = +I$, et le vecteur d'état est inchangé dans une rotation de 2π . Nous observons là une différence remarquable entre spins entiers et spins demi-entiers, sur laquelle nous reviendrons au chapitre 10.

La forme (3.56) des vecteurs propres de $S_{\hat{n}}$ permet de calculer les amplitudes de probabilité

$$\begin{aligned} a(+ \rightarrow [+ , \hat{n}]) &= \langle +, \hat{n} | + \rangle = \cos \theta/2 e^{i\phi/2} \\ a(+ \rightarrow [- , \hat{n}]) &= \langle -, \hat{n} | + \rangle = -\sin \theta/2 e^{i\phi/2} \end{aligned} \quad (3.59)$$

22. On remarque que cette matrice s'écrit en fonction de $\theta/2$, et non de θ comme dans le cas d'un photon (3.28) : le photon a un spin 1 et non 1/2 !

et les probabilités correspondantes

$$\begin{aligned} p(+ \rightarrow [+ , \hat{n}]) &= |\langle + , \hat{n} | + \rangle|^2 = \cos^2 \theta / 2 \\ p(+ \rightarrow [- , \hat{n}]) &= |\langle - , \hat{n} | + \rangle|^2 = \sin^2 \theta / 2 \end{aligned} \quad (3.60)$$

Nous avons obtenu l'essentiel des propriétés du spin 1/2, et ceci à partir des trois seules hypothèses, dont les deux premières découlent de l'invariance par rotation.

- La valeur moyenne $\langle \vec{S} \rangle$ se transforme comme un vecteur dans une rotation.
- Les valeurs propres de $\vec{S} \cdot \hat{n}$ sont indépendantes de $\hat{n}$.
- L'espace des états est de dimension deux.

Certaines de ces propriétés comme les relations de commutation (3.53) ou l'existence de matrices de rotation, vont se transposer à un moment angulaire $\vec{J}$ quelconque (chapitre 10). Toutefois d'autres propriétés sont spécifiques au spin 1/2 : par exemple c'est seulement dans ce cas que tout état de $\mathcal{H}$ peut s'écrire comme un vecteur propre de $\vec{J} \cdot \hat{n} = \vec{S} \cdot \hat{n}$.

3.2.5 Dynamique et évolution temporelle

Reprenons le problème du spin plongé dans un champ magnétique uniforme et constant $\vec{B}$, que nous supposons orienté suivant l'axe des z . Notre étude classique du § 3.2.1 avait mis en évidence le phénomène de la précession de Larmor. En physique classique, l'énergie est un nombre

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} = -\gamma s_z B = \omega s_z \quad (3.61)$$

où $\omega = -\gamma B$ est la fréquence de Larmor. En physique quantique, l'énergie devient un opérateur hermitique, que l'on appelle le *hamiltonien*, noté H , agissant dans l'espace des états. Comme cet espace est de dimension deux, le hamiltonien sera représenté par une matrice 2×2 . Nous *admettrons*²³ qu'en mécanique quantique le hamiltonien conserve formellement l'expression (3.61), à condition de remplacer la quantité classique s_z par l'opérateur S_z , la projection suivant Oz de l'opérateur de spin $\vec{S}$

$$H = \omega S_z = \frac{\omega}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

La deuxième forme de H donne sa représentation matricielle dans une base où S_z est diagonal. Les valeurs propres de H sont $+\hbar\omega/2$ et $-\hbar\omega/2$. Ce sont les deux valeurs possibles de l'énergie et les vecteurs propres correspondants sont bien sûr ceux de S_z : $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Le schéma des niveaux d'énergie est donné dans la figure 3.12 pour $\omega > 0$.

23. En dernier ressort, l'expression du hamiltonien trouve sa justification dans son accord avec l'expérience.

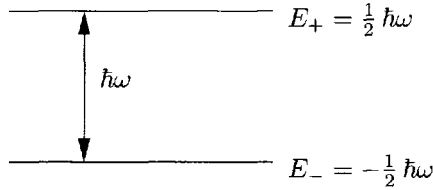


FIG. 3.12 – Spectre du hamiltonien (3.62).

Supposons qu'au temps $t = 0$ le spin se trouve dans l'état propre $|+, \hat{n}\rangle$. On peut alors se poser la question suivante : quel sera l'état de spin à un temps t ultérieur ? Pour répondre à cette question, nous avons besoin d'un postulat supplémentaire. Ce postulat, qui sera explicité avec plus de détails au chapitre suivant, stipule que le vecteur d'état $|\chi(t)\rangle$ au temps t se déduit du vecteur d'état au temps $t = 0$, $|\chi(t = 0)\rangle$, par

$$|\chi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |\chi(0)\rangle \quad (3.63)$$

Cette loi d'évolution est particulièrement simple pour les vecteurs propres de H , appelés *états stationnaires*

$$|+\rangle \rightarrow \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) |+\rangle \quad |-\rangle \rightarrow \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right) |-\rangle$$

Si $|\psi\rangle$ est un état arbitraire, la probabilité de trouver un état stationnaire dans $|\psi\rangle$ est *indépendante du temps* : par exemple

$$\left| \langle \psi | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |+\rangle \right|^2 = |\langle \psi |+\rangle|^2$$

Supposons le spin orienté au temps $t = 0$ dans la direction $\hat{n}$

$$|\chi(0)\rangle = \cos \theta/2 \exp(-i\phi/2) |+\rangle + \sin \theta/2 \exp(i\phi/2) |-\rangle$$

Ceci donnera au temps t

$$|\chi(t)\rangle = \cos \theta/2 \exp[-i(\phi + \omega t)/2] |+\rangle + \sin \theta/2 \exp[i(\phi + \omega t)/2] |-\rangle \quad (3.64)$$

Si au temps $t = 0$ le spin est orienté suivant la direction $\hat{n}$ définie par les angles θ et ϕ : $\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \hat{n}$, au temps t le spin sera orienté dans la direction $(\theta, \phi + \omega t)$: le sens de rotation est le sens trigonométrique pour $q < 0$ et coïncide bien sûr avec celui du spin classique. La valeur moyenne du spin précesse autour de $\vec{B}$ avec la fréquence de Larmor.

La loi d'évolution (3.64) va nous permettre d'introduire une relation entre la dispersion ΔE sur l'énergie et le temps caractéristique d'évolution d'un

système quantique, qui sera donnée sous la forme générale de *l'inégalité de Heisenberg temporelle* au § 4.2.4. Récrivons (3.64) en utilisant les notations c_+ et c_- pour les composantes de $|\chi(0)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$c_+ = \cos \theta/2 \exp(-i\phi/2) \quad c_- = \sin \theta/2 \exp(i\phi/2)$$

et définissons les fréquences $\omega_{\pm}$

$$\omega_+ = \frac{E_+}{\hbar} = +\frac{1}{2}\omega \quad \omega_- = \frac{E_-}{\hbar} = -\frac{1}{2}\omega$$

ce qui donne pour $|\chi(t)\rangle$

$$|\chi(t)\rangle = c_+ \exp(-i\omega_+ t)|+\rangle + c_- \exp(-i\omega_- t)|-\rangle$$

Calculons la probabilité de trouver le vecteur d'état $|\chi(t)\rangle$ dans un état $|\psi\rangle$ arbitraire

$$\begin{aligned} |\langle\psi|\chi(t)\rangle|^2 &= |c_+|^2 |\langle\psi|+\rangle|^2 + |c_-|^2 |\langle\psi|-\rangle|^2 \\ &\quad + 2\text{Re} \left[c_+^* c_- \exp[i(\omega_+ - \omega_-)t] \langle+\psi\rangle \langle\psi|-\rangle \right] \end{aligned} \quad (3.65)$$

Les deux premiers termes de (3.65) sont indépendants du temps et le troisième oscille avec une fréquence

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{E_+ - E_-}{\hbar} = \frac{\Delta E}{\hbar}$$

ΔE est la dispersion sur l'énergie : l'énergie du système n'a pas une valeur bien définie car le système passe d'un niveau à l'autre avec un temps caractéristique $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$, ce que l'on traduit par une *relation entre dispersion sur l'énergie et temps caractéristique d'évolution*

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar \quad (3.66)$$

Cette relation, que nous démontrerons sous la forme d'une inégalité par une méthode plus générale au § 4.2.4, est un exemple d'inégalité de Heisenberg temporelle.

3.3 Exercices

3.3.1 Décomposition et recombinaison de polarisations

La figure 3.3 illustre une expérience de décomposition par une lame biréfringente d'une polarisation linéaire en polarisation suivant Ox et polarisation suivant Oy , les deux polarisations correspondant à des rayons lumineux distincts. Cette décomposition est suivie d'une recombinaison de ces deux polarisations par une seconde lame qui redonne la polarisation initiale.

En fait le schéma de la figure 3.3 ne conduit pas au résultat escompté, car les indices de réfraction du rayon ordinaire et du rayon extraordinaire sont différents, ce qui induit une différence de chemin optique entre ces deux rayons. Il est nécessaire de compenser cette différence de chemin optique si l'on veut recombiner les deux polarisations. On rappelle que le rayon extraordinaire est toujours polarisé dans le plan contenant l'axe optique et le rayon ordinaire dans un plan perpendiculaire à l'axe optique. Les deux lames biréfringentes sont supposées strictement identiques, taillées dans des cristaux de calcite et d'épaisseur a .

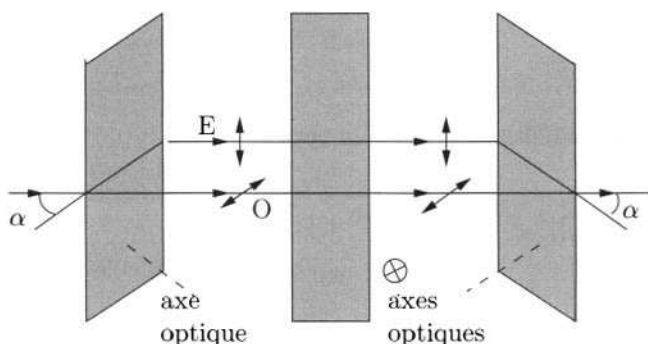


FIG. 3.13 – Compensation du déphasage par une lame intermédiaire. L'axe optique de la lame intermédiaire est perpendiculaire au plan de la figure.

1. L'angle entre la normale et le rayon extraordinaire dans la lame de calcite est $\alpha = 6.20^\circ$ (0.1082 rad). L'épaisseur de la lame est de 10 mm et les indices ordinaire et extraordinaire ont pour valeurs respectives²⁴

$$n_o = 1.65567 \quad n'_e = 1.55405$$

Le faisceau lumineux incident est fourni par un laser Helium-Néon de longueur d'onde $\lambda = 632.8 \text{ nm}$; le diamètre du faisceau est de $250 \mu\text{m}$ ²⁵. Les deux rayons sont-ils bien séparés à la sortie de la première lame ? Quelle est alors la différence de chemin optique entre le rayon ordinaire et le rayon extraordinaire ?

24. La valeur de n'_e a été calculée à l'aide de l'ellipsoïde des indices : cf. M. May et A-M Cazabat, *Optique*, Dunod, Paris (1998), chapitre 20.

25. En fait ce diamètre $w(z)$ n'est pas constant : il varie suivant une loi

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}$$

où $z_R \simeq 0.31 \text{ m}$ et w_0 est le diamètre minimal, ou col du faisceau. Si l'ensemble du dispositif a une longueur de l'ordre de 10 cm, cette variation du diamètre est sans importance si l'on place le col au centre du dispositif.

2. On veut compenser cette différence de chemin optique, ainsi que celle induite par la seconde lame en intercalant une lame intermédiaire (lame compensatrice) de calcite dont l'axe optique est perpendiculaire au plan de la figure 3.13 : dans cette lame, le rayon (x) se propage comme un rayon ordinaire et le rayon (y) comme un rayon extraordinaire avec un indice $n_e = 1.48465$. Quelle épaisseur D doit-on choisir pour cette lame intermédiaire si l'on veut compenser la différence de chemin optique de façon à pouvoir recombiner les deux polarisations à la sortie de la seconde lame ?

3. Montrer qu'une précision de 10^{-5} sur les indices est suffisante pour fixer l'épaisseur de la lame compensatrice. Comparer avec la précision requise sur ces indices si l'on essayait de procéder sans lame compensatrice en fixant l'épaisseur des lames d'entrée et de sortie de telle sorte que la différence de chemin optique induite par les deux lames soit un multiple entier de la longueur d'onde. Afin de simplifier la discussion, on négligera la différence entre n'_e et n_e dans le calcul d'erreurs.

4. Le dispositif est très sensible aux variations de température en raison de la dilatation de la calcite et de la variation des indices. Afin de simplifier la discussion, on se limitera aux effets dus aux variations des indices qui sont

$$\delta n_o = 2.1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} \quad \delta n_e = 11.9 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$$

La compensation étant supposée parfaitement réalisée pour une température T , quelle sera la différence totale de chemin optique (induite par les trois lames) si la température varie de 1 degré ? Que se passerait-il si l'on n'utilisait pas de lame compensatrice ?

5. La première lame a maintenant une épaisseur de 2 mm. Décrire la polarisation à la sortie de cette lame.

3.3.2 Polarisation elliptique

1. Déterminer les axes et le sens de parcours de l'ellipse pour un état de polarisation (3.12)

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

2. Vérifier que l'état $|\Phi_\perp\rangle$ (3.19) orthogonal à $|\Phi\rangle$

$$|\Phi_\perp\rangle = -\mu^*|x\rangle + \lambda^*|y\rangle$$

est arrêté par le polariseur linéaire du polariseur (λ, μ) .

3. Vérifier que les propriétés physiques du polariseur (λ, μ) sont inchangées si l'on utilise la paramétrisation générale avec λ et μ complexes

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

avec $\eta = \eta_y - \eta_x$. Retrouver l'expression de $\mathcal{P}_\Phi$.

3.3.3 Opérateur de rotation pour le spin du photon

Démontrer (3.28). Suggestion : développer en série $\exp(-i\theta\Sigma_z)$. Que vaut $(\Sigma_z)^2$?

3.3.4 Autres solutions de (3.45)

Dans l'espace des états de spin $1/2$, la matrice unitaire $D^{(1/2)}(\theta, \psi)$ transforme l'état $|+\rangle$ en l'état $|+, \hat{n}\rangle$ où le vecteur unitaire $\hat{n}$ est donné par $\hat{n} = (\sin\theta \cos\psi, \sin\theta \sin\psi, \cos\theta)$. Si la rotation s'effectue autour de l'axe des z , $\theta = 0$ dans (3.58) et

$$D^{(1/2)}(\theta = 0, \psi) = U = \begin{pmatrix} e^{-i\psi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\psi/2} \end{pmatrix}$$

Discuter l'action de U sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

2. L'opérateur U peut-être considéré comme un changement de base, où un opérateur A se transforme suivant (2.18) en

$$A \rightarrow A' = U^\dagger A U$$

Quels sont les opérateurs transformés de σ_x , σ_y et σ_z ?

3. Les conditions (3.45) ont pour solution soit (1) $\alpha - \alpha_x = \phi$ soit (2) $\alpha - \alpha_x = -\phi$. Montrer que dans le cas (1), σ_x et σ_y sont donnés par

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_x} \\ e^{-i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\alpha_x} \\ ie^{-i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix}$$

et que par rapport à la solution standard (3.47), cette solution correspond à une simple rotation des axes autour de Oz .

4. Montrer que si l'on choisit $\alpha - \alpha_x = -\phi$ la solution standard est

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Quelle est l'interprétation de ce résultat ?

3.3.5 Décomposition d'une matrice 2×2

1. On introduit la notation :

$$\hat{\sigma}_0 = I \quad \hat{\sigma}_i = \sigma_i, \quad i = 1, 2, 3$$

Montrer que si une matrice 2×2 A vérifie $\text{Tr}(\hat{\sigma}_i A) = 0 \quad \forall i = 0, \dots, 3$, alors $A = 0$.

2. Soit la matrice 2×2

$$A = \lambda_0 I + \sum_{i=1}^3 \lambda_i \sigma_i = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

Montrer que

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(A \hat{\sigma}_i)$$

En déduire qu'une matrice 2×2 quelconque peut toujours s'écrire

$$A = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

À quelle condition doivent obéir les coefficients λ_i lorsque A est hermitique, $A = A^\dagger$?

3.3.6 Exponentielles de matrices de Pauli

1. Montrer que

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right) = I \cos \frac{\theta}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \sin \frac{\theta}{2}$$

Suggestion : calculer $(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2$. Identifier cet opérateur avec $D^{(1/2)}(\theta, \phi = 0)$ dans (3.58).

2. Montrer que toute matrice 2×2 unitaire et de déterminant unité U peut se mettre sous la forme donnée dans la question 1. Suggestion : montrer que U est de la forme

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

et écrire $a = a_1 + ia_2$, $b = b_1 + ib_2$. Montrer que $a_1 = \cos \theta/2$.

3. Trouver deux matrices 2×2 A et B telles que

$$e^A e^B = e^{(A+B)} \quad \text{avec} \quad [A, B] \neq 0$$

3.3.7 Tenseur ε_{ijk}

1. Montrer l'identité

$$\sum_k \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmk} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$$

En déduire

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (a \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c}$$

Que vaut

$$\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ljk}?$$

2. On peut écrire la composante i du rotationnel d'un vecteur $\vec{A}$ comme

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

avec $\partial_j = \partial/\partial x_j$. Montrer à partir de l'identité de la question 1 que

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$$

3.3.8 Rotation de 2π d'un spin 1/2

On reprend l'interféromètre à neutrons de l'exercice 1.6.7, le plan $ABDC$ étant horizontal. Un déphasage variable χ est obtenu en faisant passer les neutrons du faisceau I dans un champ magnétique uniforme et constant B sur une longueur l , le champ magnétique étant perpendiculaire au plan de la figure²⁶. Les neutrons sont supposés polarisés parallèlement au plan de la figure. Déterminer l'angle de la rotation subie par le spin du neutron à la sortie du champ magnétique en fonction de l , de la vitesse v (connue) du neutron et de son facteur gyromagnétique γ_n . Montrer que les taux de comptage par les détecteurs D_1 et D_2 dépendent sinusoidalement de B . Montrer que l'on peut déduire de ces oscillations que le vecteur d'état de spin est multiplié par -1 dans une rotation de 2π .

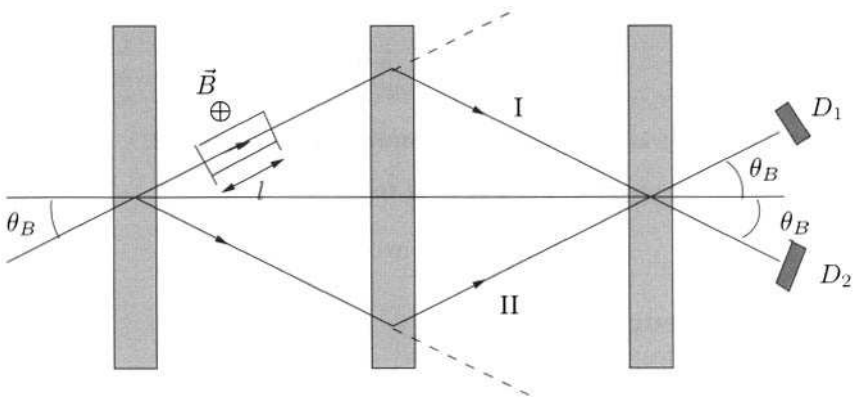


FIG. 3.14 – Mise en évidence expérimentale de la rotation de 2π d'un spin 1/2.

26. S. Werner, R. Colella, A. Overhauser et C. Eagen, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1053 (1975).

3.3.9 Diffusion de neutrons par un cristal : noyaux de spin 1/2

On reprend l'expérience décrite dans l'exercice 1.6.4 de diffraction de neutrons par un cristal en supposant que les noyaux atomiques ont un spin 1/2 (exemples : H^1 , C^{13} , F^{19} , etc.). On se limitera dans un premier temps (questions 1 et 2) au cas où les neutrons ont un spin up ($\uparrow$) et les noyaux un spin down ($\downarrow$) : les neutrons et les noyaux sont polarisés. Dans ces conditions il y a deux amplitudes de diffusion possibles car on peut montrer (chapitre 12) que la composante z du spin total est conservée dans la diffusion neutron-noyau. Ces deux amplitudes sont :

- Une amplitude f_a où la diffusion se fait sans changement de l'état de spin

$$\text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \downarrow \rightarrow \text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \downarrow$$

- Une amplitude f_b où la diffusion s'effectue avec renversement du spin (spin flip)

$$\text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \downarrow \rightarrow \text{neutron } \downarrow + \text{noyau } \uparrow$$

1. Montrer que, dans le premier cas, on retrouve les résultats de la diffusion sans spin.

2. Montrer que, dans le second cas, la diffraction disparaît et que la probabilité de diffusion est indépendante de $\vec{q}$.

3. En général les noyaux atomiques ne sont pas polarisés, c'est-à-dire qu'ils ont une chance sur deux d'avoir spin up et une chance sur deux d'avoir spin down. On doit prendre en considération une troisième amplitude f_c correspondant à la diffusion

$$\text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \uparrow \rightarrow \text{neutron } \uparrow + \text{noyau } \uparrow$$

Suivant la méthode utilisée dans l'exercice 1.6.8, introduisons un nombre α_i qui prend la valeur 0 si le noyau i a un spin up et la valeur 1 si ce noyau a un spin down. L'ensemble des $\{\alpha_i\}$ caractérise une configuration des spins dans le cristal. Montrer que l'amplitude de diffusion d'un neutron par le cristal dans la configuration $\{\alpha_i\}$ est

$$\sum_i (\alpha_i f_a + (1 - \alpha_i) f_c) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} + \sum_i \alpha_i f_b e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$

Que vaudrait l'intensité si la configuration $\{\alpha_i\}$ était fixée ? On prendra garde à additionner les probabilités pour des états finaux différents. On doit enfin prendre la moyenne sur les différentes configurations du cristal, le spin

de chaque noyau étant supposé indépendant des autres spins. Si $\langle \bullet \rangle$ désigne la moyenne sur les configurations, montrer que

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \delta_{ij}$$

En déduire que la probabilité de diffusion est proportionnelle à

$$\mathcal{I} = \frac{1}{4} (f_a + f_c)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{\mathcal{N}}{4} [(f_a - f_c)^2 + 2f_b^2]$$

où $\mathcal{N}$ est le nombre de noyaux. En réalité les trois amplitudes f_a , f_b et f_c ne sont pas indépendantes : on verra dans l'exercice 12.5.5 que

$$-f_a = \frac{1}{2} (a_t + a_s) \qquad -f_b = \frac{1}{2} (a_t - a_s) \qquad -f_c = a_t$$

où a_t et a_s sont les longueurs de diffusion dans les états triplet et singulet.

4. Que se passe-t-il si, comme c'est le cas courant en pratique, les neutrons ne sont pas polarisés ?

3.4 Bibliographie

La polarisation de la lumière et sa propagation dans les milieux anisotropes sont expliquées en détail dans M. May et A-M Cazabat, *Optique*, Dunod, Paris (1996), chapitres 19 et 20. Comme complément à la discussion de la polarisation des photons, on pourra consulter Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 4 ou G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin, Reading (1969), chapitre 1. Un article de revue récent sur la cryptographie quantique, avec de nombreuses références aux travaux antérieurs, est celui de N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel et H. Zbinden, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002) ; une version grand public de la cryptographie quantique se trouve dans C. Bennett, G. Brassard et A. Ekert, *Scientific American*, octobre 1992. L'expérience de Stern-Gerlach est discutée par Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 5, par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre IV, ou par Peres [1993], chapitre 1.

Chapitre 4

Postulats de la physique quantique

Nous allons énoncer dans ce chapitre les postulats de base de la physique quantique, en généralisant les résultats établis au chapitre précédent dans deux cas particuliers : la polarisation du photon et le spin $1/2$. Au lieu d'être de dimension deux, l'espace des états sera *a priori* de dimension quelconque N , voire de dimension infinie. Les postulats tels qu'ils sont énoncés dans ce chapitre *fixent le cadre conceptuel général de la mécanique quantique*, et ne donnent pas directement les outils nécessaires pour résoudre des problèmes spécifiques. La résolution d'un problème de physique concret suppose toujours une phase de modélisation, où l'on simplifie le système à étudier, où l'on définit un cadre d'approximations, etc., et cette phase de modélisation s'appuie inévitablement sur des considérations plus ou moins heuristiques qui ne peuvent pas se déduire du cadre général de la physique quantique¹. Le § 3.2.5 donne un exemple de démarche heuristique, conduisant à la solution d'un problème concret, celui du mouvement d'un spin $1/2$ dans un champ magnétique.

Il est possible d'utiliser d'autres ensembles de postulats : par exemple une autre approche de la mécanique quantique consiste à énoncer des postulats sur les intégrales de chemin². Comme c'est souvent le cas, une même théorie physique peut revêtir plusieurs habillages mathématiques différents. Enfin il faut souligner que les postulats de la physique quantique soulèvent des problèmes épistémologiques difficiles, qui sont encore largement débattus aujourd'hui et ne seront pas traités dans ce livre. Le lecteur intéressé est renvoyé par exemple au livre récent d'Isham [1995].

1. Cette démarche n'est pas fondamentalement différente de celle utilisée en physique classique. Par exemple les trois lois de Newton fixent le cadre conceptuel de la mécanique classique, mais la solution d'un problème concret requiert toujours une phase de modélisation : simplification du problème posé, approximations pour les forces, etc.

2. Voir par exemple L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley New-York (1981).

4.1 Vecteurs d'état et grandeurs physiques

4.1.1 Principe de superposition

Nous avons appris au chapitre 3 à caractériser l'état de polarisation d'un photon ou celui d'un spin $1/2$ par un vecteur appartenant à un espace de Hilbert complexe, l'espace des états. Le postulat **I** généralise les notions de vecteur d'état et d'espace des états à tout système quantique.

Postulat I : espace des états

Les propriétés d'un système quantique sont entièrement définies par la donnée de son *vecteur d'état* $|\varphi\rangle$, qui fixe la représentation mathématique de l'état physique du système³. Le vecteur d'état est un élément d'un espace de Hilbert complexe $\mathcal{H}$ appelé *espace des états*. Il sera commode de choisir $|\varphi\rangle$ unitaire, c'est-à-dire de norme un : $\|\varphi\|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle = 1$.

Le fait qu'un état physique soit représenté par un vecteur implique sous certaines conditions le *principe de superposition*, caractéristique de la *linéarité* de la théorie : si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont des vecteurs de $\mathcal{H}$ représentant des états physiques, alors le vecteur unitaire

$$|\psi\rangle = \frac{\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle}{\|\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle\|} \quad (4.1)$$

où λ et μ sont des nombres complexes, est un vecteur de $\mathcal{H}$ et représente aussi un état physique.

Au chapitre précédent, nous avons défini les amplitudes de probabilité comme produits scalaires de vecteurs appartenant à l'espace des états. Par exemple, si $|\varphi\rangle$ représente l'état de polarisation linéaire suivant Ox d'un photon : $|\varphi\rangle = |x\rangle$, et $|\theta\rangle$ un état de polarisation linéaire suivant $\hat{n}_\theta$ (3.3) : $|\chi\rangle = |\theta\rangle$, l'amplitude de probabilité $a(x \rightarrow \theta) = \langle\theta|x\rangle = \cos\theta$. Nous avons également montré que le module carré de cette amplitude possède une interprétation physique remarquable : si l'on teste la polarisation en faisant passer le photon $|x\rangle$ à travers un analyseur linéaire d'orientation $\hat{n}_\theta$, on obtient une probabilité de transmission

$$p(x \rightarrow \theta) = |a(x \rightarrow \theta)|^2 = |\langle\theta|x\rangle|^2 = \cos^2\theta$$

qui est la *probabilité pour le photon dans l'état $|x\rangle$ de passer le test $|\theta\rangle$* . Nous allons généraliser les notions d'amplitude de probabilité et de test en énonçant le postulat **II**.

3. Le point de vue de l'auteur est que le vecteur d'état décrit la réalité physique d'un système quantique *individuel*. Ce point de vue est loin d'être universellement partagé et le lecteur trouvera aisément d'autres interprétations, par exemple « Le vecteur d'état décrit l'information disponible sur un système quantique. » ou « Le vecteur d'état n'est pas la propriété d'un système physique individuel, mais un protocole pour préparer un ensemble de tels états. » ou encore « La mécanique quantique est un ensemble de règles permettant de calculer la probabilité d'un résultat expérimental. » Cette diversité de points de vue n'a pas de conséquences sur l'utilisation *pratique* de la mécanique quantique.

Postulat II : amplitudes de probabilité et probabilités

Si $|\varphi\rangle$ est le vecteur représentant l'état du système et si $|\chi\rangle$ représente un autre état physique, il existe une *amplitude de probabilité* $a(\varphi \rightarrow \chi)$ de trouver $|\varphi\rangle$ dans l'état $|\chi\rangle$, qui est donnée par un produit scalaire sur $\mathcal{H}$: $a(\varphi \rightarrow \chi) = \langle\chi|\varphi\rangle$. La probabilité $p(\varphi \rightarrow \chi)$ pour l'état $|\varphi\rangle$ de passer le test $|\chi\rangle$ s'obtient en prenant le module carré $|\langle\chi|\varphi\rangle|^2$ de cette amplitude⁴

$$p(\varphi \rightarrow \chi) = |a(\varphi \rightarrow \chi)|^2 = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \quad (4.2)$$

Ajoutons quelques remarques pour compléter l'énoncé des deux premiers postulats.

- Sauf mention explicite du contraire, nous supposons les vecteurs d'état de norme unité. Si ce n'est pas le cas, il faut prendre garde à diviser par les normes. Par exemple l'équation (4.2) devient

$$p(\varphi \rightarrow \chi) = \frac{|\langle\chi|\varphi\rangle|^2}{\|\chi\|^2\|\varphi\|^2}$$

- Les vecteurs $|\varphi\rangle$ et $|\varphi'\rangle = \exp(i\beta)|\varphi\rangle$ représentent le même état physique. En effet, on sait seulement mesurer des probabilités, et

$$|\langle\chi|\varphi\rangle|^2 = |\langle\chi|\varphi'\rangle|^2 \quad \forall |\chi\rangle \in \mathcal{H}$$

Il n'est donc pas possible de distinguer entre $|\varphi\rangle$ et $|\varphi'\rangle$, qui diffèrent par un *facteur de phase*. En toute rigueur, un état physique est représenté par un *rayon*, ou vecteur à un facteur de phase près, de l'espace de Hilbert. En revanche la superposition $\lambda|\varphi\rangle + \mu|\chi\rangle$ représente un état physique *différent* de $\lambda|\varphi'\rangle + \mu|\chi\rangle$!

- Nous nous limitons aux systèmes physiques qui sont appelés *cas purs*, ceux où l'information sur l'état physique est maximale. Dans le cas d'une information incomplète, on doit avoir recours au formalisme de l'opérateur densité, qui sera exposé au § 6.1.3.
- Nous avons pris bien soin de préciser « système quantique », et non « particule » (quantique), qui en est un cas particulier. En effet, nous verrons au chapitre 6 que pour un système de deux ou plusieurs particules, il est en général impossible d'attribuer un vecteur d'état individuel à chacune des particules, et c'est seulement à *l'ensemble des particules*, c'est-à-dire à l'ensemble du système quantique, que l'on peut attribuer un vecteur d'état. Ce point sera développé et illustré dans la section 6.2.

4. Afin que l'ordre des facteurs corresponde à celui du produit scalaire, il est parfois commode de noter les amplitudes de probabilité $a(\chi \leftarrow \varphi)$ et les probabilités $p(\chi \leftarrow \varphi)$. On peut aussi observer qu'à défaut d'être intuitive, l'équation (4.2) est au moins cohérente : la probabilité de trouver l'état en lui-même est un et d'après l'inégalité de Schwarz, $0 \leq |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \leq 1$.

- Il existe des restrictions au principe de superposition, appelées « règles de supersélection »⁵, que nous n'aurons pas à considérer dans ce livre.

4.1.2 Grandeurs physiques et mesure

Au chapitre 3 nous avons montré qu'à la grandeur physique « composante du spin suivant un axe $\hat{n}$ » on pouvait faire correspondre un opérateur hermitique $\vec{S} \cdot \hat{n}$ agissant dans l'espace des états. Le postulat **III** généralise ce résultat à toute grandeur physique.

Postulat III : grandeurs physiques et opérateurs

À toute grandeur physique $\mathcal{A}$ (énergie, position, impulsion, moment angulaire...) est associé un opérateur hermitique A agissant dans l'espace des états $\mathcal{H}$: A fixe la représentation mathématique de $\mathcal{A}$.

Afin de simplifier dans un premier temps la discussion qui va suivre, examinons le cas d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ représentée par un opérateur hermitique A dont les valeurs propres a_n sont non dégénérées : $A|n\rangle = a_n|n\rangle$. On peut alors écrire la décomposition spectrale

$$A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n|$$

Si le système quantique est dans un état $|\varphi\rangle \equiv |n\rangle$, la valeur de l'opérateur A dans cet état est a_n : la grandeur physique $\mathcal{A}$ prend la valeur numérique exacte a_n . Si $|\varphi\rangle$ n'est pas état (ou vecteur) propre de A , on sait d'après **II** que la probabilité $p_n \equiv p(a_n)$ de trouver $|\varphi\rangle$ dans $|n\rangle$, et donc de mesurer la valeur a_n de $\mathcal{A}$, est $p_n = |\langle n|\varphi\rangle|^2$. Pour déterminer si le système quantique est dans l'état $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$, on peut imaginer une généralisation de l'expérience de Stern-Gerlach avec N voies de sortie au lieu des deux voies $|+\rangle$ et $|-\rangle$ et un détecteur associé à chaque voie. Effectuons une série de tests sur des systèmes quantiques qui se trouvent tous dans l'état $|\varphi\rangle$. On dit que ces systèmes ont été *préparés dans l'état $|\varphi\rangle$* : nous avons déjà rencontré la notion de préparation d'un système quantique dans le cas de la polarisation des photons, et nous y reviendrons ultérieurement. Si le nombre de tests $\mathcal{N}$ est très grand, on peut en déduire expérimentalement la *valeur moyenne de*

5. Il est généralement admis que l'on ne peut pas superposer un état de spin $1/2$ $|\chi\rangle_{1/2}$ et un état de spin 1 $|\varphi\rangle_1$: cette impossibilité est un exemple de règle de supersélection. Comme nous l'avons vu au chapitre 3 (et cette observation sera généralisée au chapitre 10), le vecteur d'état d'une particule de spin $1/2$ est multiplié par -1 dans une rotation de 2π , tandis que celui d'une particule de spin 1 est multiplié par $+1$. Dans une rotation de 2π qui ramène le système à sa situation initiale, si le vecteur d'état est de la forme $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle_1 + \mu|\chi\rangle_{1/2}$, ce vecteur d'état est transformé dans une rotation de 2π en $|\psi'\rangle = \lambda|\varphi\rangle_1 - \mu|\chi\rangle_{1/2} \neq |\psi\rangle$. Le fait que $|\chi\rangle_{1/2}$ soit transformé en $-|\chi\rangle_{1/2}$ ne pose aucun problème, car les deux vecteurs ne diffèrent que par un facteur de phase. Un autre exemple est la règle de supersélection sur la masse, dans le cas de l'invariance galiléenne. Pour un point de vue critique sur les règles de supersélection, voir Weinberg [1995], chapitre 2.

la grandeur physique $\mathcal{A}$ dans l'état $|\varphi\rangle$, notée $\langle A \rangle_\varphi$

$$\langle A \rangle_\varphi = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{p=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{A}_p \quad (4.3)$$

où $\mathcal{A}_p$ est le résultat de la mesure n° p . $\mathcal{A}_p$ varie d'un test à l'autre, mais prend toujours l'une des valeurs propres a_n . Cette valeur moyenne est donnée en fonction de A et $|\varphi\rangle$ par

$$\langle A \rangle_\varphi = \sum_n \mathbf{p}_n a_n = \sum_n \langle \varphi | n \rangle a_n \langle n | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$$

Nous avons déjà rencontré un cas particulier de cette relation dans (3.38). Il n'est pas difficile de généraliser au cas des valeurs propres dégénérées. Si le système est dans un état $|\varphi\rangle$ quelconque, nous pouvons décomposer $|\varphi\rangle$ sur la base des vecteurs propres de A en utilisant la relation de fermeture (2.30)

$$|\varphi\rangle = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r | \varphi \rangle = \sum_{n,r} c_{nr} |n, r\rangle$$

Pour trouver la probabilité $\mathbf{p}(a_n)$ d'observer la valeur propre a_n , il faut maintenant sommer sur l'indice r à n fixé toutes les probabilités de trouver $|\varphi\rangle$ dans l'un quelconque des états $|n, r\rangle$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(a_n) &= \sum_r |c_{nr}|^2 = \sum_r \langle \varphi | n, r \rangle \langle n, r | \varphi \rangle \\ &= \langle \varphi | \mathcal{P}_n | \varphi \rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

où $\mathcal{P}_n$ est le projecteur sur le sous-espace de la valeur propre a_n (cf. (2.29))

$$\mathcal{P}_n = \sum_r |n, r\rangle \langle n, r| \quad (4.5)$$

Comme ci-dessus, la répétition d'un grand nombre de mesures sur des systèmes quantiques préparés dans des conditions identiques permet d'obtenir la valeur moyenne $\langle A \rangle_\varphi$ de $\mathcal{A}$ dans l'état $|\varphi\rangle$

$$\langle A \rangle_\varphi = \sum_n a_n \mathbf{p}(a_n) = \sum_{n,r} \langle \varphi | n, r \rangle a_n \langle n, r | \varphi \rangle$$

soit en utilisant (2.31)

$$\boxed{\langle A \rangle_\varphi = \langle \varphi | A | \varphi \rangle} \quad (4.6)$$

ce qui généralise le résultat précédent. Les opérateurs représentant des grandeurs physiques sont souvent appelés « observables » dans la littérature. Nous éviterons cette terminologie qui n'a pas de véritable intérêt⁶.

6. Cette terminologie remonte à l'article fondateur de Heisenberg, dont est extraite la citation suivante : « Cet article a pour objet d'établir que la théorie quantique est fondée exclusivement sur des relations entre quantités qui sont en principe observables. » Se restreindre à une telle approche est une vision étroite de la physique, que Heisenberg lui-même n'a pas respectée dans sa pratique !

L'opérateur hermitique le plus simple est le projecteur sur un vecteur de $\mathcal{H}$, et faire passer un test $|\chi\rangle$ à un système quantique est équivalent à mesurer le projecteur $\mathcal{P}_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|$: $\mathcal{P}_\chi$ vaut un si le système passe le test $|\chi\rangle$ et zéro s'il échoue. Compte tenu de la décomposition spectrale d'un opérateur hermitique comme somme de projecteurs, on voit que *les notions de test et de mesure d'une grandeur physique sont étroitement liées*. On mettra plutôt l'accent sur l'aspect « mesure » si l'on est intéressé par la valeur propre de A^7 , et plutôt sur l'aspect « test » si l'on est intéressé par la probabilité de trouver le système dans un état propre de A . Illustrons-le sur l'expérience de Stern-Gerlach du § 3.2.2. Dans l'interprétation « mesure du spin », l'appareil de Stern-Gerlach mesure la composante z du spin en déviant les atomes d'argent vers le haut ou vers le bas, et la détection de l'atome sur un écran à la sortie de l'appareil permet de distinguer entre les valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$ de la grandeur physique $\mathcal{S}_z$, composante du spin suivant l'axe Oz . On peut, de façon équivalente, dire que l'on fait passer aux atomes les tests $|+\rangle$ et $|-\rangle$. La probabilité de déviation vers le haut (resp. bas) est $|\langle +|\varphi\rangle|^2$ (resp. $|\langle -|\varphi\rangle|^2$).

Cependant les mesures, ou les tests, décrits au § 3.2.2 présentent un inconvénient : la mesure n'est achevée que lorsque les atomes sont absorbés sur l'écran et ils ne sont plus disponibles pour des expériences ultérieures. Dans une *mesure idéale* (ou *test idéal*), on suppose que le système physique n'est pas détruit par la mesure⁸ ; de plus, si avant la mesure de $\mathcal{A}$ le vecteur d'état est $|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, la probabilité que le système après mesure soit dans l'état $|n\rangle$ doit être $|c_n|^2$. On pourrait imaginer une mesure idéale⁹ (tout à fait théorique !) du spin grâce à un filtre de Stern-Gerlach modifié s'inspirant du dispositif décrit au § 1.1.4. Prenant comme base de départ le filtre de la figure 3.8, on illumine l'atome entrant dans le filtre par un faisceau laser convenablement accordé qui induit une transition dans un niveau excité de l'atome. Lorsqu'elles ont leur séparation maximale à l'intérieur du filtre, les deux trajectoires passent dans deux cavités résonantes distinctes où l'atome revient dans son état fondamental en émettant un photon avec une probabilité voisine de 100 % (figure 4.1). Ce photon est détecté dans l'une des deux cavités, et il est ainsi possible d'étiqueter la trajectoire à l'intérieur du filtre, *sans perturber en quoi que ce soit l'état de spin*. Cette mesure entraîne une profonde modification dans la description de l'état de spin. Si par exemple l'état du spin à l'entrée du filtre est l'état propre $|+, \hat{x}\rangle$ de S_x , en l'absence

7. On peut donner une formulation « mesure » au test de polarisation d'un photon, par exemple dans la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$, en introduisant la grandeur physique $\mathcal{A}_x$ représentée par l'opérateur

$$A_x = |x\rangle\langle x| - |y\rangle\langle y|$$

qui prend la valeur $+1$ si le photon est polarisé suivant Ox et -1 s'il est polarisé suivant Oy .

8. Si l'on peut répéter plusieurs fois une même mesure idéale, on a alors une « mesure quantique sans démolition » ou mesure QND (Quantum Non Demolition). Voir par exemple C. Caves *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 341 (1980) ou V. Braginsky, Y. Vorontsov et K. Thorne, *Science* **209**, 547 (1980).

9. Une autre expérience théorique a été proposé par M. Scully, B. Englert et J. Schwinger, *Phys. Rev. A* **40**, 1775 (1989).

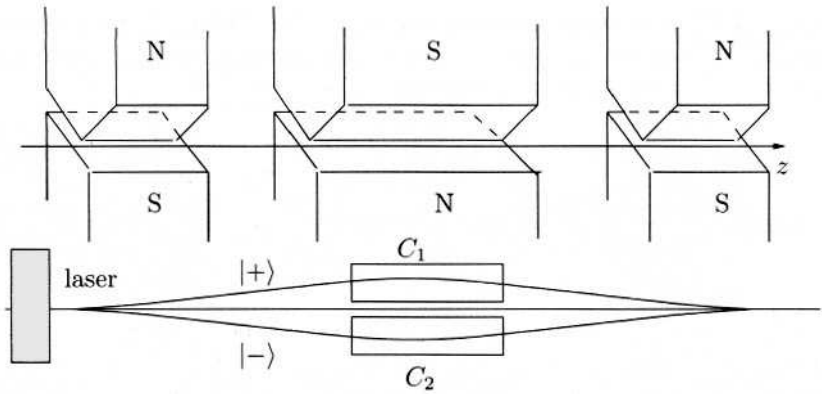


FIG. 4.1 – Mesure idéale du spin.

de mesure, les deux trajectoires conservent la propriété de cohérence. Elles peuvent être recombinaées à la sortie du filtre pour reconstruire l'état $|+, \hat{x}\rangle$: le filtre contient une superposition *cohérente* d'états propres de S_z , $|+\rangle$ et $|-\rangle$, avec une amplitude $1/\sqrt{2}$

$$|+, \hat{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

Au contraire, lorsque la mesure est achevée, le spin est projeté sur l'un des états $|+\rangle$ ou $|-\rangle$ avec une probabilité de 50 %, et il est impossible de revenir en arrière et de reconstruire l'état $|+, \hat{x}\rangle$. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce caractère irréversible de la mesure. Ainsi que nous le verrons plus en détail au chapitre 6 et à l'annexe B, la mesure a transformé la superposition cohérente $|+, \hat{x}\rangle$ en un ensemble statistique classique de 50 % de spins up et 50 % de spins down, *mais d'une expérience sur un atome donné émerge toujours un résultat unique*.

Si la mesure de S_z a donné le résultat $+\hbar/2$ et si on répète cette mesure, on constate que le résultat est toujours $+\hbar/2$: immédiatement après une mesure de S_z qui a donné le résultat $+\hbar/2$, le spin est dans l'état $|+\rangle$. De façon générale, pour un système quantique qui vient de passer avec succès un test $|\chi\rangle$, on admet que le système quantique se trouve dans l'état $|\chi\rangle$

$$|\varphi\rangle \rightarrow \frac{\mathcal{P}_\chi |\varphi\rangle}{\|\mathcal{P}_\chi |\varphi\rangle\|}$$

Il subit une évolution *irréversible* qui le projette dans l'état $|\chi\rangle$. L'état d'un système quantique immédiatement après que l'on a effectué une mesure idéale (ou un test idéal) est donné par un postulat supplémentaire, dit de *réduction du paquet d'ondes* **RPO** qui est un complément au postulat **II**.

Postulat RPO. Si le système était initialement dans l'état $|\varphi\rangle$, et si le résultat de la mesure de $\mathcal{A}$ est a_n , alors immédiatement après la mesure le système se trouve dans l'état projeté sur le sous-espace de la valeur propre a_n

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \frac{\mathcal{P}_n|\varphi\rangle}{(\langle\varphi|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle)^{1/2}} \quad (4.7)$$

Le vecteur $|\psi\rangle$ dans (4.7) est bien normalisé à l'unité car

$$\|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|\mathcal{P}_n^\dagger\mathcal{P}_n|\varphi\rangle = \langle\varphi|\mathcal{P}_n|\varphi\rangle$$

compte tenu des propriétés des projecteurs. Le postulat **RPO** suppose la mesure idéale, c'est-à-dire non destructrice, de telle sorte que les tests peuvent être répétés. D'un point de vue purement pragmatique, ce postulat ne présente un intérêt que si l'on effectue au moins deux mesures consécutives. Nous avons donné ci-dessus un exemple de mesure idéale pour le spin d'un atome d'argent (figure 4.1). À la sortie du filtre, on sait dans quel état de spin se trouve l'atome qui est maintenant disponible pour des tests ultérieurs. Une répétition de la mesure de $\mathcal{S}_z$ redonnera $+\hbar/2$ pour les atomes qui ont émis un photon dans C_1 et $-\hbar/2$ pour ceux qui ont émis un photon dans C_2 . Il faut remarquer que la mesure idéale se présente rarement en pratique. En général la détection détruit le système observé : un exemple déjà mentionné de mesure destructrice¹⁰ est la détection d'un photon par un photomultiplicateur D_x ou D_y dans la figure 3.2. Un autre exemple de mesure non idéale est la détermination de l'impulsion d'une particule par collision élastique avec une seconde particule d'impulsion connue, en utilisant la conservation de l'énergie-impulsion. Après la collision, la première particule ne se trouve plus dans l'état d'impulsion que l'on a mesurée. Le concept de mesure idéale est indispensable pour la discussion de la mesure en physique quantique, mais en pratique la mesure idéale est l'exception, et non la règle !

Le point de vue sous-jacent au postulat **RPO** est celui de Bohr, dit aussi « point de vue de Copenhague ». Dans ce point de vue, l'appareil de mesure agit comme un objet classique et on ne se préoccupe pas du détail du processus de mesure, qui est une sorte de « boîte noire » : le seul point pertinent est le résultat, qui se lit sur un appareil de mesure classique, par exemple grâce à la position d'une aiguille sur un écran. Nous reviendrons au § 6.3.1 et à l'annexe B sur le processus de mesure en mécanique quantique, en mettant en évidence les limitations du point de vue de Bohr. Une analyse complète du processus de mesure incluant les interactions quantiques de deux appareils de mesure consécutifs montre que le postulat **RPO** est une conséquence du postulat **II** et du postulat d'évolution temporelle **IV** énoncé en (4.11). Cependant le point de vue de Bohr est parfaitement opérationnel pour toutes les applications courantes de la mécanique quantique, et nous nous en servirons désormais sans commentaires supplémentaires.

10. On sait maintenant effectuer des mesures non destructrices sur un photon : G. Nogues *et al.*, *Nature* **400**, 239 (1999).

Lorsque l'on cherche à déterminer complètement le vecteur d'état $|\varphi\rangle$ d'un système physique, il peut arriver que la mesure idéale d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ donne le résultat a , la valeur propre a de $\mathcal{A}$ étant non dégénérée. Immédiatement après la mesure, le vecteur d'état est alors le vecteur propre $|a\rangle$ de $\mathcal{A}$. Si la valeur propre est dégénérée, il faut trouver une seconde grandeur physique $\mathcal{B}$ compatible avec $\mathcal{A}$: $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = 0$. Dans ce cas il est possible que la donnée des valeurs propres a et b spécifie entièrement le vecteur d'état. Si ce n'est pas encore le cas, il faudra trouver une troisième grandeur physique $\mathcal{C}$ compatible avec $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$, etc. Lorsque la donnée des valeurs propres $\{a, b, c, \dots\}$ des opérateurs compatibles $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots\}$ spécifie entièrement le vecteur d'état on dira, en suivant la terminologie introduite au § 2.3.3, que ces opérateurs (ou les grandeurs physiques qu'ils représentent) forment un *système complet d'opérateurs (ou de grandeurs physiques) compatibles*. La mesure simultanée d'un système complet de grandeurs physiques compatibles $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots\}$ constitue un *test maximal* du vecteur d'état. Si l'espace des états est de dimension N , un *test maximal* doit avoir N résultats différents possibles. Lorsque l'on a réalisé un test maximal sur un système quantique, on connaît exactement son vecteur d'état, et on a donc *préparé* le système quantique dans un état déterminé : on a effectué l'étape de préparation du système.

Pour fixer les idées, supposons que la donnée de deux valeurs propres a_r et b_s de deux opérateurs compatibles $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ spécifie entièrement un vecteur $|r, s\rangle$ de $\mathcal{H}$

$$\mathcal{A}|r, s\rangle = a_r|r, s\rangle \quad \mathcal{B}|r, s\rangle = b_s|r, s\rangle$$

La mesure simultanée des grandeurs physiques $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ est alors un test maximal et les N résultats possibles sont étiquetés par le couple (r, s) . Un exemple d'appareil effectuant un test maximal est l'appareil de Stern-Gerlach de la figure 3.7 : cet appareil sépare les états de spin $|+\rangle$ et $|-\rangle$, qui donnent deux taches différentes sur l'écran, l'espace des états étant de dimension 2 : $N = 2$. La mesure de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ permet de préparer le système dans l'état $|r, s\rangle$, en sélectionnant les systèmes qui ont donné le résultat (a_r, b_s) . Si les systèmes quantiques sélectionnés dans l'état $|r, s\rangle$ sont à nouveau soumis à une mesure simultanée de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$, le résultat de cette nouvelle mesure sera (a_r, b_s) avec une probabilité de 100 %. Lorsqu'un système physique est décrit par un vecteur d'état, il doit exister, au moins en principe, un test maximal dont un des résultats possibles a une probabilité de 100 % : pour un spin 1/2 dans l'état $|+\rangle$, un tel test maximal est celui effectué avec un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à Oz .

Il est aussi instructif d'examiner le cas d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ compatible avec $\mathcal{B}$ et $\mathcal{C}$: $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = [\mathcal{A}, \mathcal{C}] = 0$, alors que $\mathcal{B}$ et $\mathcal{C}$ sont incompatibles : $[\mathcal{B}, \mathcal{C}] \neq 0$. Dans ce cas le résultat de la mesure de $\mathcal{A}$ dépend de ce qu'on la mesure simultanément à $\mathcal{B}$ ou à $\mathcal{C}$. Cette propriété est appelée *contextualité*, et un exemple en sera donné au § 6.2.3.

Le lecteur se sera rendu compte que la mesure en physique quantique est fondamentalement différente de la mesure en physique classique. En physique classique, la mesure révèle une propriété préexistante du système physique testé. Si une voiture roule à 180 km/h sur l'autoroute, la mesure de sa vitesse par un radar détermine une propriété préexistante à la mesure, ce qui donne au gendarme la légitimité pour verbaliser. Au contraire la mesure de la composante S_x d'un spin $1/2$ dans l'état $|+\rangle$ ne révèle pas une valeur de S_x préexistante. La dispersion des résultats de la mesure de S_x dans ce cas de figure est parfois attribuée à la « perturbation incontrôlable du spin due à la mesure », mais la valeur de S_x ne préexiste pas à la mesure, et on ne peut pas perturber ce qui n'existe pas. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce point au § 6.2.1.

4.1.3 Inégalités de Heisenberg II

Nous avons introduit au chapitre précédent la notion de grandeurs physiques incompatibles. Nous allons revenir de façon plus quantitative sur ce concept et ses conséquences pour la mesure. Deux grandeurs physiques A et B sont *incompatibles* si le commutateur des opérateurs A et B qui les représentent est non nul : $[A, B] \neq 0$. Supposons qu'une première mesure de A ait donné un résultat a et projeté le vecteur d'état initial sur un vecteur propre $|a\rangle$ de A : $A|a\rangle = a|a\rangle$. Si l'on effectue une mesure de B immédiatement après celle de A , en général le vecteur $|a\rangle$ ne sera pas vecteur propre de B et le résultat de la mesure ne sera connu qu'avec une certaine probabilité. Par exemple si b est une valeur propre simple de B correspondant au vecteur propre $|b\rangle$: $B|b\rangle = b|b\rangle$, la probabilité de mesurer b sera $p(a \rightarrow b) = |\langle b|a\rangle|^2$. En général, il ne sera pas possible de trouver des états où les valeurs de A et B soient toutes deux exactement connues. Nous allons établir un résultat important sur les dispersions (ou écarts quadratiques moyens) des mesures effectuées à partir d'un état initial $|\varphi\rangle$ arbitraire. Comme en théorie des probabilités ordinaires, nous définissons les *dispersions* $\Delta_\varphi A$ et $\Delta_\varphi B$ dans l'état $|\varphi\rangle$ par

$$\begin{aligned}(\Delta_\varphi A)^2 &= \langle A^2 \rangle_\varphi - (\langle A \rangle_\varphi)^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\varphi I)^2 \rangle_\varphi \\ (\Delta_\varphi B)^2 &= \langle B^2 \rangle_\varphi - (\langle B \rangle_\varphi)^2 = \langle (B - \langle B \rangle_\varphi I)^2 \rangle_\varphi\end{aligned}\tag{4.8}$$

Le commutateur de A et de B est de la forme iC , où C est un opérateur hermitique ; en effet

$$[A, B]^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger] = [B, A] = -[A, B]$$

Nous pouvons donc écrire

$$[A, B] = iC \quad C = C^\dagger\tag{4.9}$$

Définissons les opérateurs hermitiques de valeur moyenne nulle (*a priori* uniquement dans l'état $|\varphi\rangle$)

$$A_0 = A - \langle A \rangle_\varphi I \quad B_0 = B - \langle B \rangle_\varphi I$$

et dont le commutateur est aussi iC : $[A_0, B_0] = iC$, car $\langle A \rangle_\varphi$ et $\langle B \rangle_\varphi$ sont des nombres. La norme au carré du vecteur

$$(A_0 + i\lambda B_0)|\varphi\rangle$$

où λ est choisi réel, doit être positive

$$\begin{aligned} \|(A_0 + i\lambda B_0)|\varphi\rangle\|^2 &= \|A_0|\varphi\rangle\|^2 + i\lambda\langle\varphi|A_0B_0|\varphi\rangle \\ &\quad - i\lambda\langle\varphi|B_0A_0|\varphi\rangle + \lambda^2\|B_0|\varphi\rangle\|^2 \\ &= \langle A_0^2 \rangle_\varphi - \lambda\langle C \rangle_\varphi + \lambda^2\langle B_0^2 \rangle_\varphi \geq 0 \end{aligned}$$

Le polynôme de degré deux en λ doit être positif quel que soit λ , ce qui implique

$$\langle C \rangle_\varphi^2 - 4\langle A_0^2 \rangle_\varphi\langle B_0^2 \rangle_\varphi \leq 0$$

Ceci démontre l'inégalité de Heisenberg

$$\boxed{(\Delta_\varphi A)(\Delta_\varphi B) \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle_\varphi|} \quad (4.10)$$

C'est la relation souhaitée donnant les dispersions sur les mesures de A et B : le produit des dispersions sur les mesures est supérieur ou égal à la moitié du module de la valeur moyenne du commutateur de A et B . Il est facile de montrer (exercice 4.3.1) qu'une condition nécessaire et suffisante pour que $\Delta_\varphi A = 0$ est que $|\varphi\rangle$ soit vecteur propre de A . Dans un espace vectoriel de dimension finie, on a alors $\langle C \rangle_\varphi = 0$. Insistons sur l'interprétation correcte de (4.10) : en effectuant comme en (4.3) un grand nombre de mesures de A , un grand nombre de mesures de B et un grand nombre de mesures de C sur des systèmes tous préparés dans le même état $|\varphi\rangle$, on pourra en déduire avec une bonne précision les dispersions $\Delta_\varphi A$ et $\Delta_\varphi B$ ainsi que la valeur moyenne $\langle C \rangle_\varphi$, qui obéiront alors à (4.10).

4.2 Évolution temporelle

4.2.1 Équation d'évolution

Jusqu'à présent nous avons considéré le système physique à un instant donné, ou pendant l'intervalle de temps supposé infiniment court d'une mesure. Nous allons maintenant prendre en considération l'évolution temporelle du vecteur d'état, auquel nous donnerons une dépendance explicite $|\varphi(t)\rangle$ par rapport au temps t .

Postulat IV : équation d'évolution

L'évolution temporelle du vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ d'un système quantique *isolé* est régie par l'équation d'évolution

$$\boxed{i\hbar \frac{d|\varphi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\varphi(t)\rangle} \quad (4.11)$$

L'opérateur hermitique $H(t)$ est appelé *hamiltonien*.

L'opérateur H a les dimensions d'une énergie, et nous identifierons effectivement H comme étant l'opérateur hermitique représentant la grandeur physique énergie. L'équation (4.11) est du premier ordre par rapport au temps, et l'évolution est déterministe : étant donné une condition initiale $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps $t = t_0$ pour le vecteur d'état, l'évolution (4.11) détermine $|\varphi(t)\rangle$ à tout temps ultérieur $t > t_0$, pourvu bien sûr que le hamiltonien soit connu. En fait, la restriction à $t > t_0$ n'est pas nécessaire : l'évolution (4.11) est réversible et on peut parfaitement « remonter le temps ». Le schéma d'une expérience typique est donné dans la figure 4.2 : le système est préparé au temps $t = t_0$ par la mesure d'un ensemble de grandeurs physiques compatibles, qui détermine le vecteur d'état $|\varphi(t_0)\rangle$. Le vecteur d'état évolue ensuite jusqu'au temps t en suivant (4.11), et une seconde mesure d'une ou d'un ensemble de grandeurs physiques (soit identiques à celles de la première mesure, soit différentes) est effectuée au temps t . Cette seconde mesure permet de déterminer totalement ou en partie $|\varphi(t)\rangle$, et par exemple de remonter aux propriétés de H . Pour que (4.11) soit valable entre les deux mesures, il est bien sûr nécessaire que le système quantique soit isolé dans l'intervalle de temps correspondant.

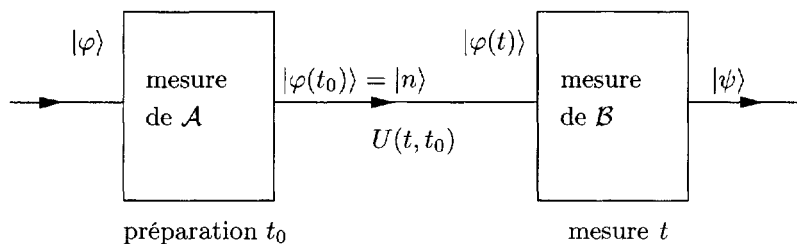


FIG. 4.2 – Préparation et mesure. La mesure de $\mathcal{A}$ au temps t_0 donne le résultat a_n . L'évolution (4.14) entre t_0 et t se traduit par $|\varphi(t)\rangle = U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle$. Une mesure de $\mathcal{B}$ est ensuite effectuée au temps t .

La (nécessaire) conservation de la norme du vecteur d'état est assurée par l'hermiticité de H . En effet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\varphi(t)\|^2 &= \frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | \varphi(t) \rangle \\ &= \langle \varphi(t) | \left(\frac{1}{i\hbar} H \right)^\dagger | \varphi(t) \rangle + \langle \varphi(t) | \left(\frac{1}{i\hbar} H \right) | \varphi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | (H - H^\dagger) | \varphi(t) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

car $H = H^\dagger$. Si l'on décompose $|\varphi(t)\rangle$ sur une base $|n, r\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r | \varphi(t) \rangle = \sum_{n,r} c_{nr}(t) |n, r\rangle$$

les composantes $c_{nr}(t)$ obéissent à

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{n,r} |c_{nr}(t)|^2 \right) = \frac{d}{dt} \left(\sum_n p(a_n, t) \right) = 0$$

La somme des probabilités $p(a_n, t)$ doit toujours être égale à un.

La forme matricielle de l'équation d'évolution (4.11) s'obtient dans une base arbitraire $\{|\alpha\rangle\}$ de $\mathcal{H}$ en la multipliant à gauche (4.11) par $\langle\alpha|$ et en utilisant la relation de fermeture

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle\alpha|\varphi(t)\rangle = \langle\alpha|H(t)|\varphi(t)\rangle = \sum_{\beta} \langle\alpha|H(t)|\beta\rangle \langle\beta|\varphi(t)\rangle$$

soit

$$i\hbar \dot{c}_{\alpha}(t) = \sum_{\beta} H_{\alpha\beta}(t) c_{\beta}(t) \quad (4.13)$$

Nous avons souligné le caractère réversible et unitaire de l'évolution (4.11). Ce caractère réversible et unitaire doit être contrasté avec celui de l'évolution dans une mesure, qui est *non unitaire et irréversible*. La projection du vecteur d'état initial sur le vecteur propre de la grandeur physique mesurée est non unitaire : la norme n'est pas conservée, et il faut normaliser le résultat $\mathcal{P}_n|\varphi\rangle$ de la projection (*cf.* (4.7)), et d'autre part il est impossible de reconstruire le vecteur d'état initial une fois la mesure faite. Dans le point de vue de Copenhague, on trouve donc *deux types d'évolution* : une évolution réversible (4.11) et une évolution irréversible (4.7), ce qui est peu satisfaisant. Ce problème sera examiné à l'annexe B.

4.2.2 Opérateur d'évolution

Nous avons donné en (4.11) l'équation d'évolution sous forme différentielle. Il existe une formulation intégrale de cette équation qui fait intervenir

l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$. Dans cette formulation, le postulat **IV** devient :

Postulat IV' : Opérateur d'évolution

Le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ au temps t se déduit du vecteur d'état $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps t_0 par application d'un opérateur unitaire $U(t, t_0)$, appelé *opérateur d'évolution*

$$\boxed{|\varphi(t)\rangle = U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle} \quad (4.14)$$

L'unitarité de U : $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ assure la conservation (4.12) de la norme

$$\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle = \langle\varphi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle = \langle\varphi(t_0)|\varphi(t_0)\rangle = 1$$

Inversement, on aurait pu partir de la conservation de la norme pour montrer que $U^\dagger U = I$. Dans un espace vectoriel de dimension finie, cela suffit à assurer $U U^\dagger = I$ (cf. § 2.2.1), mais pas nécessairement dans un espace de dimension infinie. L'opérateur d'évolution obéit aussi à la *propriété de groupe*

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad t_0 \leq t_1 \leq t \quad (4.15)$$

En effet, il est équivalent d'aller directement de t_0 à t , ou d'aller d'abord de t_0 à t_1 et ensuite de t_1 à t

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle \\ &= U(t, t_1)|\varphi(t_1)\rangle = U(t, t_1)U(t_1, t_0)|\varphi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Comme précédemment la restriction $t_0 < t_1 < t$ n'est pas nécessaire : t_1 peut être quelconque. Évidemment $U(t_0, t_0) = I$, et la propriété de groupe jointe à l'unitarité de U implique

$$U(t, t_0) = U^{-1}(t_0, t) = U^\dagger(t_0, t) \quad (4.16)$$

Les postulats d'évolution temporelle **IV** et **IV'** ne sont bien sûr pas indépendants. En effet, il est facile à partir de (4.11) d'écrire une équation différentielle pour $U(t, t_0)$. En différentiant (4.14) par rapport au temps

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = i\hbar \left[\frac{d}{dt} U(t, t_0) \right] |\varphi(t_0)\rangle$$

et en comparant avec (4.11) on obtient

$$i\hbar \left[\frac{d}{dt} U(t, t_0) \right] |\varphi(t_0)\rangle = H(t)U(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle$$

Comme cette équation doit être valable quel que soit $|\varphi(t_0)\rangle$, on en déduit une équation différentielle pour $U(t, t_0)$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)} \quad (4.17)$$

ce qui se traduit aussi par

$$H(t_0) = i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) \Big|_{t=t_0} \quad (4.18)$$

en prenant la limite $t \rightarrow t_0$. Il est donc aisé de passer de la formulation intégrale (4.14) à la formulation différentielle (4.11). Le passage inverse est plus compliqué : en effet, si $H(t)$ était un nombre, l'équation (4.17) s'intégrerait immédiatement. Mais $H(t)$ est un opérateur et en général

$$U(t, t_0) \neq \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right) \quad (4.19)$$

parce qu'il n'y a aucune raison pour que $[H(t'), H(t'')] = 0$. Cependant il existe une formule générale¹¹ pour calculer $U(t, t_0)$ à partir de $H(t)$, et les postulats IV et IV' sont strictement équivalents¹².

4.2.3 États stationnaires

Un cas particulier très important est celui du système isolé de son environnement. L'opérateur d'évolution ne peut alors pas dépendre du choix fait pour l'origine des temps : peu importe pour un système isolé de toute influence extérieure que nous choissions pour le décrire le temps de Paris ou celui de New-York qui, comme chacun sait, sont décalés de $\tau =$ six heures

$$t_{\text{New-York}} = t_{\text{Paris}} - \tau$$

Quel que soit τ , nous devons avoir

$$U(t - \tau, t_0 - \tau) = U(t, t_0) \quad (4.20)$$

Ceci implique que U ne peut dépendre que de la *différence* $(t - t_0)$. L'équation (4.18) montre alors que le hamiltonien est *indépendant du temps*, car le choix de t_0 est arbitraire. Naturellement, il peut parfaitement arriver que le hamiltonien soit indépendant du temps, même pour un système non isolé, par exemple si le système est plongé dans un champ magnétique indépendant du temps comme le spin 1/2 du § 3.2.5. En revanche, si un champ magnétique est appliqué entre 12h et 12h10, heure de Paris, le choix de l'origine des temps ne sera pas indifférent ! Lorsque le hamiltonien

11. Voir par exemple Messiah [1959], chapitre XVII.

12. En toute rigueur, on peut trouver des exceptions où U est défini, mais non H : cf. Peres [1995], page 85.

est indépendant du temps, l'équation différentielle (4.17) s'intègre sans problème et

$$U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H \right) \quad (4.21)$$

qui ne dépend que de $(t - t_0)$.

L'opérateur $U(t - t_0)$ (4.21) est obtenu par exponentiation de l'opérateur hermitique H ; $U(t - t_0)$ effectue une translation de temps de $(t - t_0)$ sur le vecteur d'état, et si $(t - t_0)$ devient infinitésimal

$$U(t - t_0) \simeq I - \frac{i(t - t_0)}{\hbar} H \quad (4.22)$$

Cette équation s'interprète ainsi : H est le *générateur infinitésimal des translations de temps*, et, pour un système isolé, la définition la plus générale du hamiltonien est d'être précisément ce générateur infinitésimal. La notion de générateur infinitésimal sera étendue à d'autres transformations au chapitre 8.

Considérons un système physique isolé qui peut être décrit à une bonne approximation par un vecteur d'état d'un espace de Hilbert de dimension 1 : particule élémentaire stable, atome dans son état fondamental... Le vecteur d'état est alors un nombre complexe $\varphi(t)$ et H un nombre réel : $H = E$. La loi d'évolution (4.13) devient, compte tenu de (4.20)

$$\varphi(t) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right) \varphi(t_0) = \exp(-i\omega(t - t_0))\varphi(t_0) \quad (4.23)$$

en définissant $E = \hbar\omega$. D'après la relation de Planck-Einstein $E = \hbar\omega$, il est naturel d'identifier E à l'énergie.

Passons maintenant à un cas moins trivial. Soit $|n, r\rangle$ un vecteur propre de H correspondant à la valeur propre E_n : $H|n, r\rangle = E_n|n, r\rangle$. Son évolution temporelle est particulièrement simple : si $|\varphi(t_0)\rangle = |n, r\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \exp \left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H \right) |n, r\rangle = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0) \right) |n, r\rangle \quad (4.24)$$

La probabilité de trouver $|\varphi(t)\rangle$ dans un état $|\chi\rangle$ quelconque est indépendante du temps

$$|\langle\chi|\varphi(t)\rangle|^2 = \left| \langle\chi| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0) \right) |\varphi(t_0)\rangle \right|^2 = |\langle\chi|\varphi(t_0)\rangle|^2$$

Pour cette raison, un état propre de H est appelé *état stationnaire*.

Il est parfois utile d'écrire la loi d'évolution temporelle sous forme de composantes. Écrivons la décomposition d'un vecteur d'état arbitraire $|\varphi(t_0)\rangle$ au temps $t = t_0$ sur la base $\{|n, r\rangle\}$ des vecteurs propres de H

$$|\varphi(t_0)\rangle = \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) |n, r\rangle \quad c_{nr}(t_0) = \langle n, r | \varphi(t_0) \rangle$$

Nous avons alors

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) \exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H\right) |n, r\rangle \\ &= \sum_{n,r} c_{nr}(t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)\right) |n, r\rangle \end{aligned}$$

ce qui donne la variation des coefficients c_{nr} en fonction de t

$$c_{nr}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)\right) c_{nr}(t_0) \quad (4.25)$$

4.2.4 Inégalité de Heisenberg temporelle

Au § 3.2.5, nous avons donné une explication élémentaire de la relation entre un temps caractéristique d'évolution Δt et une dispersion sur l'énergie ΔE . Établissons maintenant de façon générale une inégalité sur le produit $\Delta E \Delta t$, ou *inégalité de Heisenberg temporelle*. Nous allons d'abord écrire l'équation d'évolution de la valeur moyenne $\langle A \rangle_\varphi(t) = \langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle$ de l'opérateur A représentant la grandeur physique $\mathcal{A}$, supposée indépendante du temps

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} [-\langle \varphi(t) | H A | \varphi(t) \rangle + \langle \varphi(t) | A H | \varphi(t) \rangle] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | A H - H A | \varphi(t) \rangle \end{aligned}$$

ce qui donne le *théorème d'Ehrenfest*

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\varphi(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi(t) | [A, H] | \varphi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle_\varphi} \quad (4.26)$$

Utilisons maintenant la relation (4.10), en remplaçant B par H

$$\Delta_\varphi H \Delta_\varphi A \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle_\varphi| = \frac{1}{2} \hbar \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle_\varphi(t) \right|$$

et définissons le temps $\tau_\varphi(A)$ par

$$\frac{1}{\tau_\varphi(A)} = \left| \frac{d\langle A \rangle_\varphi(t)}{dt} \right| \frac{1}{\Delta_\varphi A}$$

$\tau_\varphi(A)$ est le temps caractéristique nécessaire pour que la valeur moyenne de A varie de $\Delta_\varphi A$, c'est-à-dire d'une quantité de l'ordre de la dispersion. L'inégalité précédente devient

$$\Delta_\varphi H \tau_\varphi(A) \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (4.27)$$

ce qui est la forme rigoureuse de l'inégalité de Heisenberg temporelle. Cette inégalité est souvent écrite sous la forme

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \frac{1}{2} \hbar \quad (4.28)$$

ΔE représente la dispersion en énergie et Δt un temps caractéristique d'évolution¹³. La valeur de l'énergie ne peut être exactement fixée que si la dispersion ΔE est nulle, ce qui implique que le temps caractéristique doit être infini. Ceci n'est possible que si l'état du système est un état stationnaire. C'est le cas par exemple pour une particule élémentaire stable ou un atome dans son état fondamental, en l'absence de perturbations extérieures. En revanche, un atome porté dans un état excité n'est pas dans un état stationnaire. En raison de son couplage avec les fluctuations du vide du champ électromagnétique (cf. § 14.3.4), il émet un photon au bout d'un temps moyen τ , appelé *vie moyenne de l'état excité* (cf. § 1.5.3). L'énergie du photon final présente une dispersion en énergie ΔE , qui est appelée *largeur de raie* et est souvent notée $\hbar\Gamma$. On montre que ΔE et τ sont reliés par $\tau \Delta E \simeq \hbar$, relation que l'on peut déduire de façon intuitive, mais discutable¹⁴, de l'inégalité de Heisenberg temporelle (4.28)

$$\Gamma \tau \simeq 1 \quad (4.29)$$

Donnons un ordre de grandeur en physique atomique, en prenant comme exemple le premier niveau excité de l'atome de rubidium ; l'atome dans cet état excité revient à son état fondamental en émettant un photon de longueur d'onde $\lambda = 0.78 \mu\text{m}$, ce qui correspond à une énergie $\varepsilon = 1.6 \text{ eV}$. La largeur de raie est $\hbar\Gamma = 2.4 \times 10^{-8} \text{ eV}$, et la vie moyenne $\tau \simeq 1/\Gamma = 2.7 \times 10^{-8} \text{ s}$. La dispersion sur l'énergie de l'état excité est donc très faible par rapport à la différence d'énergie avec le niveau fondamental : $\hbar\Gamma/\varepsilon \simeq 10^{-8}$, ce qui entraîne que l'énergie du niveau excité est définie avec une précision excellente. La relation (4.29) se généralise à toute désintégration de particules, par exemple la désintégration à deux corps $C \rightarrow A + B$.

Il ne faudrait surtout pas conclure de (4.28) que l'on ne peut pas mesurer l'énergie avec une précision meilleure que ΔE . Considérons par exemple l'énergie E du boson Z^0 , vecteur de l'interaction faible (cf. § 1.1.4) dans son référentiel au repos : $E = m_Z c^2$, où m_Z est la masse du boson Z^0 . Le boson Z^0 est instable, et possède donc une largeur de raie. Celle-ci a été mesurée avec une grande précision : $\hbar\Gamma_Z = 2.4952 \pm 0.0023 \text{ GeV}$. La précision actuelle sur la masse du Z^0 est bien meilleure que Γ_Z ! En effet la détermination la plus précise est actuellement $m_Z c^2 = 91.1875 \pm 0.0021 \text{ GeV}$ (figure 4.3). En d'autres termes, il est possible de pointer le centre de la raie avec une précision bien meilleure que la dispersion.

13. L'inégalité $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$ a un statut différent de (4.10) dans la mesure où t n'est pas un opérateur. Δt est souvent interprété incorrectement comme le temps nécessaire à la mesure de l'énergie.

14. Voir l'annexe C pour l'étude de cette relation.

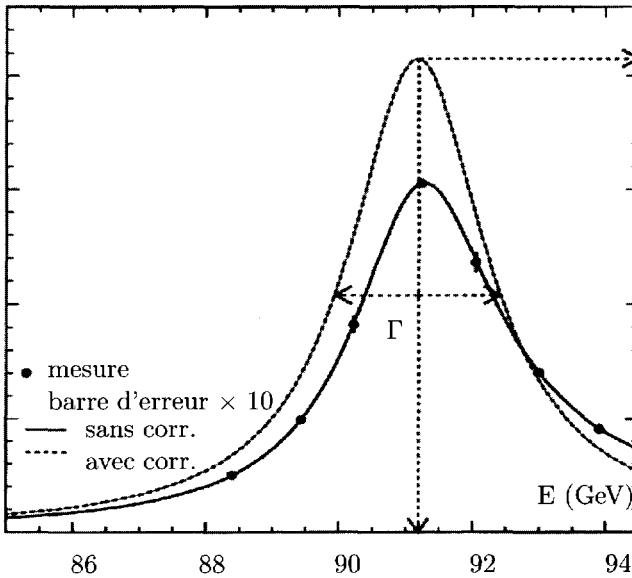
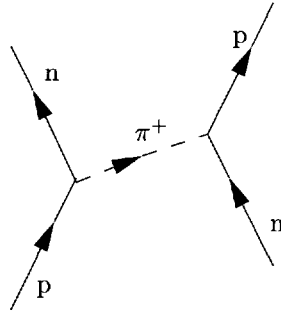


FIG. 4.3 – Spectre de masse du boson Z^0 . La courbe en trait plein est le résultat expérimental brut. Ce résultat doit être corrigé pour tenir compte des corrections radiatives (émission de photons) exactement calculables. La courbe en pointillés donne le spectre de masse du Z^0 . D'après la collaboration LEP, prétrirage CERN EP-2000-13 (2000).

La relation (4.28) permet aussi de discuter la notion de « particules virtuelles ». Il est possible d'interpréter les processus de la théorie quantique des champs en termes d'échanges de particules virtuelles : par exemple, l'interaction coulombienne dans l'atome d'hydrogène correspond à l'échange de photons virtuels entre un proton et un électron. Ces processus ne correspondent pas à une réaction observable entre particules, car les particules virtuelles ne peuvent pas obéir à la condition qui relie l'énergie à l'impulsion et à la masse : $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$. Prenons l'exemple des interactions entre nucléons, ou interactions fortes (*cf.* § 1.1.4), dont Yukawa imagina vers 1935 qu'elles étaient dues à l'échange d'une particule encore inconnue à l'époque, et que nous appelons aujourd'hui méson π . Cet échange est représenté sur la figure 4.4 par un « diagramme de Feynman ». Le proton de gauche (p) émet un méson π^+ et se transforme en neutron (n), tandis que le neutron de droite absorbe ce méson π^+ et se transforme en proton. La conservation de l'énergie-impulsion interdit la réaction

$$p \rightarrow n + \pi^+$$

FIG. 4.4 – Diagramme de Feynman pour l'échange d'un méson π .

Si l'impulsion est conservée, alors l'énergie ne peut pas l'être. En revanche, si l'on admet que la réaction ne dure qu'un temps très court Δt , alors il est possible de tirer parti d'une fluctuation d'énergie $\Delta E \simeq \hbar/\Delta t$. La fluctuation d'énergie nécessaire pour que la réaction soit possible est $\Delta E \sim m_\pi c^2$, où m_π est la masse du méson π^+ . Dans l'intervalle de temps Δt , le méson peut parcourir au maximum une distance¹⁵ $\sim c\Delta t \sim \hbar/(m_\pi c)$, la longueur d'onde Compton du méson π . Cette distance représente la portée maximale r_0 des forces nucléaires (cf. § 1.1.4), qui est de l'ordre de 1 fm. Yukawa fut donc capable de prédire l'existence d'une particule ayant une masse de l'ordre de $\hbar/(cr_0) \sim 200$ MeV, et le méson π fut effectivement découvert quelques années plus tard avec une masse de 140 MeV. Le méson π échangé dans la figure 4.3 n'est pas observable : il est virtuel. On sait aujourd'hui que les forces nucléaires ne sont pas fondamentales, et qu'elles sont dérivées de forces fondamentales entre quarks. L'argument de Yukawa reste néanmoins valable, car on peut écrire une théorie effective des forces nucléaires, avec échange de mésons, et leur portée maximale est déterminée par le méson le plus léger, qui est le méson π . Le photon étant de masse nulle, la portée des forces électromagnétiques est infinie : comme nous l'avons noté au § 1.1.4, le potentiel coulombien est à longue portée.

4.2.5 Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg

Le point de vue adopté dans ce qui précède, où le vecteur d'état évolue avec le temps alors que les opérateurs sont indépendants du temps, est appelé *point de vue de Schrödinger*. Un point de vue équivalent en ce qui concerne les résultats physiques est celui de Heisenberg, où les vecteurs d'état sont indépendants du temps et les opérateurs dépendent du temps. Afin de simplifier la discussion, nous prenons le cas d'un hamiltonien H et d'un opérateur A indépendants du temps. Ce n'est pas le cas général, car il peut arriver que même dans le point de vue de Schrödinger un opérateur A ait

15. On néglige pour simplifier la dilatation du temps.

une dépendance explicite par rapport au temps, ou que H dépende du temps. Nous admettrons que tel n'est pas le cas, en renvoyant l'étude générale à l'exercice 4.3.7. La valeur moyenne de A au temps t est

$$\langle A \rangle_{\varphi}(t) = \langle \varphi(t_0) | \exp \left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H \right) A \exp \left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H \right) | \varphi(t_0) \rangle$$

Si nous définissons l'opérateur A dans le point de vue de Heisenberg $A_H(t)$ par

$$A_H(t) = \exp \left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H \right) A \exp \left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} H \right) \quad (4.30)$$

alors la valeur moyenne de A peut se calculer comme

$$\langle A \rangle_{\varphi}(t) = \langle \varphi(t_0) | A_H(t) | \varphi(t_0) \rangle \quad (4.31)$$

La dépendance par rapport au temps est intégrée dans l'opérateur, tandis que le vecteur d'état est indépendant de t .

4.3 Approximations et modélisation

Nous avons énoncé ci-dessus les principes généraux qui fixent le cadre universel de la théorie quantique. Cela ne veut pas dire que nous sommes prêts à aborder immédiatement un problème physique ! En effet, pour aborder un problème concret, par exemple celui du calcul des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène, nous avons besoin de fixer l'espace des états et le hamiltonien appropriés selon le degré de précision avec lequel nous souhaitons résoudre le problème. Le choix d'un espace des états et d'un hamiltonien implique toujours que l'on se place dans le cadre d'une certaine approximation, et il ne faut surtout pas confondre ce qui est approximation (ou modélisation) et ce qui est principe fondamental. Par exemple, ainsi que nous allons le montrer dans un instant, l'espace des états est toujours au départ de dimension infinie, mais il peut arriver qu'il soit possible de se placer de façon approchée dans un espace des états de dimension finie, qui peut même éventuellement être petite ; la dimension N de cet espace est appelée le *nombre de niveaux* de l'approximation. Nous en avons vu un exemple dans l'étude du spin $1/2$: en première approximation, les degrés de liberté de spin sont découplés des degrés de liberté d'espace, et c'est ce qui nous a permis de nous placer dans un espace à deux dimensions en ignorant les degrés de liberté spatiaux. Un autre exemple est celui de l'atome à deux niveaux, modèle standard de la physique atomique : lorsque l'on s'intéresse à l'interaction d'un atome avec un champ électromagnétique de fréquence ω , en pratique le champ d'un laser, et si deux niveaux d'énergie sont espacés de $\hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega$, on peut se restreindre à ces deux niveaux d'énergie formant une base pour un espace des états à deux dimensions, et écrire un hamiltonien approché d'interaction avec le champ

laser agissant dans cet espace : cf. § 5.2.5 et § 14.4.1. Cette approche fournit une excellente approximation pour l'interaction laser-atome, approche qui peut être facilement raffinée, par exemple s'il faut tenir compte des effets du spin des niveaux.

Malheureusement la situation n'est pas toujours aussi simple. Nous allons le voir dans le cas des degrés de liberté spatiaux, que l'on peut traiter en s'appuyant sur le *principe de correspondance*. Selon ce principe, les grandeurs physiques position et impulsion sont des opérateurs $\vec{R}$ et $\vec{P}$, de composantes X_i et P_j , $i, j = (x, y, z)$, qui vérifient les relations de commutation dites *relations de commutation canoniques*

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I \quad (4.32)$$

Prenant la trace des deux membres, on observe qu'il est impossible que ces relations soient satisfaites dans un espace de dimension finie : en effet la trace du membre de gauche est nulle (la trace d'un commutateur est nulle), tandis que celle du membre de droite est $i\hbar N$, où N est la dimension de $\mathcal{H}$. Une fois cette difficulté reconnue, la suite de la procédure (qui n'est pas toujours exempte d'ambiguïtés) consiste à remplacer dans l'expression classique de l'énergie E les positions et les impulsions classiques $\vec{r}$ et $\vec{p}$ par les opérateurs $\vec{R}$ et $\vec{P}$ pour obtenir le hamiltonien quantique d'une particule de masse m dont l'énergie potentielle est $V(\vec{r})$. Le principe de correspondance conduit au passage suivant $E \rightarrow H$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightarrow H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (4.33)$$

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, (4.33) fournit une très bonne approximation si l'on prend pour $V(\vec{r})$ le potentiel coulombien (1.3) et pour espace des états celui de l'électron. L'effet de la masse finie du proton est pris en compte grâce à la masse réduite. Il faut bien comprendre que (4.32) et (4.33) représentent un choix pour l'espace des états et le hamiltonien, et que des approximations ont été faites. On a négligé en particulier les effets relativistes, et les choses se compliquent dès que l'on en tient compte. Il est à la rigueur possible dans un premier temps de généraliser l'expression du hamiltonien (équation de Dirac), mais une véritable théorie quantique et relativiste implique que l'on introduise un champ électron-positron et un champ électromagnétique quantifiés : c'est ce que l'on appelle *l'électrodynamique quantique*. Dans ces conditions, le principe de correspondance sous la forme (4.32) n'est plus valable¹⁶ : en fait il n'y a même

16. Il est remplacé par des relations de commutation canoniques entre les champs et leurs moments conjugués, ce qui conduit à des objets mathématiques complexes, les distributions à valeurs opérateur. Toutefois, il reste encore un tel chemin à parcourir (invariance de jauge, renormalisation) avant de calculer une quantité physique que ce principe de correspondance apparaît un peu accessoire, et il est d'ailleurs remplacé en pratique par l'approche des intégrales de Feynman.

plus d'opérateur position ! Et l'électrodynamique quantique n'est elle même qu'une approximation d'une théorie plus vaste... Il faut donc soigneusement distinguer les principes fondamentaux des approximations nécessaires pour aborder tout problème physique concret. Comme le souligne Isham[1995], la procédure standard qui consiste à « quantifier une théorie classique » en utilisant le principe de correspondance n'a qu'une valeur heuristique, et en fin de compte les approximations reposant sur ce principe ou toute autre démarche heuristique doivent être validées par la confrontation aux résultats expérimentaux.

Nous avons jusqu'à présent utilisé des notations différentes pour une grandeur physique $\mathcal{A}$ et l'opérateur hermitique associé A . Nous abandonnons désormais cette distinction, et confondons la grandeur physique et l'opérateur, qui seront représentés tous deux – sauf mention explicite du contraire – par des lettres majuscules : hamiltonien H , position $\vec{R}$, impulsion $\vec{P}$, moment angulaire $\vec{J}$... Les valeurs propres seront désignées par les lettres minuscules correspondantes : $\vec{r}$, $\vec{p}$, $\vec{j}$..., à l'exception du cas de l'énergie, où les valeurs propres de H seront notées E .

4.4 Exercices

4.4.1 Dispersion et vecteurs propres

Montrer qu'une condition nécessaire et suffisante pour que $|\varphi\rangle$ soit vecteur propre d'un opérateur hermitique A est que la dispersion (4.8) $\Delta_\varphi A = 0$.

4.4.2 Méthode variationnelle

1. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur (non normalisé) de l'espace de Hilbert des états et un hamiltonien H . La valeur moyenne $\langle H \rangle_\varphi$ est

$$\langle H \rangle_\varphi = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$$

Montrer que si le minimum de cette valeur moyenne est obtenu pour $|\varphi\rangle = |\varphi_m\rangle$ et le maximum pour $|\varphi\rangle = |\varphi_M\rangle$, alors

$$H|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle \quad \text{et} \quad H|\varphi_M\rangle = E_M|\varphi_M\rangle$$

où E_m et E_M sont la plus petite et la plus grande valeur propre.

2. On suppose que le vecteur $|\varphi\rangle$ dépend d'un paramètre α : $|\varphi\rangle = |\varphi(\alpha)\rangle$. Montrer que si

$$\left. \frac{\partial \langle H \rangle_{\varphi(\alpha)}}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0$$

alors $E_m \leq \langle H \rangle_{\varphi(\alpha_0)}$ si α_0 correspond à un minimum de $\langle H \rangle_{\varphi(\alpha)}$ et $\langle H \rangle_{\varphi(\alpha_0)} \leq E_M$ si α_0 correspond à un maximum. Ce résultat est à la base d'une méthode d'approximation appelée méthode variationnelle (§ 14.1.4).

3. Si H agit dans un espace à deux dimensions, sa forme la plus générale est

$$H = \begin{pmatrix} a+c & b \\ b & a-c \end{pmatrix}$$

où b peut toujours être choisi réel. En paramétrant $|\varphi(\alpha)\rangle$ sous la forme

$$|\varphi(\alpha)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ \sin \alpha/2 \end{pmatrix}$$

trouver les valeurs de α_0 en cherchant les extrema de $\langle \varphi(\alpha) | H | \varphi(\alpha) \rangle$. Retrouver ainsi (2.35).

4.4.3 Théorème de Feynman-Hellmann

Soit un hamiltonien H dépendant d'un paramètre λ : $H = H(\lambda)$, $E(\lambda)$ une valeur propre simple et $|\varphi(\lambda)\rangle$ le vecteur propre normalisé ($\|\varphi(\lambda)\|^2 = 1$) correspondant

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$$

Montrer le théorème de Feynman-Hellmann

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \varphi(\lambda) | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \varphi(\lambda) \rangle \quad (4.34)$$

4.4.4 Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

On considère un système à deux niveaux de hamiltonien H représenté par la matrice

$$H = \hbar \begin{pmatrix} A & B \\ B & -A \end{pmatrix}$$

dans la base

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

D'après (2.35), les valeurs propres et vecteurs propres de H sont

$$\begin{aligned} E_+ &= \hbar \sqrt{A^2 + B^2} & |\chi_+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \\ E_- &= -\hbar \sqrt{A^2 + B^2} & |\chi_-\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

avec

$$A = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \theta \quad B = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \theta \quad \tan \theta = \frac{B}{A}$$

1. Le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ au temps t peut se décomposer sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle$$

Écrire le système d'équations différentielles couplées auquel obéissent les composantes $c_+(t)$ et $c_-(t)$.

2. On décompose $|\varphi(t=0)\rangle$ sur la base $\{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\}$

$$|\varphi(t=0)\rangle = |\varphi(0)\rangle = \lambda|\chi_+\rangle + \mu|\chi_-\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

Montrer que $c_+(t) = \langle +|\varphi(t)\rangle$ s'écrit

$$c_+(t) = \lambda e^{-i\Omega t/2} \cos \frac{\theta}{2} - \mu e^{i\Omega t/2} \sin \frac{\theta}{2}$$

avec $\Omega = 2\sqrt{A^2 + B^2}$: $\hbar\Omega$ est la différence d'énergie entre les deux niveaux. En déduire que $c_+(t)$ (de même que $c_-(t)$) vérifie l'équation différentielle

$$\ddot{c}_+(t) + \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 c_+(t) = 0$$

3. On suppose que $c_+(0) = 0$. En déduire λ et μ à une phase près ainsi que $c_+(t)$. Montrer que la probabilité de trouver le système au temps t dans l'état $|+\rangle$ est

$$p_+(t) = \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) = \frac{B^2}{A^2 + B^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right)$$

4. Montrer que si $c_+(t=0) = 1$ alors

$$c_+(t) = \cos \frac{\Omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\Omega t}{2}$$

En déduire $p_+(t)$ et $p_-(t)$, et vérifier la compatibilité du résultat avec celui de la question précédente.

4.4.5 Résonance magnétique nucléaire

La résonance magnétique nucléaire (RMN) repose sur le fait que les noyaux atomiques de spin non nul possèdent des moments magnétiques. Nous nous limiterons aux noyaux de spin 1/2 (1H , ^{13}C , ^{19}F , etc.) dont le moment magnétique, qui est un opérateur en mécanique quantique, est donné par

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$$

où γ est le facteur gyromagnétique

$$\gamma = \bar{\gamma} \frac{q_p}{2m_p}$$

avec $\bar{\gamma} = 5.59$ pour le proton, 1.40 pour le ^{13}C , 5.26 pour le ^{19}F , etc. Le spin nucléaire est placé dans un champ magnétique $\vec{B}_0$ dirigé suivant Oz .

1. Montrer que le hamiltonien H_0 du spin nucléaire s'écrit dans la base où S_z est diagonal

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z$$

si l'on pose $\gamma B_0 = \omega_0$.

2. On ajoute au champ constant $\vec{B}_0$ un champ $\vec{B}_1(t)$ situé dans le plan xOy tournant dans le sens inverse du sens trigonométrique avec une vitesse angulaire ω

$$\vec{B}_1(t) = B_1(\hat{x} \cos \omega t - \hat{y} \sin \omega t)$$

Montrer que le hamiltonien total dépendant du temps $H(t)$ devient

$$H(t) = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

où $\omega_1 = \gamma B_1$.

3. Soit $|\varphi(t)\rangle$ le vecteur d'état du spin nucléaire. On le décompose dans la base des états propres de S_z

$$|\varphi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle$$

Écrire le système d'équations différentielles auquel obéissent $c_+(t)$ et $c_-(t)$.

4. On pose

$$c_{\pm}(t) = \gamma_{\pm}(t) e^{\pm i\omega t/2}$$

Quelle est l'interprétation géométrique de cette relation ? Montrer que

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_+(t) \\ \dot{\gamma}_-(t) \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} \gamma_+(t) \\ \gamma_-(t) \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

où $\hat{H}$ est indépendant du temps. Donner l'expression explicite de $\hat{H}$.

5. Le spin est au temps $t = 0$ dans l'état $|-\rangle$. Utiliser les résultats de l'exercice précédent pour montrer que la probabilité $p_+(t)$ de trouver au temps t le spin dans l'état $|+\rangle$ est

$$p_+(t) = \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\right)^2 \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad \Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad (4.36)$$

Ce résultat est appelé *formule de Rabi*. Tracer $p_+(t)$ pour $\omega - \omega_0 = 3\omega_1$ et $\omega = \omega_0$ et retrouver la figure 4.5. Pourquoi peut-on parler de résonance pour $\omega = \omega_0$? Quelles sont les valeurs numériques de ω_0 et de la fréquence ν_0 correspondante pour le proton lorsque le champ magnétique vaut $B_0 = 1$ T ? Que veut dire un chimiste quand il parle d'une « RMN de 600 MHz » ?

L'utilisation de la RMN en chimie et en biologie repose sur le fait que l'environnement chimique d'un atome modifie légèrement la valeur du champ magnétique qui s'exerce sur le noyau atomique correspondant : $B_0 \rightarrow B_0(1 - \sigma)$, avec $\sigma \sim 10^{-5}$. Le déplacement correspondant de la fréquence de résonance donne des informations sur l'environnement chimique.

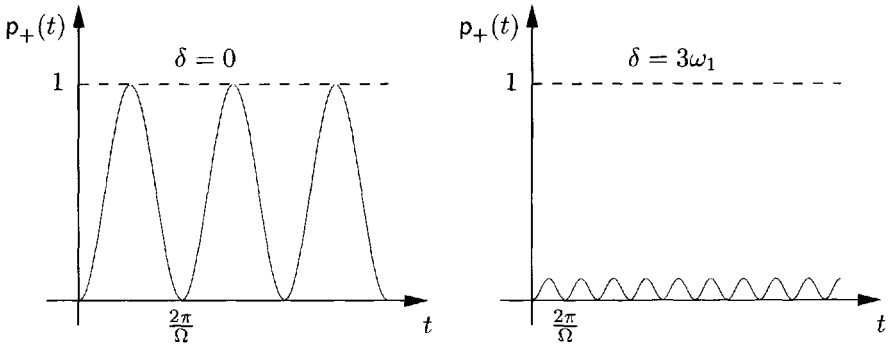
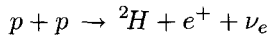


FIG. 4.5 – Oscillations de Rabi : (a) $\delta = 0$ (b) $\delta = 3\omega_1$. Dans le cas (b) la valeur maximale de $p_+(t)$ est $1/10$.

4.4.6 L'énigme des neutrinos solaires

Les réactions nucléaires à l'intérieur du Soleil produisent en abondance des neutrinos électroniques ν_e ; 95 % de ces neutrinos sont produits dans la réaction



La Terre reçoit du Soleil 6.5×10^{14} neutrinos par seconde et par m^2 . Depuis une trentaine d'années, plusieurs expériences ont tenté de détecter ces neutrinos, mais toutes ces expériences concordent pour conclure que le flux de neutrinos mesuré est seulement la moitié environ du flux calculé à partir du modèle standard du Soleil. Or ce modèle est considéré comme particulièrement fiable¹⁷, en particulier en raison des résultats récents de l'héliosismologie : les incertitudes sur le modèle solaire ne peuvent en aucun cas expliquer ce « déficit en neutrinos solaires ». La combinaison de deux expériences (*cf.* la note 4 du chapitre 1), a permis de montrer sans aucun doute possible que ce déficit en neutrinos est dû à la transformation des neutrinos ν_e en d'autres sortes de neutrinos au cours de leur voyage entre la Terre et le Soleil : ces expériences montrent que le flux *total* de neutrinos prévu par le modèle du Soleil est correct, mais que c'est le flux de neutrinos électroniques qui est trop faible. Nous allons faire une théorie simplifiée, mais qui donne l'essentiel de la physique sous-jacente, en supposant :

- qu'il existe seulement deux types de neutrinos, le neutrino électronique ν_e et le neutrino muonique ν_μ (en fait il existe une troisième sorte de neutrino, le neutrino τ : ν_τ) ;
- que tout le phénomène se passe dans le vide dans la propagation entre la Terre et le Soleil (en fait la propagation dans le Soleil joue aussi un rôle important).

17. L'intérieur du Soleil est connu de façon bien plus précise que celui de la Terre !

On a longtemps admis que les neutrinos étaient des particules de masse nulle. Si au contraire ils sont massifs, on peut se placer dans leur référentiel au repos et écrire le hamiltonien dans la base $\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle\}$

$$|\nu_e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\nu_\mu\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad H = c^2 \begin{pmatrix} m_e & m \\ m & m_\mu \end{pmatrix}$$

L'élément non diagonal m permet des transitions entre neutrinos électroniques et neutrinos muoniques.

1. Montrer que les états ayant une masse déterminée sont $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$

$$\begin{aligned} |\nu_1\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\nu_e\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\nu_\mu\rangle \\ |\nu_2\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |\nu_e\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\nu_\mu\rangle \end{aligned}$$

avec

$$\tan \theta = \frac{2m}{m_e - m_\mu}$$

et que les masses m_1 et m_2 sont

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{m_e + m_\mu}{2} + \sqrt{m^2 + \left(\frac{m_e - m_\mu}{2}\right)^2} \\ m_2 &= \frac{m_e + m_\mu}{2} - \sqrt{m^2 + \left(\frac{m_e - m_\mu}{2}\right)^2} \end{aligned}$$

2. Les neutrinos se propagent avec une vitesse proche de celle de la lumière : leur énergie est très grande par rapport à $\langle m \rangle c^2$, où $\langle m \rangle$ est une masse typique figurant dans H . Montrer que si un neutrino électronique est produit au temps $t = 0$ dans le Soleil, le vecteur d'état étant

$$|\varphi(t=0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\nu_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\nu_2\rangle$$

le vecteur d'état au temps t a pour composante sur $|\nu_e\rangle$

$$\langle \nu_e | \varphi(t) \rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-i\Delta E t/\hbar} \right)$$

où $\Delta E = E_2 - E_1$. En déduire que la probabilité de trouver un neutrino ν_e au temps t est

$$p_e(t) = 1 - \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\Delta E t}{2\hbar} \right)$$

Ce phénomène de transformation est appelé *oscillation neutrino*.

3. Si $p \gg \langle m \rangle c$ est l'impulsion des neutrinos, montrer que

$$\Delta E = \frac{(m_2^2 - m_1^2)c^3}{2p} = \frac{\Delta m^2 c^3}{2p}$$

avec $\Delta m^2 = m_2^2 - m_1^2$.

4. En supposant qu'il existe une demi-oscillation sur le parcours Soleil-Terre (c'est-à-dire $\Delta E t / \hbar = \pi$) pour des neutrinos de 8 MeV, quel est l'ordre de grandeur de la différence des masses carrées Δm^2 ? La distance Terre-Soleil est de 150 millions de kilomètres.

4.4.7 Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg

Soit un opérateur hermitique A dépendant du temps dans le point de vue de Schrödinger : $A = A(t)$. Le hamiltonien H est aussi supposé dépendant du temps. Montrer que

$$A_H(t) = U^{-1}(t, t_0) A(t) U(t, t_0)$$

vérifie

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t} \right)_H$$

où $H_H(t)$ et $(\partial A / \partial t)_H$ sont obtenus à partir de $H(t)$ et $(\partial A(t) / \partial t)$ par la loi de transformation utilisée pour A .

4.4.8 Le système des mésons K neutres

Préliminaire : description d'une particule instable. Supposons que l'on crée au temps $t = 0$ une particule instable A de masse m . Le vecteur d'état au temps $t = 0$ est $|\varphi(0)\rangle = |a\rangle$. Au temps t la composante $c(t)$ de $|\varphi(t)\rangle$ sur $|a\rangle$ est

$$c(t) = \langle a | \varphi(t) \rangle$$

Si la particule A était stable, $c(t)$ serait simplement donné par

$$c(t) = \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) = \exp\left(-i \frac{mc^2 t}{\hbar}\right)$$

dans son référentiel au repos, où son énergie est $E = mc^2$, et l'on aurait $|c(t)|^2 = 1$ pour tout t : la probabilité que la particule existe au temps t serait toujours égale à un. Cependant, on suppose la particule instable et sa loi de désintégration suit une exponentielle : la probabilité que la particule existe encore au temps t est

$$p(t) = |c(t)|^2 = e^{-t/\tau}$$

où τ est la vie moyenne. Pour rendre compte de cette instabilité, on modifie $c(t)$

$$c(t) = \exp\left(-i\frac{mc^2t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{t}{2\tau}\right)$$

ce qui redonne bien la loi de probabilité expérimentale pour $p(t)$. Le prix à payer est l'utilisation d'une évolution non unitaire : la norme de $|\varphi(t)\rangle$ ne reste pas égale à l'unité. L'évolution unitaire a lieu dans l'espace particule+produits de désintégration (annexe C). La probabilité de désintégration par unité de temps est l'inverse de la vie moyenne et on définit Γ comme cette probabilité de désintégration

$$\Gamma = \frac{1}{\tau}$$

$\hbar\Gamma$ est la dispersion sur l'énergie. Dans ces conditions $c(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$i\hbar\dot{c}(t) = \left(mc^2 - i\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)c(t)$$

On se propose de généraliser cette description au cas d'un système à deux niveaux, le système des mésons K neutres. Il existe deux types de mésons K neutres¹⁸, le méson K^0 formé d'un quark d et d'un antiquark étrange $\bar{s}$, et le méson $\bar{K}^0$ formé d'un antiquark $\bar{d}$ et d'un quark étrange s . On rappelle que les charges des quarks u , d et s sont respectivement $2/3$, $-1/3$ et $-1/3$ en unité de la charge du proton. La production de ces mésons se fait par interaction forte, et cette interaction vérifie une loi de conservation analogue à celle de la charge électrique : le nombre de quarks étranges moins le nombre d'antiquarks étranges est conservé (de même que dans une réaction impliquant des électrons et des positrons, le nombre d'électrons moins le nombre de positrons est conservé par conservation de la charge électrique). Donnons quelques exemples : le méson π^+ est une combinaison $(u\bar{d})$, le méson π^- une combinaison $(\bar{u}d)$ et la particule Λ^0 une combinaison (uds) . Les réactions

$$\pi^- (\bar{u}d) + \text{proton } (uud) \rightarrow K^0(d\bar{s}) + \Lambda^0(uds)$$

ou

$$\bar{K}^0(\bar{d}s) + \text{proton } (uud) \rightarrow \pi^+(u\bar{d}) + \Lambda^0(uds)$$

sont permises, tandis que

$$\pi^- (\bar{u}d) + \text{proton } (uud) \rightarrow \bar{K}^0(\bar{d}s) + \Lambda^0(uds)$$

ou

$$K^0(d\bar{s}) + \text{proton } (uud) \rightarrow \pi^+(u\bar{d}) + \Lambda^0(uds)$$

sont interdites.

18. Il existe aussi deux mésons K chargés, le méson K^+ ($u\bar{s}$) et le méson K^- ($\bar{u}s$).

1. Le système $(K^0, \overline{K^0})$ est un système à deux niveaux dont le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ peut s'écrire

$$|\varphi(t)\rangle = c(t)|K^0\rangle + \bar{c}(t)|\overline{K^0}\rangle$$

dans la base $\{|K^0\rangle, |\overline{K^0}\rangle\}$. Les composantes du vecteur $|\varphi(t)\rangle$ obéissent à une équation d'évolution

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}(t) \\ \dot{\bar{c}}(t) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} c(t) \\ \bar{c}(t) \end{pmatrix}$$

où M est une matrice 2×2 . Soit $\mathcal{C}$ l'opérateur de « conjugaison de charge » qui échange particules et antiparticules¹⁹

$$\mathcal{C}|K^0\rangle = |\overline{K^0}\rangle \quad \mathcal{C}|\overline{K^0}\rangle = |K^0\rangle$$

Montrer que si M commute avec $\mathcal{C}$, sa forme la plus générale est

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}$$

où A et B sont *a priori* deux nombres complexes, car la matrice M n'est pas hermitique.

2. Quels sont les vecteurs propres $|K_1\rangle$ et $|K_2\rangle$ de M ? Montrer que ce sont ces deux états qui ont une énergie et une vie moyenne bien déterminées. Si au temps $t = 0$ $|\varphi(t)\rangle$ a pour composantes $c(0)$ et $\bar{c}(0)$, calculer $c(t)$ et $\bar{c}(t)$. On posera

$$A = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma_1 + \Gamma_2) \right]$$

$$B = \frac{1}{2} \left[(E_1 - E_2) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma_1 - \Gamma_2) \right]$$

3. On produit au temps $t = 0$ un méson K^0 dans la réaction

$$\pi^- (\bar{u}d) + \text{proton } (uud) \rightarrow K^0(d\bar{s}) + \Lambda^0(uds)$$

Quelle est la probabilité pour trouver un méson $\overline{K^0}$ au temps t^{20} ? En supposant $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$, montrer que la probabilité d'observer la réaction

$$\overline{K^0}(\bar{d}s) + \text{proton } (uud) \rightarrow \pi^+(u\bar{d}) + \Lambda^0(uds)$$

est proportionnelle pour $t \sim \tau_1 = 1/\Gamma_1$ à

$$p(t) = 1 - 2 \exp\left(-\frac{\Gamma_1 t}{2}\right) \cos\left[\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right] + \exp(-\Gamma_1 t)$$

19. On peut généraliser le raisonnement en utilisant au lieu de $\mathcal{C}$ le produit $\mathcal{CP}$, où $\mathcal{P}$ est l'opération parité. En fait l'expérience montre que $[M, \mathcal{CP}] \neq 0$, mais les corrections sont très faibles.

20. En pratique les mésons K se propagent en ligne droite à partir de leur point de production avec une vitesse proche de la vitesse de la lumière, et on se place à une distance $l \simeq ct$ du point de production.

Tracer la courbe représentative de $p(t)$. Que pensez-vous des ordres de grandeur respectifs de $(E_1 - E_2)$ et de E_1 ou E_2 ? Comment pourrait-on mesurer $(E_1 - E_2)$? Les valeurs numériques sont : $\tau_1 \simeq 0.89 \times 10^{-10}$ s, $\tau_2 \simeq 0.52 \times 10^{-7}$ s, $E_1 \simeq E_2 \simeq 500$ MeV, $E_1 - E_2 = 3.5 \times 10^{-12}$ MeV.

4.5 Bibliographie

Tout en y étant équivalente, notre présentation des postulats de la mécanique quantique s'écarte sensiblement des exposés classiques que l'on trouvera par exemple dans Messiah [1959], chapitre VIII, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre III, ou Basdevant et Dalibard [2000], chapitre 5. Le lecteur pourra aussi consulter Peres [1993], chapitre 2, Isham [1995], chapitre 5 et Omnès [1999]. Une discussion qualitative des inégalités de Heisenberg se trouve dans Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 3. La relation entre vie moyenne et largeur de raie est discutée dans l'appendice C, par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément D_{XIII} ou par Basdevant et Dalibard [2000], chapitre 17. On trouvera un article grand public de B. Mazoyer sur la RMN et l'IRM dans *Pour la Science* **302**, 42 (2002).

Chapitre 5

Systèmes à nombre de niveaux fini

CE CHAPITRE EXAMINE QUELQUES APPLICATIONS simples de la mécanique quantique, dans des situations où l'on obtient une bonne modélisation d'un système quantique en se restreignant à un espace des états de dimension finie. Si chaque niveau d'énergie, même dégénéré, est compté une fois, la dimension de $\mathcal{H}$ est égale au nombre de niveaux : c'est pourquoi on parle de *système à nombre de niveaux fini*. Les deux premiers exemples seront empruntés à la chimie quantique, et nous passerons ensuite à l'étude d'un système à deux niveaux, la molécule d'ammoniac, qui nous permettra d'introduire un exemple physiquement très important de hamiltonien dépendant du temps, typique de l'interaction d'un système atomique ou moléculaire avec un champ électromagnétique classique.

5.1 Chimie quantique élémentaire

5.1.1 Molécule d'éthylène

La molécule d'éthylène C_2H_4 servira d'introduction au sujet. L'« ossature » de cette molécule est formée par les liaisons dites *liaisons σ* : des paires d'électrons σ de spin opposé sont mises en commun entre les deux atomes de carbone ainsi qu'entre les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène, formant un ion $(C_2H_4)^{++}$ (figure 5.1). Il reste à placer deux électrons, appelés *électrons π* , qui sont mobiles : schématiquement ces deux électrons peuvent sauter d'un atome de carbone à l'autre. On dit qu'ils sont *délocalisés*. Le fait de traiter séparément électrons π et électrons σ est bien sûr une approximation, mais cette approximation joue un grand rôle dans la théorie de la liaison chimique. Commençons par placer le premier électron π . Celui-ci peut être localisé au voisinage de l'atome de carbone 1 ; l'état

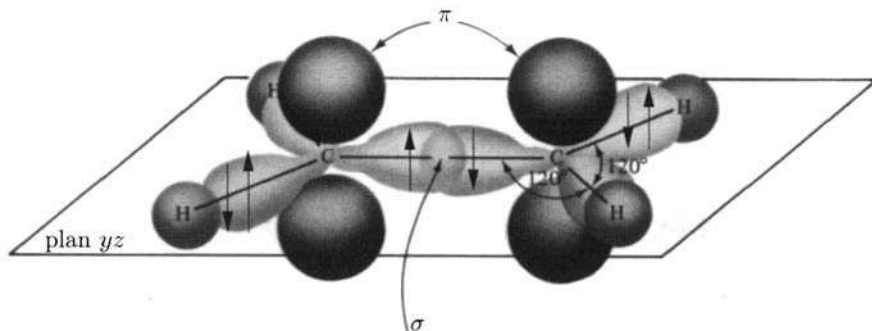
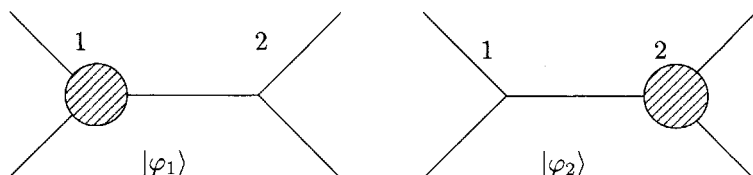


FIG. 5.1 – La molécule d'éthylène.

FIG. 5.2 – Les deux états possibles d'un électron π , localisés au voisinage de l'atome 1 ou de l'atome 2.

quantique correspondant¹ sera désigné par $|\varphi_1\rangle$. Il peut aussi être localisé au voisinage de l'atome de carbone 2, et l'état quantique correspondant sera désigné par $|\varphi_2\rangle$ (figure 5.2). L'énergie de cet électron localisé sur l'atome 1 ou l'atome 2 est E_0 , la même par symétrie entre les deux atomes. Nous allons prendre comme approximation de l'espace des états un espace à deux dimensions $\mathcal{H}$ dont les vecteurs de base sont $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$. Dans cette base, le hamiltonien s'écrit provisoirement

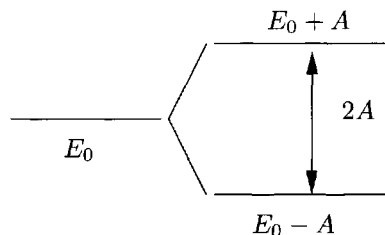
$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad H|\varphi_{1,2}\rangle = E_0|\varphi_{1,2}\rangle \quad (5.1)$$

Cependant cet hamiltonien est incomplet, car nous n'avons pas tenu compte de la possibilité pour l'électron de sauter d'un atome de carbone à l'autre. Dans le cadre de nos approximations, qui sont celles de la théorie des *orbitales moléculaires de Hückel*, la forme la plus générale de H est

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

et l'élément non diagonal $-A$ de H autorise précisément des transitions entre $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. Un choix adéquat de la phase des vecteurs de base nous a

1. La notation de Dirac est superflue dans ce chapitre. Nous l'avons conservée par souci de cohérence, mais le lecteur peut décider de s'en passer.

FIG. 5.3 – Niveaux d'énergie d'un électron π .

permis de prendre A réel : cf. § 2.3.2. Nous avons affecté A d'un signe $(-)$ qui n'est pas indifférent, car il est possible de montrer que $A > 0$.

Si $A \neq 0$, les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ ne sont plus des états stationnaires. Comme nous l'avons vu au § 2.3.2, les vecteurs propres de H sont maintenant

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$|\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

avec

$$H|\chi_+\rangle = (E_0 - A)|\chi_+\rangle \quad H|\chi_-\rangle = (E_0 + A)|\chi_-\rangle \quad (5.5)$$

Comme $A > 0$, l'état symétrique $|\chi_+\rangle$ est l'état d'énergie la plus basse. Le spectre du hamiltonien est donné sur la figure 5.3 : l'état fondamental est l'état $|\chi_+\rangle$, d'énergie $(E_0 - A)$. On peut donner une interprétation spatiale de ces résultats en examinant la localisation de l'électron sur la droite joignant les deux atomes de carbone prise comme axe des x , l'origine étant située au milieu de cette droite. Comme nous le verrons en détail au chapitre 9, si $|x\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur position, la quantité $\langle x|\varphi_1\rangle$ est l'amplitude de probabilité pour trouver au point x l'électron dans l'état $|\varphi_1\rangle$. Au chapitre 9, cette amplitude de probabilité sera appelée la *fonction d'onde* de l'électron. Le module au carré de cette amplitude de probabilité donne la probabilité² de trouver l'électron au point x , aussi appelée *probabilité de présence de l'électron au point x* . Cette interprétation a permis de représenter qualitativement sur la figure 5.4 les amplitudes de probabilité $\chi_{\pm}(x) = \langle x|\chi_{\pm}\rangle$ correspondant aux états $|\chi_{\pm}\rangle$. La probabilité de présence correspondante s'annule à l'origine dans le cas antisymétrique $|\chi_-\rangle$, mais non dans le cas symétrique $|\chi_+\rangle$. Le caractère symétrique ou antisymétrique de la fonction d'onde de l'état fondamental est lié au signe de A . En pratique, un état fondamental est toujours symétrique, ce qui correspond à $A > 0$.

2. Plus précisément, c'est une probabilité par unité de longueur : $|\langle x|\varphi\rangle|^2 dx$ est la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$: voir § 9.1.2.

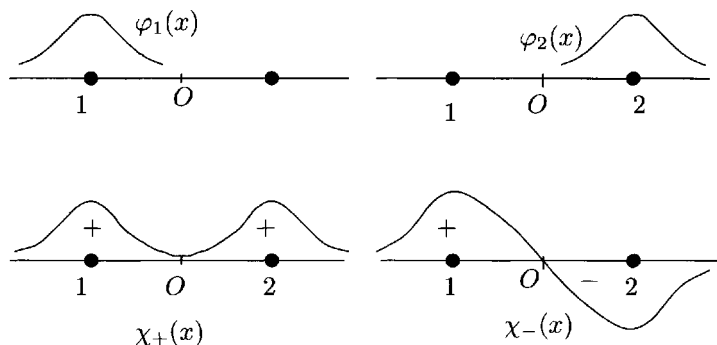


FIG. 5.4 – Amplitudes de probabilité pour trouver un électron π en un point x .

Il nous reste à placer le second électron : ceci se fera très simplement si nous pouvons ignorer les interactions entre cet électron et le précédent, c'est-à-dire utiliser l'approximation des électrons indépendants. Pour obtenir l'état fondamental, il suffit de placer le second électron dans l'état $|\chi_+\rangle$ d'énergie $(E_0 - A)$. Le principe de Pauli (chapitre 13) restreint alors les états de spin : si le premier électron a son spin up ($|+\rangle$), le second électron doit avoir son spin down ($|-\rangle$), ainsi que nous le verrons au chapitre 13. L'état fondamental de la liaison π est finalement $2(E_0 - A)$; $-2A$ est appelé *énergie de délocalisation* des électrons π . Il faut souligner le rôle crucial de l'*approximation des particules indépendantes* utilisée dans le raisonnement ci-dessus : les électrons π n'interagissent pas avec les électrons σ et n'interagissent pas entre eux. Cette modélisation est difficile à justifier à partir des principes fondamentaux, ou de ce que l'on appelle aujourd'hui des calculs *ab initio*, mais elle se révèle d'un intérêt pratique considérable.

5.1.2 Molécule de benzène

Dans la molécule de benzène, l'ossature σ de l'ion $(C_6H_6)^{6+}$ forme un hexagone. Si l'on rajoute les six électrons π de façon à former trois doubles liaisons, on obtient la formule de Kékulé (figure 5.5a), et on prédit une énergie $6(E_0 - A)$ pour l'état fondamental. On sait par un raisonnement de chimie que la formule de Kékulé ne peut pas être tout à fait correcte³, et nous allons effectivement voir que tenir compte de la délocalisation des électrons π tout au long de la chaîne hexagonale conduit à une énergie plus basse que $6(E_0 - A)$: la formule de Kékulé ne donne pas correctement l'énergie de l'état fondamental. Examinons pour commencer l'addition d'un

3. Par exemple, il existe une seule forme d'orthodibromobenzène, alors que la formule de Kékulé en prévoit deux différentes. On peut aussi remarquer que la longueur de la liaison entre deux atomes de carbone dans le benzène (1.40 Å) est intermédiaire entre une simple (1.54 Å) et une double (1.35 Å) liaison.

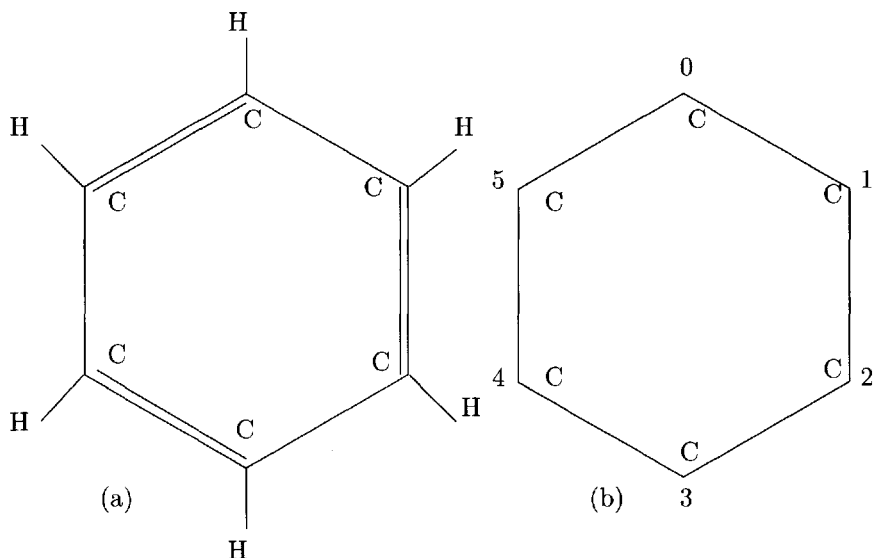


FIG. 5.5 – (a) Configuration hexagonale d'une molécule de benzène. (b) Ossature des électrons σ .

seul électron, et numérotions⁴ de 0 à 5 les atomes de carbone le long de la chaîne hexagonale en prenant une origine arbitraire (figure 5.5b). Nous notons $|\varphi_3\rangle$ par exemple l'état où l'électron est localisé au voisinage de l'atome n° 3. Comme il n'est pas plus difficile de traiter un nombre quelconque N d'atomes de carbone formant une chaîne fermée, c'est-à-dire un polygone régulier à N côtés, nous notons $|\varphi_n\rangle$ l'état où l'électron est localisé au voisinage de l'atome n° n , $n = 0, 1, \dots, N-1$, en prenant $N = 6$ pour le benzène. Les atomes n et $n + N$ sont identiques : $n \equiv n + N$. L'espace des états est à N dimensions, et le hamiltonien est défini par son action sur $|\varphi_n\rangle$

$$H|\varphi_n\rangle = E_0|\varphi_n\rangle - A(|\varphi_{n-1}\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle) \quad (5.6)$$

Pour trouver les valeurs propres et vecteurs propres de H , nous allons exploiter la symétrie du problème sous toute permutation circulaire des N atomes de la chaîne. Soit U_P l'opérateur unitaire qui effectue une permutation circulaire des atomes dans le sens $n \rightarrow (n-1)$

$$U_P|\varphi_n\rangle = |\varphi_{n-1}\rangle \quad U_P^\dagger|\varphi_n\rangle = U_P^{-1}|\varphi_n\rangle = |\varphi_{n+1}\rangle \quad (5.7)$$

D'après (5.6) et (5.7) nous pouvons écrire le hamiltonien sous la forme

$$H = E_0I - A(U_P + U_P^\dagger) \quad (5.8)$$

4. Comme nous le verrons dans un instant, il est plus commode de numérotier de 0 à 5 que de 1 à 6 !

ce qui implique que H et U_P commutent

$$[H, U_P] = 0 \quad (5.9)$$

et ont une base de vecteurs propres communs. Cherchons les vecteurs propres et valeurs propres de U_P , qui est *a priori* un opérateur plus simple que H . Comme U_P est unitaire, ses valeurs propres sont de la forme $\exp(i\delta)$ (cf. § 2.3.4). Comme $(U_P)^N = I$, on doit avoir $\exp(iN\delta) = 1$, et par conséquent les valeurs propres sont indicées par un indice entier s

$$\delta = \delta_s = \frac{2\pi s}{N} \quad s = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5.10)$$

Nous avons donc déterminé N valeurs propres distinctes de U_P . Comme U_P agit dans un espace de dimension N , les vecteurs propres correspondants sont orthogonaux et forment une base de $\mathcal{H}$. Écrivons un vecteur propre normalisé $|\chi_s\rangle$ sous la forme

$$|\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\varphi_n\rangle \quad \sum_{n=0}^{N-1} |c_n|^2 = 1 \quad (5.11)$$

Nous avons d'une part

$$U_P |\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\varphi_{n-1}\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_{n+1} |\varphi_n\rangle$$

et d'autre part

$$U_P |\chi_s\rangle = e^{i\delta_s} |\chi_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\delta_s} c_n |\varphi_n\rangle$$

L'identification des coefficients de $|\varphi_n\rangle$ dans ces deux équations conduit à

$$c_{n+1} = e^{i\delta_s} c_n \quad \text{soit} \quad c_n = e^{in\delta_s} c_0$$

Ceci donne pour le vecteur propre correspondant à la valeur propre $\exp(i\delta_s)$

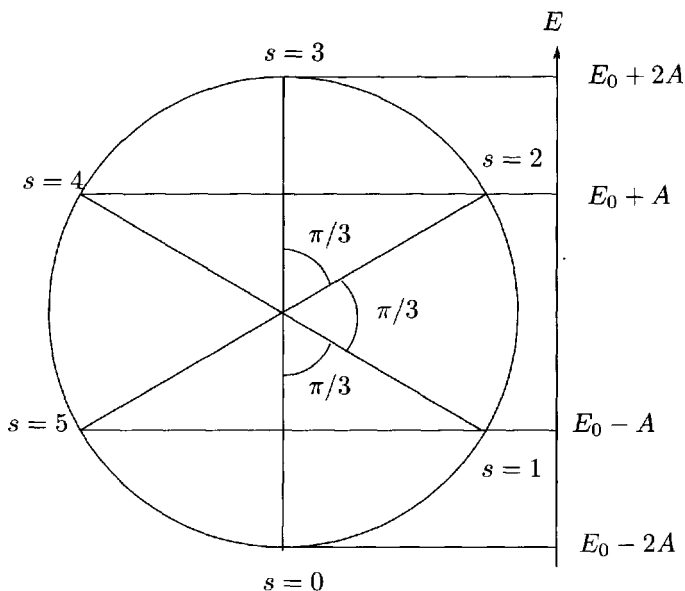
$$|\chi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{in\delta_s} |\varphi_n\rangle \quad (5.12)$$

Le choix $c_0 = 1/\sqrt{N}$ assure la normalisation de $|\chi_s\rangle$. Compte tenu de l'expression (5.8) de H , la valeur propre E_s est donnée par

$$E_s = E_0 - A \left(e^{i\delta_s} + e^{-i\delta_s} \right) = E_0 - 2A \cos \delta_s$$

soit (figure 5.6)

$$E_s = E_0 - 2A \cos \frac{2\pi s}{N} \quad (5.13)$$

FIG. 5.6 – Niveaux d'énergie d'un électron π de la molécule de benzène.

Nous aurions pu arriver directement à (5.13) sans passer par l'intermédiaire de l'opérateur de permutation circulaire U_P . Néanmoins ce passage par U_P illustre une stratégie générale et non une « astuce de calcul ». Nous aurons souvent à mettre en œuvre cette stratégie, car elle simplifie, et parfois de façon considérable, la diagonalisation du hamiltonien : au lieu de diagonaliser directement H , on diagonalise d'abord les opérateurs de symétrie unitaires qui commutent avec H , lorsque de tels opérateurs existent en raison d'une symétrie du problème physique.

On remarque que les valeurs s et $\tilde{s} = N - s$ donnent les mêmes valeurs de l'énergie : en dehors de $s = 0$ et $s = N - 1$ (pour N pair), les niveaux d'énergie sont deux fois dégénérés. Il est possible d'écrire les vecteurs propres de H avec des composantes réelles en prenant des combinaisons linéaires de $|\chi_s\rangle$ et $|\chi_{\tilde{s}}\rangle$

$$|\chi_s^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi_s\rangle + |\chi_{\tilde{s}}\rangle) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \cos \frac{2\pi ns}{N} |\varphi_n\rangle \quad (5.14)$$

$$|\chi_s^-\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}} (|\chi_s\rangle - |\chi_{\tilde{s}}\rangle) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \sin \frac{2\pi ns}{N} |\varphi_n\rangle \quad (5.15)$$

Nous pouvons maintenant rassembler les résultats pour les valeurs propres de H et les vecteurs propres correspondants dans le cas du benzène : $N = 6$,

$\cos(2\pi/6) = 1/2$, $\sin(2\pi/6) = \sqrt{3}/2$ (figure 5.6)

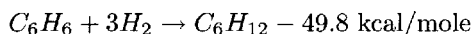
$$\begin{aligned}
 s &= 0 & E &= E_0 - 2A \\
 |\chi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
 s &= 1, \tilde{s} = 5 & E &= E_0 - A \\
 |\chi_1^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & |\chi_1^-\rangle &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\
 s &= 2, \tilde{s} = 4 & E &= E_0 + A \\
 |\chi_2^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) & |\chi_2^-\rangle &= \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\
 s &= \tilde{s} = 3 & E &= E_0 + 2A \\
 |\chi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (1, -1, 1, -1, 1, -1)
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Cherchons maintenant l'état fondamental, c'est-à-dire l'état de plus basse énergie, en plaçant les six électrons π délocalisés. À l'approximation des électrons indépendants, cet état sera obtenu en mettant d'abord deux électrons de spin opposé dans le niveau $E_0 - 2A$, le principe de Pauli (chapitre 13) nous interdisant d'y mettre d'autres électrons. Le niveau $(E_0 - A)$ étant doublement dégénéré, nous pouvons y mettre quatre électrons (deux paires d'électrons de spin opposé) ce qui donne une énergie totale

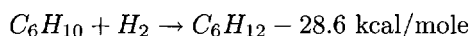
$$E = 2(E_0 - 2A) + 4(E_0 - A) = 6E_0 - 8A \tag{5.17}$$

Cette énergie est inférieure de $2A$ à celle $(6E_0 - 6A)$ de la formule de Kékulé : les électrons π du benzène ne sont pas localisés sur des doubles liaisons, mais ils sont délocalisés le long de l'ensemble de la chaîne hexagonale, et cette forme de délocalisation diminue l'énergie de $2A$.

La comparaison entre la chaleur⁵ d'hydrogénation du benzène en cyclohexane



et celle du cyclohexène, qui contient une seule double liaison



permet d'estimer $2A$: $2A = 3 \times 28.6 - 49.8 = 36 \text{ kcal/mole} \simeq 1.6 \text{ eV}$. Cependant cette estimation est au mieux un ordre de grandeur, car elle est sujette à des incertitudes difficiles à apprécier. Elles sont dues à l'approximation des électrons indépendants, qui est loin d'être bien contrôlée.

5. Pour les puristes : il s'agit en fait d'une variation d'enthalpie, mais la différence est négligeable.

5.2 Système à deux niveaux dans un champ extérieur

L'objectif principal de cette section est l'étude de l'interaction d'un système simple, en l'occurrence un système à deux niveaux, avec un champ extérieur, et en particulier un champ oscillant. La molécule d'ammoniac offre un exemple concret d'un tel système, que nous allons utiliser pour introduire le sujet.

5.2.1 La molécule d'ammoniac comme système à deux niveaux

La molécule d'ammoniac a une forme pyramidale, où l'atome d'azote occupe le sommet de la pyramide et où les trois atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral qui constitue la base de la pyramide (figure 5.7). Les mouvements possibles de cette molécule sont très variés : elle peut effectuer des mouvements de translation et de rotation dans l'espace, les atomes peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre, les électrons peuvent se trouver dans des états excités. Une fois fixés les degrés de liberté de translation, rotation et vibration pour la molécule dans son état fondamental électronique, il reste encore deux configurations possibles pour la molécule

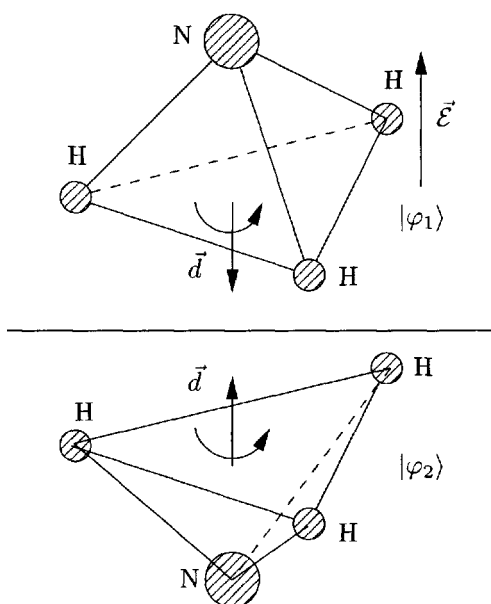


FIG. 5.7 – Les deux configurations de la molécule d'ammoniac.

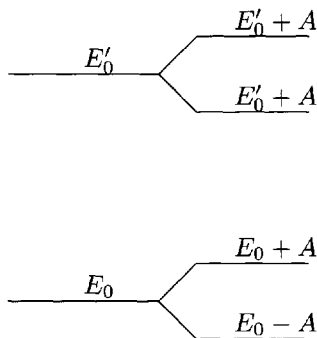
en rotation⁶ autour de son axe de symétrie, qui sont symétriques l'une de l'autre par réflexion par rapport à un plan (figure 5.7). Pour passer d'une configuration à l'autre, l'atome d'azote doit traverser le plan des atomes d'hydrogène. Ceci est possible grâce à un effet tunnel, que nous expliquerons au § 9.4.2. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser *uniquement* à ces deux configurations, ce qui est justifié en raison des énergies mises en jeu (*cf.* la note 7). Comme dans le cas de la molécule d'éthylène, nous utiliserons pour décrire ces deux configurations un espace des états à deux dimensions : la molécule dans l'état 1 (resp. 2) de la figure 5.7 sera décrite par le vecteur de base $|\varphi_1\rangle$ (resp. $|\varphi_2\rangle$). Si l'atome d'azote ne pouvait jamais franchir le plan des atomes d'hydrogène, l'énergie des états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ serait identique, égale à E_0 . Mais il existe une amplitude non nulle pour franchir ce plan, et le hamiltonien prend la forme (5.2)

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

avec bien sûr des valeurs de E_0 et A différentes de celles de la section précédente. La valeur de E_0 n'est pas importante pour notre discussion. En revanche, il vaut la peine d'observer que la valeur de A dans (5.18) diffère de celle de (5.2) par plusieurs ordres de grandeur. En effet, nous avons maintenant $2A \simeq 10^{-4}$ eV, alors que précédemment $2A$ était de l'ordre de 1 eV : ceci reflète le fait qu'il est facile à un électron π de sauter d'un atome à l'autre, alors qu'il est très difficile à l'atome d'azote de franchir le plan des atomes d'hydrogène. Cette énergie de 10^{-4} eV correspond à une fréquence de 24 GHz, ou à une longueur d'onde de 1.25 cm, dans le domaine des ondes centimétriques. Elle est très faible par rapport aux énergies d'excitation des électrons (quelques eV), faible par rapport aux énergies de vibration (~ 0.1 eV) et même de rotation⁷ ($\sim 10^{-3}$ eV). Cette comparaison justifie l'approximation par un système à deux niveaux, car la différence entre deux niveaux de rotation successifs est de l'ordre de $10A$ (figure 5.8). Cependant la molécule n'est pas dans son niveau de rotation fondamental, car $k_B T \sim 0.025$ eV est grand par rapport à $\sim 10^{-3}$ eV : les niveaux de rotation sont thermiquement excités.

6. L'importance de cette rotation pour générer deux configurations différentes est soulignée par Feynman ; dans les exposés qui ont repris ultérieurement sa présentation originale, ce mouvement de rotation a souvent été oublié. Mais si cette rotation est absente, on passe continûment d'une configuration à l'autre par une rotation dans l'espace !

7. La molécule d'ammoniac possède deux fréquences propres de rotation, dont une dégénérée, correspondant à des énergies de 0.8×10^{-3} eV et de 1.2×10^{-3} eV (dégénérée), et quatre modes de vibration dont deux dégénérés, l'énergie la plus faible étant de 0.12 eV. De plus, il faudrait tenir compte des complications dues à la structure hyperfine.

FIG. 5.8 – Clivage de deux niveaux E_0 et E'_0 .

Suivant la discussion du § 5.1.1, les niveaux d'énergie de H sont $E_0 \mp A$, correspondant aux états stationnaires (5.2) et (5.3)

$$E_0 - A : |\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

$$E_0 + A : |\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

L'état symétrique $|\chi_+\rangle$ est l'état fondamental, d'énergie $(E_0 - A)$ et l'état antisymétrique $|\chi_-\rangle$ est l'état excité, d'énergie $(E_0 + A)$.

5.2.2 La molécule dans un champ électrique

La molécule d'ammoniac possède un moment dipolaire électrique $\vec{d}$ qui, par symétrie, est perpendiculaire au plan des atomes d'hydrogène. Comme les atomes d'hydrogène ont tendance à perdre leurs électrons et l'atome d'azote à les attirer, ce moment dipolaire est orienté de l'atome d'azote vers le plan des atomes d'hydrogène (figure 5.7). Plaçons la molécule dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ dirigé suivant Oz . L'énergie d'un dipôle classique $\vec{d}$ dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ (nous utilisons une lettre calligraphiée pour le champ électrique, afin d'éviter toute confusion avec l'énergie) est

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad (5.21)$$

En mécanique quantique, le moment dipolaire est un opérateur $\vec{D}$, qui s'exprime en fonction des charges et des opérateurs position des différentes particules chargées. Nous admettrons que la restriction de $\vec{D}$ à notre sous-espace à deux dimensions est donnée par la matrice suivante dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$

$$-\vec{D} \rightarrow \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix} \quad -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}} \rightarrow \begin{pmatrix} d\mathcal{E} & 0 \\ 0 & -d\mathcal{E} \end{pmatrix}$$

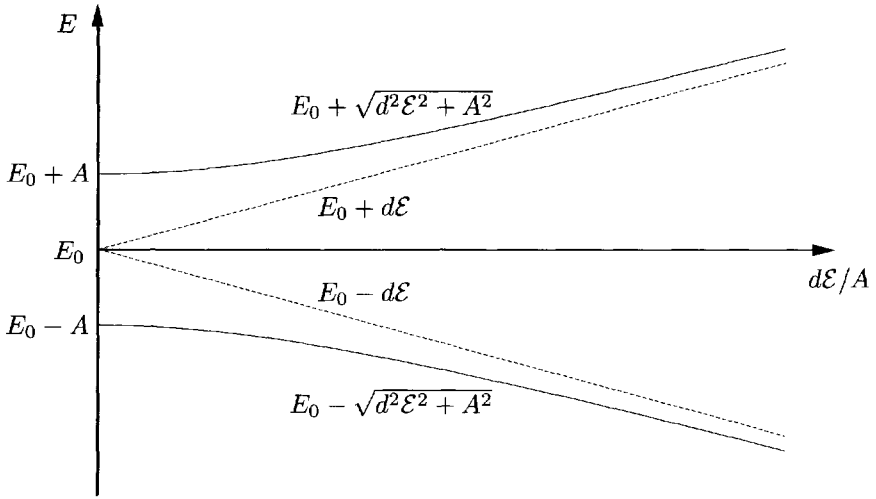


FIG. 5.9 – Valeurs de l'énergie en fonction du champ électrique $\mathcal{E}$.

Ceci correspond bien au schéma de la figure 5.7 : en effet, l'énergie de l'état $|\varphi_1\rangle$ de la figure 5.7 est $+d\mathcal{E}$ car le moment dipolaire est antiparallèle au champ, et celle de l'état $|\varphi_2\rangle$ est $-d\mathcal{E}$ car le moment dipolaire est parallèle au champ. En dernier ressort, la forme matricielle de ce moment dipolaire est justifiée par l'accord avec l'expérience. Le hamiltonien prend donc la forme

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + d\mathcal{E} & -A \\ -A & E_0 - d\mathcal{E} \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

Nous examinons d'abord le cas d'un champ électrique *statique*. Le hamiltonien est alors indépendant du temps. Le calcul des valeurs propres est immédiat⁸

$$\det \begin{pmatrix} E_0 + d\mathcal{E} - E & -A \\ -A & E_0 - d\mathcal{E} - E \end{pmatrix} = (E - E_0)^2 - (d\mathcal{E})^2 - A^2 = 0$$

soit

$$E_{\pm} = E_0 \mp \sqrt{A^2 + (d\mathcal{E})^2} \quad (5.23)$$

Ces valeurs propres sont représentées sur la figure 5.9 en fonction de $\mathcal{E}$. Si $d\mathcal{E} \gg A$, les énergies sont $\simeq E_0 \pm d\mathcal{E}$ et les vecteurs propres correspondants approximativement $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. En pratique, on se trouve dans le cas opposé : $d\mathcal{E} \ll A$. On peut alors développer la racine carrée dans (5.23)

$$E_{\pm} \simeq E_0 \mp A \mp \frac{1}{2} \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{A} \quad (5.24)$$

8. On peut aussi utiliser les résultats du § 2.3.2.

À des termes d'ordre $d\mathcal{E}/(2A)$ près (cf. exercice 5.3.4), les vecteurs propres sont $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$. Si le champ électrique n'est pas uniforme, la molécule sera soumise à une force

$$\vec{F}_{\pm} = -\vec{\nabla}E_{\pm} = \pm \frac{d^2}{2A} \vec{\nabla}\mathcal{E}^2 \quad (5.25)$$

Comme dans l'expérience de Stern-Gerlach, on pourra séparer expérimentalement les états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ du hamiltonien (5.18) en utilisant un champ électrique inhomogène⁹ : voir la figure 5.10.

Supposons maintenant que le champ électrique est un champ *oscillant*

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad \mathcal{E}_0 \text{ réel} > 0 \quad (5.26)$$

Le hamiltonien dépend explicitement du temps. Il sera commode de prendre comme vecteurs de base les états stationnaires (5.20) $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$ du hamiltonien (5.18), plutôt que $|\varphi_+\rangle$ et $|\varphi_-\rangle$. Le hamiltonien (5.22) devient dans cette nouvelle base

$$H(t) = \begin{pmatrix} E_0 - A & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & E_0 + A \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Écrivons un vecteur d'état général dépendant du temps sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|\chi_+\rangle + c_-(t)|\chi_-\rangle \quad (5.28)$$

Les équations d'évolution (4.13) sont

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_+}{dt} &= (E_0 - A)c_+ + d\mathcal{E}(t)c_- \\ i\hbar \frac{dc_-}{dt} &= d\mathcal{E}(t)c_+ + (E_0 + A)c_- \end{aligned} \quad (5.29)$$

Grâce à notre choix de vecteurs de base, lorsque $\vec{\mathcal{E}} = 0$

$$c_+(t) = \gamma_+ \exp(-i\omega_+ t) \quad c_-(t) = \gamma_- \exp(-i\omega_- t)$$

où $\omega_+ = (E_0 - A)/\hbar$, $\omega_- = (E_0 + A)/\hbar$, γ_+ et γ_- sont des constantes. Il sera commode de poser $\omega_0 = 2A/\hbar$, qui représente physiquement la fréquence angulaire $\simeq 1.5 \times 10^{12} \text{ rad.s}^{-1}$ d'une onde électromagnétique émise lorsque la molécule passe du niveau excité d'énergie $(E_0 + A)$ au niveau fondamental d'énergie $(E_0 - A)$: $2A$ est l'énergie du photon émis dans cette transition. La fréquence ω_0 est appelée *fréquence de résonance*.

Lorsque $\mathcal{E}_0 \neq 0$, nous pouvons écrire comme précédemment

$$c_+(t) = \gamma_+(t) \exp(-i\omega_+ t) \quad c_-(t) = \gamma_-(t) \exp(-i\omega_- t)$$

9. En pratique le champ est choisi tel que l'état $|\chi_-\rangle$ soit focalisé et l'état $|\chi_+\rangle$ défocalisé : cf. Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 6.

à la différence près que les coefficients $\gamma_{\pm}$ ne sont plus des constantes : ce sont maintenant des fonctions du temps, ce qui nous donne

$$i\hbar \frac{dc_{\pm}}{dt} = \hbar \left(\omega_{\pm} \gamma_{\pm} + i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} \right) \exp(-i\omega_{\pm}t)$$

et en reportant dans (5.29)

$$\begin{aligned} i \frac{d\gamma_{+}}{dt} &= \frac{d\mathcal{E}(t)}{\hbar} \exp(-i\omega_0 t) \gamma_{-}(t) \\ i \frac{d\gamma_{-}}{dt} &= \frac{d\mathcal{E}(t)}{\hbar} \exp(i\omega_0 t) \gamma_{+}(t) \end{aligned} \quad (5.30)$$

On obtient un système d'équations différentielles couplées : le champ électrique induit des transitions de l'état $|\chi_{+}\rangle$ vers l'état $|\chi_{-}\rangle$ et réciproquement. Introduisons maintenant la forme (5.26) du champ électrique dans (5.30)

$$\begin{aligned} i \frac{d\gamma_{+}}{dt} &= \frac{d\mathcal{E}_0}{2\hbar} \left(\exp[i(\omega - \omega_0)t] + \exp[-i(\omega + \omega_0)t] \right) \gamma_{-}(t) \\ i \frac{d\gamma_{-}}{dt} &= \frac{d\mathcal{E}_0}{2\hbar} \left[\exp(i(\omega + \omega_0)t] + \exp[-i(\omega - \omega_0)t] \right) \gamma_{+}(t) \end{aligned} \quad (5.31)$$

Ces équations sont exactes, mais ne peuvent pas être résolues analytiquement. Nous allons obtenir une solution approchée en supposant d'abord que la perturbation apportée par le champ électrique est faible : $d\mathcal{E}_0 \ll A$, ou de façon équivalente, $d\mathcal{E}_0/\hbar \ll \omega_0$. La quantité $\omega_1 = d\mathcal{E}_0/\hbar$ est appelée *fréquence de Rabi*¹⁰. La condition précédente est donc aussi $\omega_1 \ll \omega_0$, ce qui est – presque – toujours réalisé en pratique. Dans ces conditions, les fonctions $\gamma_{\pm}(t)$ sont lentement variables sur un temps caractéristique ω_0^{-1}

$$\left| \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} \right| \sim \omega_1 |\gamma_{\mp}| \ll \omega_0 |\gamma_{\mp}|$$

La deuxième hypothèse nécessaire pour une résolution approchée simple de (5.31) est que la fréquence du champ électrique soit proche de la résonance : $\omega \simeq \omega_0$. La quantité $\delta = (\omega - \omega_0)$ est appelée le *désaccord*. La condition précédente s'écrit plus précisément $|\delta| \ll \omega_0$. Dans ces conditions, les termes en

$$\exp(\pm i(\omega + \omega_0)t) \sim \exp(\pm 2i\omega_0 t)$$

de (5.31) varient très rapidement par rapport aux termes en

$$\exp(\pm i(\omega - \omega_0)t) \sim \exp(\pm i\delta t)$$

10. Introduite pour la première fois par Rabi dans le cas de la RMN : cf. l'exercice 4.3.5. Il existe une étroite parenté entre les équations de ce chapitre et celles de la RMN.

et leur effet moyenné dans le temps est négligeable. En omettant ces termes¹¹, nous obtenons finalement le système d'équations couplées

$$\begin{aligned} i \frac{d\gamma_+}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} \exp[i(\omega - \omega_0)t] \gamma_-(t) \\ i \frac{d\gamma_-}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} \exp[-i(\omega - \omega_0)t] \gamma_+(t) \end{aligned} \quad (5.32)$$

Ce système d'équations différentielles couplées, équivalent à celui de la RMN, est maintenant soluble analytiquement : voir l'annexe B.2 pour une solution explicite. Soulignons à nouveau que les deux conditions $\omega_1 \ll \omega_0$ et $|\delta| \ll \omega_0$ sont indispensables pour justifier le passage de (5.31) à (5.32).

5.2.3 Transitions à la résonance et maser

Nous nous plaçons exactement à la résonance en prenant la fréquence du champ électrique égale à la fréquence de la transition : $\omega = \omega_0$. Les équations (5.32) se simplifient

$$i \frac{d\gamma_+}{dt} = \frac{\omega_1}{2} \gamma_-(t) \quad i \frac{d\gamma_-}{dt} = \frac{\omega_1}{2} \gamma_+(t) \quad (5.33)$$

ce qui donne, en différenciant une des équations par rapport au temps et en reportant la seconde équation dans le résultat

$$\frac{d^2\gamma_{\pm}}{dt^2} = -\left(\frac{\omega_1}{2}\right)^2 \gamma_{\pm}(t) = -\frac{1}{4} \omega_1^2 \gamma_{\pm}(t) \quad (5.34)$$

Cette équation s'intègre immédiatement. La solution dépend de deux constantes a et b , $|a|^2 + |b|^2 = 1$, liées aux conditions initiales

$$\begin{aligned} \gamma_+(t) &= a \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + b \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \\ \gamma_-(t) &= -ia \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + ib \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.35)$$

Supposons par exemple qu'au temps $t = 0$ la molécule se trouve dans l'état $|\chi_-\rangle$, d'énergie $(E_0 + A)$: $a = 0$, $b = 1$. Au temps t , la probabilité $p_{\pm}$ de trouver la molécule dans l'état $|\chi_{\pm}\rangle$ sera

$$\begin{aligned} p_-(t) &= |\langle \chi_- | \psi(t) \rangle|^2 = |\gamma_-(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \\ p_+(t) &= |\langle \chi_+ | \psi(t) \rangle|^2 = |\gamma_+(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.36)$$

11. Cette approximation est appelée approximation des ondes tournantes, ou approximation quasi-résonante.

La molécule passe de l'état $|\chi_{-}\rangle$ à l'état $|\chi_{+}\rangle$ avec une fréquence angulaire $\omega_1/2 = d\mathcal{E}_0/(2\hbar)$.

Après avoir mis la molécule dans l'état $|\chi_{-}\rangle$ grâce au filtrage décrit dans la sous-section précédente, on la fait passer dans une cavité où règne un champ oscillant à la fréquence de résonance (figure 5.10). La molécule franchit la cavité en un temps T ; si ce temps est ajusté de sorte que

$$\frac{d\mathcal{E}_0 T}{2\hbar} = \frac{\pi}{2}$$

à la sortie de la cavité toutes les molécules sont passées dans l'état $|\chi_{+}\rangle$. Par conservation de l'énergie, les molécules fournissent de l'énergie au champ électromagnétique : ce processus est appelé *émission stimulée (ou induite)*. Si les molécules avaient été dans l'état $|\chi_{+}\rangle$, elles auraient absorbé de l'énergie en l'empruntant au champ électromagnétique pour passer dans l'état $|\chi_{-}\rangle$, processus appelé *absorption stimulée*.

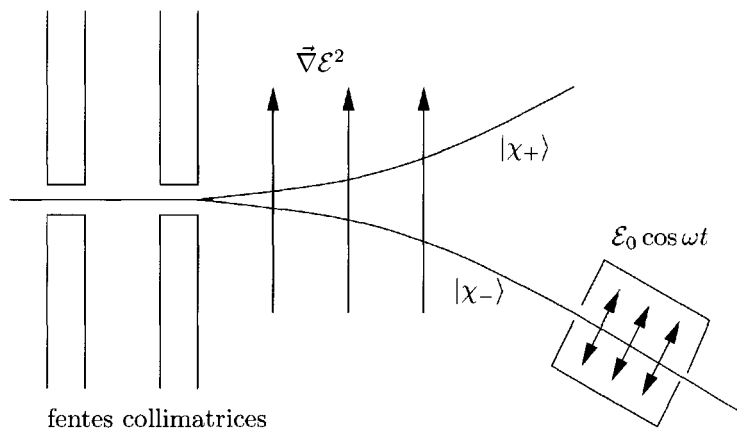


FIG. 5.10 – Maser à ammoniac.

Le processus d'émission stimulée est un processus susceptible d'amplifier un champ électromagnétique, pourvu que l'on soit capable de produire les molécules dans un état excité, c'est-à-dire d'obtenir une *inversion de population*¹². Le dispositif expérimental représenté schématiquement sur la figure 5.10 réalise cette amplification : les molécules sélectionnées dans l'état $|\chi_{-}\rangle$ traversent une cavité où règne un champ électrique oscillant à la fréquence de résonance et de longueur convenablement ajustée. Ce dispositif est un prototype de maser¹³.

12. Si E_0 est l'énergie de l'état fondamental et E_1 celle de l'état excité, le rapport des probabilités p_1/p_0 de trouver un système atomique ou moléculaire dans un état E_1 ou E_0 est donné par la loi de Boltzmann : $p_1/p_0 = \exp[(E_0 - E_1)/k_B T] < 1$. Il faut donc aller à l'encontre de l'équilibre thermique pour obtenir une telle inversion de population.

13. Maser est un acronyme pour « Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation » et laser pour « Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation ».

5.2.4 Transitions hors résonance

Nous nous plaçons maintenant hors résonance : $\omega \simeq \omega_0$ mais $\omega \neq \omega_0$, et nous partons par exemple au temps $t = 0$ d'une molécule dans l'état $|\chi_+\rangle$. Nous souhaitons calculer la probabilité $p(\omega; t)$ de trouver la molécule dans l'état $|\chi_-\rangle$ au temps t . La résolution exacte des équations (5.32) (annexe B.2) donne le résultat

$$p(\omega; t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \right) \quad (5.37)$$

Rappelons que la fréquence de Rabi $\omega_1 = d\mathcal{E}_0/\hbar$. Ce comportement oscillant déjà mis en évidence à la résonance est connu sous le nom *d'oscillations de Rabi* : un comportement analogue a été trouvé dans l'exercice 4.3.5 sur la résonance magnétique nucléaire. L'équation (5.37) montre que l'amplitude des oscillations est maximale à la résonance. Nous allons donner une solution approchée simple de (5.32) lorsque la condition

$$\frac{d\mathcal{E}_0 t}{\hbar} \ll 1 \quad t \ll \frac{\hbar}{d\mathcal{E}_0} = \tau_2 \quad (5.38)$$

est satisfaite, c'est-à-dire pour des temps suffisamment courts. L'intérêt de cette solution approchée est qu'elle se retrouve dans de nombreux problèmes et elle sera généralisée au chapitre 9. Nous avons à $t = 0$

$$\gamma_+ = 1 \quad \gamma_- = 0$$

Nous nous intéressons à un processus où l'absorption de rayonnement électromagnétique permet de passer du niveau fondamental au niveau excité. Dans la résolution de la seconde des équations (5.32), nous pouvons supposer $\gamma_+ \simeq 1$: en effet, en raison de la condition (5.38), γ_+ n'a pas le temps de varier de façon appréciable. La solution approximative de l'équation donnant γ_- est alors évidente

$$\gamma_-(t) \simeq \frac{\omega_1}{2i} \int_0^t dt' \exp[-i(\omega - \omega_0)t'] = -\frac{\omega_1}{2} \left[\frac{1 - \exp[-i(\omega - \omega_0)t]}{\omega - \omega_0} \right] \quad (5.39)$$

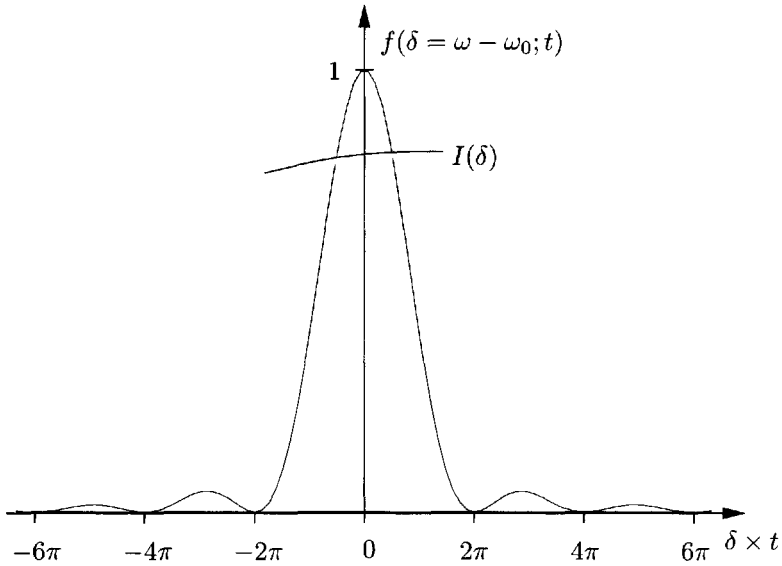
ce qui donne pour la probabilité de transition à une fréquence ω , $p(\omega; t)$

$$p(\omega; t) = |\gamma_-(t)|^2 = \frac{1}{4} \omega_1^2 t^2 \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \quad (5.40)$$

Le rapport entre ce résultat et celui obtenu à la résonance est

$$\frac{p(\omega; t)}{p(\omega_0; t)} = f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2}$$

La fonction $f(\omega - \omega_0; t)$ est tracée sur la figure 5.11 en fonction de ω . Elle

FIG. 5.11 – La fonction $f(\omega - \omega_0; t)$.

présente un pic aigu à $\omega = \omega_0$, de largeur $\sim 2\pi/t$. Compte tenu de

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$$

l'aire sous la courbe est $2\pi/t$ et $f(\omega - \omega_0; t)$ est approximativement un delta de Dirac

$$f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \simeq \frac{2\pi}{t} \delta(\omega - \omega_0) \quad (5.41)$$

Ces résultats nous permettent de calculer le taux de transition de l'état $|\chi_+\rangle$ vers l'état $|\chi_-\rangle$ dû à l'absorption de rayonnement électromagnétique par la molécule dans son état fondamental¹⁴. Le flux d'énergie incident $\mathcal{I}$ d'une onde électromagnétique est donné par le vecteur de Poynting $\vec{\mathcal{S}} = \varepsilon_0 c^2 \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}$

$$\mathcal{I} = \varepsilon_0 c^2 \langle \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}} \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \mathcal{E}_0^2 \quad (5.42)$$

où $\langle \bullet \rangle$ représente une moyenne temporelle et le champ électrique est de la forme (5.26). Dans ces conditions

$$p(\omega; t) = \left(\frac{d\mathcal{E}_0}{2\hbar} \right)^2 t^2 f(\omega - \omega_0; t) = 2\pi \left(\frac{d^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 c} \right) \mathcal{I} t^2 f(\omega - \omega_0; t) \quad (5.43)$$

14. Plus précisément, il s'agit de l'ensemble des transitions d'énergie $(E_0 - A)$ à $(E_0 + A)$ (figure 5.8), ce qui suppose de sélectionner les molécules dans l'état $(E_0 - A)$ par le mécanisme décrit au § 5.2.2.

En pratique, la fréquence du champ électrique n'est pas exactement fixée, mais s'étale sur un spectre de fréquences $\Delta\omega$. Soit $\mathcal{I}(\omega)$ l'intensité par unité de fréquence et supposons que $\Delta\omega \gg \pi/t$ (figure 5.11) : la probabilité de transition intégrée sur ω est alors

$$\begin{aligned} p(t) &= 2\pi \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2c} \right) t^2 \int_0^\infty d\omega \mathcal{I}(\omega) f(\omega - \omega_0; t) \\ &\simeq 4\pi^2 \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) t \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'approximation (5.41) pour $f(\omega - \omega_0; t)$. Le fait remarquable est que $p(t)$ est proportionnel à t , et que $p(t)/t$ peut s'interpréter comme une *probabilité de transition par unité de temps* Γ

$$\Gamma = \frac{1}{t} p(t) = 4\pi^2 \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) \quad (5.44)$$

La proportionnalité de la probabilité de transition à d^2 et à I est une caractéristique de la plupart des processus d'absorption du rayonnement électromagnétique par un système atomique ou moléculaire. Les conditions de validité de l'approximation sont (i) $t \gg \tau_1 \sim 1/\Delta\omega$ et (ii) $p(t) \ll 1$ c'est-à-dire $t \ll \tau_2$. Il faut donc encadrer le temps t par

$$\tau_1 \sim \frac{1}{\Delta\omega} \ll t \ll \tau_2 \sim \frac{\hbar}{d\mathcal{E}_0}$$

5.2.5 Atome à deux niveaux

La calcul que nous venons de présenter a jeté les bases d'une théorie générale de l'absorption et de l'émission de rayonnement électromagnétique par un système atomique ou moléculaire, aux restrictions suivantes près.

- L'approximation par un système à deux niveaux doit être justifiée : ce sera le cas si l'on s'intéresse uniquement à des transitions entre deux niveaux séparés par une énergie $\hbar\omega_0$ et à un champ électromagnétique de fréquence $\omega \simeq \omega_0$, c'est-à-dire au voisinage de la résonance. Par convention un des deux états, celui de plus basse énergie, sera noté $|g\rangle$ (il s'agit souvent de l'état fondamental), et le second sera noté $|e\rangle$ (état excité : figure 5.12). Dans le cas d'un atome, cette approximation est appelée *approximation de l'atome à deux niveaux*, qui fournit un modèle de base pour la physique atomique et les lasers.
- La transition doit être du type *dipolaire électrique*, c'est-à-dire contrôlée par l'élément de matrice de l'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D}$ entre les deux niveaux, et la condition $\omega_1 \ll \omega_0$ doit être vérifiée.

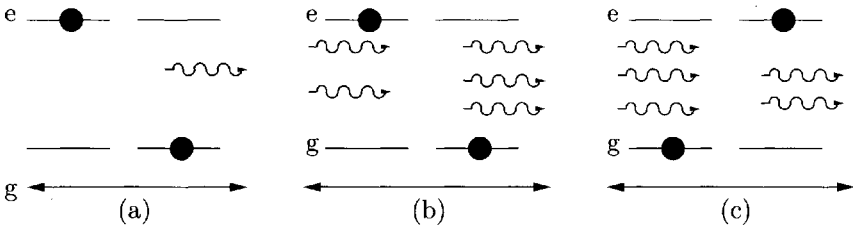


FIG. 5.12 – (a) Émission spontanée. (b) Émission stimulée. (c) Absorption.

- Le champ électromagnétique est considéré comme un champ classique. Le traitement que nous venons de donner est appelé « semi-classique » : l'atome est traité comme un système quantique, mais le champ reste classique. L'aspect « photon » du champ électromagnétique est donc ignoré, et on ne peut pas en principe rendre compte de l'émission spontanée de rayonnement par un atome dans un état excité (ou au mieux en donner un traitement heuristique).
- Les résultats du § 5.2.4 doivent être modifiés pour tenir compte la durée de vie finie de l'état excité (chapitre 14).

Lorsqu'un atome à deux niveaux interagit avec un champ électromagnétique, en pratique aujourd'hui le champ d'un laser, la probabilité d'absorption se calcule selon le schéma du § 5.2.4, mais les ordres de grandeur sont tout à fait différents de ceux de la molécule d'ammoniac. En reprenant un exemple déjà mentionné au § 1.5.3, la différence d'énergie $\hbar\omega_0$ entre l'état fondamental et le premier niveau excité du rubidium est de 1.6 eV, correspondant à une longueur d'onde de $0.78 \mu\text{m}$, à la limite de l'infra-rouge. Cet ordre de grandeur est typique de la physique atomique : les transitions généralement utilisées sont dans le domaine visible, ou bien dans le proche ultra-violet ou le proche infra-rouge.

Nous avons déjà souligné que l'émission spontanée n'est pas en principe décrite par le traitement semi-classique, puisque l'on passe d'un état initial à zéro photon à un état final à un photon : un photon est créé au moment de la désexcitation de l'atome. Seule une théorie quantique du champ électromagnétique permet de décrire l'émission spontanée de façon rigoureuse. Bien que notre traitement classique du champ électromagnétique ne nous autorise pas une interprétation en termes de photons, nous nous risquerons néanmoins à décrire les processus du § 5.2.3 en utilisant ce concept : par exemple nous interpréterons le gain d'énergie du champ comme une augmentation du nombre de photons dans la cavité. Le processus

$$|\chi_-\rangle + n \text{ photons} \rightarrow |\chi_+\rangle + (n + 1) \text{ photons} \quad (5.45)$$

représente donc l'émission stimulée. L'absorption stimulée est le processus inverse de (5.45)

$$|\chi_+\rangle + n \text{ photons} \rightarrow |\chi_-\rangle + (n-1) \text{ photons} \quad (5.46)$$

Enfin l'émission spontanée d'un photon se produit quand le niveau excité $|\chi_-\rangle$ se désexcite en l'absence de champ électromagnétique

$$|\chi_-\rangle + 0 \text{ photon} \rightarrow |\chi_+\rangle + 1 \text{ photon} \quad (5.47)$$

Ces processus sont représentés schématiquement sur la figure 5.12. Il faut bien faire la différence entre l'émission stimulée, qui est cohérente avec l'onde incidente et est proportionnelle à l'intensité incidente, et l'émission spontanée qui est aléatoire, sans relation de phase avec le champ appliqué et n'est pas influencée par les conditions externes¹⁵.

La nécessité de l'émission spontanée a été démontrée pour la première fois par Einstein. Examinons une collection d'atomes à deux niveaux E_1 et E_2 , $E_1 < E_2$, placés dans une cavité à la température T . Il règne dans cette cavité un rayonnement donné par la loi de Planck (1.22). Si N est le nombre total d'atomes et $N_1(t)$, $N_2(t)$ le nombre d'atomes dans les états E_1 et E_2

$$N_1(t) + N_2(t) = N = \text{cste}$$

en supposant que seuls les états E_1 et E_2 sont peuplés de façon appréciable¹⁶. Les nombres $N_1(t)$ et $N_2(t)$ vérifient les équations cinétiques

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = (-AN_1 + BN_2)\epsilon(\omega) \quad (5.48)$$

où $\hbar\omega = E_2 - E_1$; $A\epsilon(\omega)$ est le taux de transition $E_1 \rightarrow E_2$ par unité de temps dû à l'absorption stimulée dans l'état E_1 et $B\epsilon(\omega)$ le taux de transition $E_2 \rightarrow E_1$ par unité de temps dû à l'émission stimulée. Ces taux sont proportionnels à la densité d'énergie $\epsilon(\omega)$. À l'équilibre

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = 0$$

et le rapport des populations est donné par la loi de Boltzmann (1.12) d'où

$$\frac{A}{B} = \frac{N_1^{\text{eq}}}{N_2^{\text{eq}}} = \exp\left(-\frac{E_1 - E_2}{kT}\right) = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \quad (5.49)$$

Ce résultat n'est pas physiquement acceptable, car A et B ne peuvent dépendre que des caractéristiques de l'interaction du champ

15. Sauf cas exceptionnel : si l'atome est piégé entre des miroirs hautement réfléchissants et à très basse température, il est possible de modifier l'émission spontanée. C'est ce que l'on appelle l'électrodynamique en cavité : voir par exemple Grynberg *et al.* [1997], complément VI.1.

16. Ce sera le cas si par exemple les autres états E_n sont tels que $E_n - E_1 \gg E_2 - E_1$ et $E_n - E_1 \gg k_B T$.

électromagnétique avec l'atome, et non de la température. Il faut corriger (5.48) pour tenir compte de l'émission spontanée, *indépendante* de $\epsilon(\omega)$

$$\frac{dN_1}{dt} = (-AN_1 + BN_2)\epsilon(\omega) + B'N_2 \quad (5.50)$$

La condition $dN_1/dt = 0$ jointe à la condition d'équilibre de Boltzmann donne pour $\epsilon(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = \frac{B'}{AN_1/N_2 - B} = \frac{B'}{A \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - B} \quad (5.51)$$

La comparaison avec (1.22) montre que $A = B$ et que

$$\frac{B'}{A} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$$

On remarque que l'on aurait aussi bien pu utiliser dans le raisonnement la densité de photons $n(\omega) = \epsilon(\omega)/\hbar\omega$ ou toute quantité proportionnelle à la densité d'énergie $\epsilon(\omega)$, au prix d'une simple redéfinition de A et B . Calculons explicitement B' . D'après (1.16) $\epsilon(\omega)$ est une densité d'énergie par unité de fréquence, et l'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ dans (5.44) est reliée à $\epsilon(\omega)$ par

$$\mathcal{I}(\omega) = c\epsilon(\omega)$$

ce qui donne par comparaison avec (5.44) la probabilité d'émission stimulée

$$A = 4\pi^2 c \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 c} \right)$$

On en déduit la probabilité d'émission spontanée B'

$$B' = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} A = \frac{4\omega^3}{c} \left(\frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right) \quad (5.52)$$

Dans le cas de la physique atomique, un ordre de grandeur du moment dipolaire d est $d \sim q_e a$, où a est le rayon de l'orbite électronique, et on a l'estimation, avec la substitution $\omega \rightarrow \omega_0$

$$B' \sim \alpha \frac{a^2 \omega_0^3}{c^2} \sim \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right) \quad (5.53)$$

où $\alpha = q_e^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c)$ est la constante de structure fine. Cette estimation est en accord avec (1.44), qui était fondé sur le calcul classique du rayonnement. Un calcul complet de B' sera donné au § 14.3.4, où nous reviendrons sur l'examen de (5.53).

5.3 Exercices

5.3.1 Base orthonormée de vecteurs propres

Vérifier par un calcul explicite que les vecteurs $|\chi_s\rangle$ (5.12) forment une base orthonormée : $\langle\chi_{s'}|\chi_s\rangle = \delta_{s's}$.

5.3.2 Moment dipolaire électrique du formaldéhyde

1. On se propose de modéliser le comportement des deux électrons π de la double liaison de la molécule de formaldéhyde $H_2 - C = O$. L'oxygène étant plus électronégatif que le carbone, montrer que le hamiltonien d'un électron prend la forme

$$\begin{pmatrix} E_C & -A \\ -A & E_O \end{pmatrix}$$

avec $E_O < E_C$, où $E_C(E_O)$ représente l'énergie d'un électron localisé sur l'atome de carbone (d'oxygène).

2. On définit

$$B = \frac{1}{2} (E_C - E_O) > 0$$

et l'angle θ par

$$B = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \theta \quad A = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \theta$$

Calculer en fonction de θ la probabilité de trouver un électron π localisé sur l'atome de carbone ou d'oxygène.

3. On *admet* que le moment dipolaire électrique d du formaldéhyde est dû uniquement à la distribution de charge sur l'axe $C = O$. Exprimer ce moment dipolaire en fonction de la distance l entre les atomes de carbone et d'oxygène, la charge du proton q_p et θ . Les valeurs expérimentales sont $l = 0.121$ nm et $d = q_p \times 0.040$ nm.

5.3.3 Le butadiène

Le butadiène C_4H_6 possède une structure linéaire (figure 5.13). Son ossature $(C_4H_6)^{4+}$ formée avec des électrons σ comporte quatre atomes de carbone numérotés de $n = 1$ à $n = 4$. L'état d'un électron π localisé au voisinage de l'atome de carbone n^o est désigné par $|\varphi_n\rangle$. Il est commode de généraliser à une chaîne linéaire comportant un nombre N d'atomes de carbone, et donc de numérotiser les atomes $n = 1, \dots, N$. Le hamiltonien d'un électron π agit sur l'état $|\varphi_n\rangle$ de la façon suivante

$$\begin{aligned} H|\varphi_n\rangle &= E_0|\varphi_n\rangle - A(|\varphi_{n-1}\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle) \quad \text{si } n \neq 1, N \\ H|\varphi_1\rangle &= E_0|\varphi_1\rangle - A|\varphi_2\rangle \\ H|\varphi_N\rangle &= E_0|\varphi_N\rangle - A|\varphi_{N-1}\rangle \end{aligned}$$

A est une constante positive. On remarque que les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_N\rangle$ jouent un rôle particulier, car contrairement au cas du benzène, il n'y a pas de symétrie cyclique.

1. Écrire la forme matricielle explicite de H dans la base $|\varphi_n\rangle$ pour $N = 4$.
2. L'état le plus général pour un électron π est

$$|\chi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle$$

Pour adapter la méthode utilisée dans le cas de la symétrie cyclique, on introduit deux états fictifs $|\varphi_0\rangle$ et $|\varphi_{N+1}\rangle$ et deux composantes $c_0 = c_{N+1} = 0$, ce qui permet de réécrire $|\chi\rangle$

$$|\chi\rangle = \sum_{n=0}^{N+1} c_n |\varphi_n\rangle$$

Montrer que l'action de H sur l'état $|\chi\rangle$ s'écrit

$$H|\chi\rangle = E_0|\chi\rangle - A \sum_{n=1}^N (c_{n-1} + c_{n+1})|\varphi_n\rangle$$

3. En s'inspirant de la méthode utilisée dans le cas de la symétrie cyclique, on cherche c_n sous la forme

$$c_n = \frac{c}{2i} (e^{in\delta} - e^{-in\delta})$$

ce qui assure que $c_0 = 0$. Montrer que l'on doit choisir

$$\delta = \frac{\pi s}{N+1} \quad s = 1, \dots, N$$

si l'on veut également avoir $c_{N+1} = 0$.

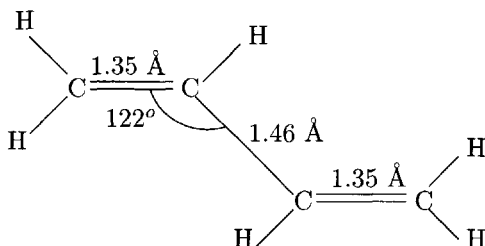


FIG. 5.13 – Formule chimique du butadiène.

4. Montrer que les valeurs propres de H sont étiquetées par l'entier s

$$E_s = E_0 - 2A \cos \frac{\pi s}{N+1}$$

et donner l'expression des vecteurs propres $|\chi_s\rangle$ correspondants. Montrer que la constante de normalisation c vaut $\sqrt{2/(N+1)}$ (suggestion : cf. (5.15)).

5. Dans le cas du butadiène $N = 4$, donner les valeurs numériques de E_s et des composantes des vecteurs propres. Montrer que l'énergie de l'état fondamental de l'ensemble des quatre électrons π est

$$E_0 \simeq 4(E_0 - A) - 0.48A$$

Le gain dû à la délocalisation des électrons π sur l'ensemble de la chaîne est-il important par rapport à la formule chimique de la figure 5.13 ? Dessiner qualitativement la probabilité de présence des électrons pour $s = 1$ et $s = 2$.

6. Quelle serait l'énergie de l'état fondamental d'une hypothétique molécule cyclique (c'est-à-dire ayant la forme d'un carré) C_4H_4 ?

7. On définit l'ordre d'une liaison l entre deux atomes de carbone n et $n+1$ par

$$l = 1 + \sum_s \langle \varphi_n | \chi_s \rangle \langle \chi_s | \varphi_{n+1} \rangle$$

où la somme porte sur les états $|\chi_s\rangle$ occupés par les électrons π . Le facteur 1 correspond aux électrons σ . Montrer que l'ordre de la liaison est bien $l = 2$ pour l'éthylène. Calculer l'ordre des liaisons pour le benzène et pour les différentes liaisons du butadiène et commenter les résultats. Pourquoi la liaison centrale du butadiène est-elle plus courte qu'une liaison simple (1.46 Å au lieu de 1.54 Å) ?

5.3.4 Vecteurs propres du hamiltonien (5.22)

Montrer que dans le cas où le champ électrique est indépendant du temps, et lorsque $d\mathcal{E}/A \ll 1$, le vecteur propre normalisé de H correspondant à la valeur propre $E_0 - A$ est donné à l'ordre $d\mathcal{E}/A$ par

$$|\chi'_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 - d\mathcal{E}/(2A) \\ 1 + d\mathcal{E}/(2A) \end{pmatrix}$$

Quel est l'autre vecteur propre ?

5.3.5 L'ion moléculaire H_2^+

L'ion moléculaire H_2^+ est formé de deux protons et d'un électron. Les deux protons sont situés sur un axe pris comme axe des x , à des abscisses

respectives $-r/2$ et $r/2$. Ils seront supposés fixes (approximation de Born-Oppenheimer).

1. En supposant l'électron sur l'axe des x , exprimer son énergie potentielle $V(x)$ en fonction de sa position x et de $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$ où q_e est la charge de l'électron, et la tracer qualitativement.

2. Si les deux protons sont très éloignés, $r \gg l$, l'électron est soit localisé au voisinage du proton de droite (état $|\varphi_1\rangle$), soit au voisinage du proton de gauche (état $|\varphi_2\rangle$). On suppose que ces états correspondent tous deux à l'état fondamental de l'atome d'hydrogène d'énergie

$$E_0 = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_0}$$

où m_e est la masse de l'électron et a_0 le rayon de Bohr : $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$. Quelle est l'échelle de longueur pertinente l dans la relation $r \gg l$?

3. On considère l'ion H_2^+ comme un système à deux niveaux d'états de base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. Justifier la forme du hamiltonien où l'on choisira $A > 0$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

Quels sont les états propres $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$ de H et les énergies E_+ et E_- , $E_+ < E_-$, correspondantes ? Dessiner qualitativement les fonctions d'onde $\chi_{\pm}(x) = \langle x|\chi_{\pm}\rangle$ de l'électron sur l'axe des x .

4. Le paramètre A est une fonction de la distance r entre les protons : $A(r)$. Justifier le fait que A est une fonction décroissante de r et que $\lim_{r \rightarrow \infty} A(r) = 0$. L'énergie de l'électron est donc une fonction de r , $E_{\pm}(r)$.

5. Montrer que pour trouver l'énergie totale de l'ion $E'_{\pm}(r)$, on doit ajouter un terme $+e^2/r$. Quelle est l'origine physique de ce terme ?

6. On paramétrise $A(r)$ par

$$A(r) = c e^2 \exp\left(-\frac{r}{b}\right)$$

où b est une longueur et c l'inverse d'une longueur. Donner l'expression des deux niveaux d'énergie E'_+ et E'_- de l'ion. Soit

$$\Delta E(r) = E'_+(r) - E_0$$

la différence d'énergie entre l'état fondamental de l'ion et celui de l'atome d'hydrogène. Montrer que $\Delta E(r)$ peut passer par un minimum pour une valeur $r = r_0$ et en déduire

$$\Delta E(r_0) = \frac{e^2}{r_0} \left(1 - \frac{b}{r_0}\right)$$

Quelle condition doit-on avoir sur b et r_0 pour que l'ion H_2^+ soit un état lié ?

7. Les valeurs expérimentales sont $r_0 \simeq 2a_0$ et $\Delta E(r_0) \simeq E_0/5 = -e^2/(10a_0)$. En déduire b et c en fonction de a_0 .

5.4 Bibliographie

Pour la chimie quantique élémentaire, on pourra consulter Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 15, F. Goodrich, *A Primer of Quantum Chemistry*, Wiley, New-York (1972), chapitre 2, ou C. Gatz, *Introduction to Quantum Chemistry*, C.E. Merrill, Columbia (1971), chapitres 10 à 12. Les systèmes à deux niveaux avec interactions résonantes et quasi-résonantes sont traités par Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitres 8 et 9 ou par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre IV. L'interaction d'un atome à deux niveaux avec un champ électromagnétique est traitée à un niveau avancé par Grynberg *et al.* [1997], chapitre II. Le lecteur trouvera des détails complémentaires sur l'ion moléculaire H_2^+ dans Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément G_{XI}.

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Chapitre 6

États intriqués

NOUS NOUS SOMMES limités jusqu'à présent aux états à une particule. Dans ce chapitre, nous allons introduire la description d'états à deux particules ; une fois ce cas assimilé, il n'est pas difficile de généraliser à un nombre quelconque de particules. Les états à deux particules (ou plus) conduisent à des configurations très riches, dites intriquées. Dans une première section, nous allons nous attacher au formalisme mathématique indispensable, celui du produit tensoriel. Nous en profiterons pour introduire la description quantique des mélanges à l'aide du formalisme de l'opérateur densité. La seconde section sera consacrée à l'étude d'importantes conséquences physiques : les inégalités de Bell et les expériences d'interférences avec états intriqués, qui permettront d'approfondir notre compréhension de la physique quantique. Nous soulignerons tout particulièrement le caractère non local de la mécanique quantique. Enfin, dans la dernière section, nous passerons brièvement en revue les applications potentielles à la théorie de la mesure et à l'information quantique. Ce dernier sujet, actuellement en pleine expansion, trouve ses applications dans le calcul quantique, la cryptographie et la téléportation.

6.1 Produit tensoriel de deux espaces vectoriels

6.1.1 Définition et propriétés du produit tensoriel

Nous cherchons à construire l'espace des états de deux systèmes physiques que nous supposons dans un premier temps entièrement indépendants. Soit $\mathcal{H}_1^N$ et $\mathcal{H}_2^M$ les espaces des états des deux systèmes, de dimensions respectives N et M . Comme les deux systèmes sont indépendants, l'état global est défini par la donnée du vecteur d'état $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_1^N$ du premier système et du vecteur d'état $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_2^M$ du second. Le couple $\{|\varphi\rangle, |\chi\rangle\}$ peut être considéré comme un vecteur appartenant à un espace vectoriel de dimension NM , appelé *produit*

tensoriel des espaces $\mathcal{H}_1^N$ et $\mathcal{H}_2^M$, noté $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$, que nous allons définir précisément ci-dessous.

Choisissons une base orthonormée $|n\rangle$ de $\mathcal{H}_1^N$ et une base orthonormée $|m\rangle$ de $\mathcal{H}_2^M$ sur laquelle nous décomposons des vecteurs arbitraires $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_1^N$ et $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_2^M$

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle \quad |\chi\rangle = \sum_{m=1}^M d_m |m\rangle \quad (6.1)$$

L'espace $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$ sera défini comme un espace à NM dimensions où les couples $\{|n\rangle, |m\rangle\}$, notés $|n \otimes m\rangle$, ou $|n\rangle \otimes |m\rangle$, forment une base orthonormée

$$\langle n' \otimes m' | n \otimes m \rangle = \delta_{n'n} \delta_{m'm} \quad (6.2)$$

et le produit tensoriel des vecteurs $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$, noté $|\varphi \otimes \chi\rangle$, ou $|\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$, est le vecteur de composantes $c_n d_m$ dans cette base

$$|\varphi \otimes \chi\rangle = \sum_{n,m} c_n d_m |n \otimes m\rangle \quad (6.3)$$

On vérifie immédiatement la linéarité de l'opération produit tensoriel

$$\begin{aligned} |\varphi \otimes (\chi_1 + \lambda \chi_2)\rangle &= |\varphi \otimes \chi_1\rangle + \lambda |\varphi \otimes \chi_2\rangle \\ |(\varphi_1 + \lambda \varphi_2) \otimes \chi\rangle &= |\varphi_1 \otimes \chi\rangle + \lambda |\varphi_2 \otimes \chi\rangle \end{aligned} \quad (6.4)$$

Il faut également vérifier que la définition du produit tensoriel est indépendante du choix de la base. Soit $|i\rangle$ et $|j\rangle$ deux bases orthonormées de $\mathcal{H}_1^N$ et $\mathcal{H}_2^M$ déduites des bases $|n\rangle$ et $|m\rangle$ par des transformations unitaires respectives R ($R^{-1} = R^\dagger$) et S ($S^{-1} = S^\dagger$)

$$|i\rangle = \sum_n R_{in} |n\rangle \quad |j\rangle = \sum_m S_{jm} |m\rangle$$

D'après (6.3), le produit tensoriel $|i \otimes j\rangle$ est donné par

$$|i \otimes j\rangle = \sum_{n,m} R_{in} S_{jm} |n \otimes m\rangle$$

Par ailleurs, on peut écrire la décomposition de $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ dans les bases respectives $|i\rangle$ et $|j\rangle$

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^N \bar{c}_i |i\rangle \quad |\chi\rangle = \sum_{j=1}^M \bar{d}_j |j\rangle$$

Un calcul immédiat (exercice 6.4.1) montre que

$$\sum_{i,j} \bar{c}_i \bar{d}_j |i \otimes j\rangle = |\varphi \otimes \chi\rangle$$

où $|\varphi \otimes \chi\rangle$ est défini par (6.3). Le résultat pour $|\varphi \otimes \chi\rangle$ est donc indépendant du choix de la base.

Lorsque les deux systèmes ne sont plus indépendants, nous *admettrons* (postulat **V**) que l'espace des états reste $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$: il est raisonnable de supposer que les interactions ne peuvent pas modifier l'espace des états¹. Le vecteur d'état le plus général sera de la forme

$$|\Phi\rangle = \sum_{n,m} b_{nm} |n \otimes m\rangle \quad (6.5)$$

En général on ne pourra pas écrire le vecteur $|\Phi\rangle$ comme un produit tensoriel $|\varphi \otimes \chi\rangle$. En effet, il faudrait que l'on puisse factoriser b_{nm} sous la forme $c_n d_m$, ce qui est impossible sauf cas de systèmes indépendants.

Le produit tensoriel $C = A \otimes B$ de deux opérateurs linéaires A et B agissant respectivement dans les espaces $\mathcal{H}_1^N$ et $\mathcal{H}_2^M$ est défini par son action sur le vecteur produit tensoriel $|\varphi \otimes \chi\rangle$

$$(A \otimes B)|\varphi \otimes \chi\rangle = |A\varphi \otimes B\chi\rangle \quad (6.6)$$

et ses éléments de matrice dans la base $|n \otimes m\rangle$ de $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$ sont donc

$$\langle n' \otimes m' | A \otimes B | n \otimes m \rangle = A_{n'n} B_{m'm} \quad (6.7)$$

En général un opérateur C agissant sur $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$ ne sera pas de la forme $A \otimes B$. Ses éléments de matrice seront

$$\langle n' \otimes m' | C | n \otimes m \rangle = C_{n'm';nm}$$

et sauf cas particulier on ne pourra pas écrire $C_{n'm';nm}$ sous la forme factorisée $A_{n'n} B_{m'm}$. Deux cas particuliers intéressants de (6.6) sont $A = I_N$ et $B = I_M$, où I_N et I_M sont les opérateurs identité de $\mathcal{H}_1^N$ et de $\mathcal{H}_2^M$

$$(A \otimes I_M)|\varphi \otimes \chi\rangle = |A\varphi \otimes \chi\rangle \quad (I_N \otimes B)|\varphi \otimes \chi\rangle = |\varphi \otimes B\chi\rangle \quad (6.8)$$

En termes d'éléments de matrice

$$\langle n' \otimes m' | A \otimes I_M | n \otimes m \rangle = A_{n'n} \delta_{m'm} \quad \langle n' \otimes m' | I_N \otimes B | n \otimes m \rangle = \delta_{n'n} B_{m'm} \quad (6.9)$$

Enfin, si $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a ($A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$), alors $|\varphi \otimes \chi\rangle$ sera vecteur propre de $A \otimes I_M$ avec la valeur propre a

$$(A \otimes I_M)|\varphi \otimes \chi\rangle = a|\varphi \otimes \chi\rangle \quad (6.10)$$

On omet souvent d'écrire explicitement les opérateurs identité I_N et I_M , et une écriture courante pour (6.10) est

$$A|\varphi \otimes \chi\rangle = a|\varphi \otimes \chi\rangle \quad \text{ou simplement} \quad A|\varphi \chi\rangle = a|\varphi \chi\rangle \quad (6.11)$$

en supprimant le symbole du produit tensoriel. Comme la notation $\otimes$ est assez lourde, elle sera souvent omise sauf s'il y a une ambiguïté possible.

1. Toutefois nous verrons au chapitre 13 que, pour deux particules identiques, une partie seulement de $\mathcal{H}_1^N \otimes \mathcal{H}_2^M$ correspond à des états physiques.

6.1.2 Système de deux spins 1/2

Nous allons illustrer la notion de produit tensoriel en construisant l'espace des états d'un système de deux spins 1/2. Les espaces des états des deux spins sont des espaces à deux dimensions $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$. L'espace des états du système des deux spins $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ est à quatre dimensions ($4 = 2 \times 2$). On choisit comme base orthonormée de $\mathcal{H}_1$ et de $\mathcal{H}_2$ les états propres $|\varepsilon_1\rangle$ et $|\varepsilon_2\rangle$, $\varepsilon_i = \pm 1$, des opérateurs projection du spin sur l'axe Oz , S_{1z} et S_{2z} , avec

$$S_{1z}|\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_1|\varepsilon_1\rangle \quad S_{2z}|\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_2|\varepsilon_2\rangle$$

D'après (6.5), les états du système de deux spins se décomposent sur la base orthonormée $|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle$ et par exemple

$$(S_{1z} \otimes I_2)|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_1|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle \quad ; \quad (S_{1z} \otimes S_{2z})|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\varepsilon_1\varepsilon_2|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle$$

Suivant (6.11), on utilisera fréquemment les notations allégées $|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$ au lieu de $|\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2\rangle$, $S_{1z}S_{2z}$ au lieu de $S_{1z} \otimes S_{2z}$; avec ces notations, les équations précédentes deviennent

$$S_{1z}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{2}\hbar\varepsilon_1|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle \quad ; \quad S_{1z}S_{2z}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\varepsilon_1\varepsilon_2|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle \quad (6.12)$$

Soit $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ deux vecteurs arbitraires (normalisés) de $\mathcal{H}_1$ et de $\mathcal{H}_2$

$$\begin{aligned} |\chi_1\rangle &= \lambda_1|+\rangle + \mu_1|-\rangle & |\lambda_1|^2 + |\mu_1|^2 &= 1 \\ |\chi_2\rangle &= \lambda_2|+\rangle + \mu_2|-\rangle & |\lambda_2|^2 + |\mu_2|^2 &= 1 \end{aligned}$$

Le produit tensoriel $|\chi_1 \otimes \chi_2\rangle$ est donné suivant (6.3) par

$$|\chi_1 \otimes \chi_2\rangle = \lambda_1\lambda_2|++\rangle + \lambda_1\mu_2|+-\rangle + \lambda_2\mu_1| - \otimes +\rangle + \mu_1\mu_2| - \otimes -\rangle \quad (6.13)$$

Un vecteur arbitraire $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ est

$$|\Psi\rangle = \alpha|++\rangle + \beta|+-\rangle + \gamma| - \otimes +\rangle + \delta| - \otimes -\rangle \quad (6.14)$$

Ce vecteur n'est pas en général de la forme (6.13) : en comparant (6.13) et (6.14), on note qu'un vecteur produit tensoriel vérifie par exemple

$$\alpha\delta = \beta\gamma$$

et *a priori* cette condition n'a aucune raison d'être valide. Lorsque $|\Psi\rangle$ n'est pas de la forme (6.13), on dit que l'on a affaire à un *état intriqué* des deux spins.

Un cas particulier important est l'état intriqué

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\otimes-\rangle - |-\otimes+\rangle \right)$$

ou en notation allégée (6.12)

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle - |-+\rangle \right) \quad (6.15)$$

Cet état est manifestement intriqué car $\alpha = \delta = 0$ et $\beta = \gamma = 1/\sqrt{2}$: $\alpha\delta \neq \beta\gamma$. Une propriété remarquable de $|\Phi\rangle$ est son invariance par rotation² : c'est un scalaire par rapport aux rotations. En effet, comme nous l'avons vu au § 3.2.4, le transformé $|\chi\rangle_R$ par une rotation R d'un état $|\chi\rangle$ s'obtient en lui appliquant un opérateur $D^{1/2}$ (3.58) qui est une matrice de $SU(2)$, c'est-à-dire une matrice unitaire et de déterminant unité (exercice 3.3.6). Les transformés de $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont

$$\begin{aligned} |+\rangle_R &= a|+\rangle + b|-\rangle \\ |-\rangle_R &= c|+\rangle + d|-\rangle \end{aligned} \quad (6.16)$$

avec³ $ad - bc = 1$. Nous en déduisons

$$|+-\rangle_R = ac|++\rangle + ad|+-\rangle + bc| - + \rangle + bd|--\rangle \quad (6.17)$$

et en échangeant $+\leftrightarrow -$

$$|-+\rangle_R = ac|++\rangle + ad| - + \rangle + bc|+-\rangle + bd|--\rangle$$

ce qui donne pour le transformé de $|\Phi\rangle$ par rotation

$$|\Phi\rangle_R = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle_R - |-+\rangle_R \right) = (ad - bc)|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (6.18)$$

6.1.3 Opérateur densité

Considérons un système de deux particules décrit par un vecteur d'état $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Si $|\Psi\rangle$ est un produit tensoriel $|\varphi_1 \otimes \varphi_2\rangle$, le vecteur d'état de la particule 1 est $|\varphi_1\rangle$. Mais que se passe-t-il si $|\Psi\rangle$ n'est pas un produit tensoriel, ou, en d'autres termes, si $|\Psi\rangle$ est un état intriqué ? Peut-on encore parler du vecteur d'état de la particule 1 ? Nous allons voir que la réponse à cette question est *négative* : en général on ne peut pas attribuer un vecteur d'état à la particule 1. Cet exemple montre qu'il nous faut généraliser notre description des systèmes quantiques, et cette généralisation va bien au-delà du cas particulier que nous venons de mentionner. Lorsque l'on peut décrire un état physique par un vecteur de l'espace de Hilbert des états, on dit que l'on a affaire à un *état pur* ou à un *cas pur* ; ceci sera le cas si l'on dispose d'une information complète sur le système. Lorsque l'information

2. Nous verrons au § 10.6.1 que $|\Phi\rangle$ est un état de moment angulaire nul, et donc un scalaire pour les rotations.

3. Et $c = -b^*$, $d = a^*$, mais nous ne nous servons pas de ces relations ici.

est incomplète, on a affaire à un *mélange*, et un système quantique est alors décrit mathématiquement par un *opérateur densité*⁴, souvent appelé *matrice densité*. L'introduction de l'opérateur densité va nous permettre de reformuler le postulat I du chapitre 4 afin de décrire des situations physiques plus générales que celles envisagées jusqu'ici, celles où l'on ne dispose que d'une information partielle sur le système considéré.

Lorsque l'on a affaire à un cas pur, la donnée du vecteur d'état $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ pour décrire un système quantique est équivalente à celle du projecteur $\mathcal{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ sur l'état $|\varphi\rangle$. En un certain sens, se donner $\mathcal{P}_\varphi$ est même préférable, car la phase arbitraire de $|\varphi\rangle$ disparaît : $\mathcal{P}_\varphi$ est invariant lorsque l'on multiplie $|\varphi\rangle$ par un facteur de phase

$$|\varphi\rangle \rightarrow e^{i\alpha} |\varphi\rangle$$

et il y a donc correspondance biunivoque entre l'état physique et $\mathcal{P}_\varphi$, et non correspondance à un facteur de phase près. La valeur moyenne d'une grandeur physique A s'exprime simplement en fonction de $\mathcal{P}_\varphi$. Introduisons en effet une base orthonormée $|n\rangle$ de $\mathcal{H}$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \varphi | A | \varphi \rangle = \sum_{n,m} \langle \varphi | n \rangle \langle n | A | m \rangle \langle m | \varphi \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle m | \varphi \rangle \langle \varphi | n \rangle \langle n | A | m \rangle \\ &= \sum_m \langle m | \mathcal{P}_\varphi A | m \rangle = \text{Tr}(\mathcal{P}_\varphi A) \end{aligned} \quad (6.19)$$

$\mathcal{P}_\varphi$ est le cas le plus simple d'opérateur densité. Nous pouvons maintenant généraliser à un mélange : dans un tel cas on sait seulement que le système quantique a la probabilité p_α ($0 \leq p_\alpha \leq 1$, $\sum_\alpha p_\alpha = 1$) de se trouver dans l'état $|\varphi_\alpha\rangle$. Les états $|\varphi_\alpha\rangle$ sont supposés normalisés ($\langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle = 1$), mais pas nécessairement orthogonaux. Par définition, l'opérateur densité ρ décrivant ce système quantique est

$$\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| = \sum_\alpha p_\alpha \mathcal{P}_{\varphi_\alpha} \quad (6.20)$$

La valeur moyenne d'une grandeur physique A s'obtient par une généralisation immédiate de (6.19). En effet, la valeur moyenne de A dans l'état $|\varphi_\alpha\rangle$, $\langle A \rangle_\alpha$, est

$$\langle A \rangle_\alpha = \langle \varphi_\alpha | A | \varphi_\alpha \rangle$$

et cette valeur moyenne est affectée du poids p_α dans le calcul de la valeur moyenne globale $\langle A \rangle$. La valeur moyenne dans le mélange est donc

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle A \rangle_\alpha = \sum_\alpha p_\alpha \langle \varphi_\alpha | A | \varphi_\alpha \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (6.21)$$

4. La mécanique statistique quantique fait un usage intensif de l'opérateur densité.

Les poids p_α sont fixés par le problème physique considéré. Donnons deux exemples importants.

- Le système quantique est un sous-système d'un plus grand système dans un état pur. Les poids p_α sont alors déterminés en prenant une trace partielle, selon la procédure définie ci-dessous en (6.23).
- Le système est macroscopique et décrit par la mécanique statistique d'équilibre. Les poids p_α sont alors obtenus en maximisant l'entropie statistique $S_{\text{st}} = -\text{Tr} \rho \ln \rho$, ce qui correspond physiquement à maximiser l'information manquante.

Les propriétés fondamentales de ρ , qui suivent immédiatement de sa définition (6.20) sont

- ρ est hermitique : $\rho = \rho^\dagger$.
- ρ est de trace unité : $\text{Tr} \rho = 1$.
- ρ est une matrice positive⁵ : $\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle \geq 0$ quel que soit $|\varphi\rangle$.
- Une condition nécessaire et suffisante pour que ρ décrive un état pur est $\rho^2 = \rho$: en effet, comme $\rho = \rho^\dagger$, la condition $\rho^2 = \rho$ implique que ρ est un projecteur. Comme $\text{Tr} \rho = 1$, la dimension de l'espace vectoriel de projection est un⁶, et ρ est de la forme $|\varphi\rangle\langle\varphi|$.

La donnée des p_α et des $|\varphi_\alpha\rangle$ dans (6.20) détermine ρ de façon unique, mais l'inverse n'est pas vrai : à un même opérateur densité peuvent correspondre plusieurs décompositions différentes (exercice 6.4.3).

Comme application de ce formalisme, considérons un système de deux particules décrit par un opérateur densité ρ agissant dans l'espace $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Quel est alors l'opérateur densité de la particule 1 ? Pour répondre à cette question, examinons une grandeur physique C dépendant uniquement de cette particule : C est de la forme $A \otimes I_2$, où A agit dans $\mathcal{H}_1$. On veut trouver un opérateur densité $\rho^{(1)}$ agissant dans $\mathcal{H}_1$ tel que

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho^{(1)} A) \quad (6.22)$$

Dans l'espace $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, la valeur moyenne de $A \otimes I_2$ est donnée par

$$\begin{aligned} \langle A \otimes I_2 \rangle &= \text{Tr}[(A \otimes I_2)\rho] = \sum_{n_1 m_1; n_2 m_2} A_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2} \rho_{m_1 m_2; n_1 n_2} \\ &= \sum_{n_1 m_1} A_{n_1 m_1} \sum_{n_2} \rho_{m_1 n_2; n_1 n_2} = \sum_{n_1 m_1} A_{n_1 m_1} \rho_{m_1 n_1}^{(1)} = \text{Tr}(A \rho^{(1)}) \end{aligned}$$

5. Une matrice (strictement) positive est hermitique et a des valeurs propres (strictement) positives et réciproquement : exercice 2.4.10.

6. En général, si $\mathcal{P}$ est un projecteur, $\text{Tr} \mathcal{P}$ est égal à la dimension de l'espace vectoriel de projection : il suffit pour le voir de se placer dans une base où $\mathcal{P}$ est diagonal.

L'opérateur densité de la particule 1 est donné dans la base $|n_1\rangle$ de $\mathcal{H}_1$ par la matrice $\rho^{(1)}$ d'éléments

$$\rho_{n_1 m_1}^{(1)} = \sum_{n_2} \rho_{n_1 n_2; m_1 n_2} \quad \text{ou} \quad \rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho \quad (6.23)$$

La seconde expression est indépendante de la base : Tr_2 représente la trace sur l'espace $\mathcal{H}_2$, appelée *trace partielle* de l'opérateur densité global, tandis que $\rho^{(1)}$ est l'*opérateur densité réduit*. Une application importante de (6.22) est le calcul de la probabilité de trouver la valeur propre a_n de A , qui est donnée en fonction du projecteur $\mathcal{P}_n$ sur le sous-espace de la valeur propre a_n d'une grandeur physique A par une expression généralisant (4.4)

$$p(a_n) = \text{Tr} \left(\mathcal{P}_n \rho^{(1)} \right)$$

Il est important de se convaincre que *la prescription qui consiste à prendre la trace partielle est une conséquence du postulat II*, car l'expression donnant les valeurs moyennes découle de ce postulat.

Après avoir énoncé les propriétés de l'opérateur densité, revenons à notre problème initial, où le système des deux particules est dans un état pur. Si la particule 1 était dans un état pur, $\text{Tr}_2 \rho$ devrait être un projecteur. Or ceci n'est en général pas le cas : sauf si l'état des deux particules est de la forme $|\varphi \otimes \chi\rangle$, il n'est pas possible d'attribuer à la particule 1 un état quantique bien déterminé. Vérifions-le pour l'état intriqué $|\Phi\rangle$ (6.15) : les éléments de matrice non nuls de ρ sont

$$\rho_{+-;+-} = \rho_{-+;-+} = 1/2 \quad \rho_{-+;+-} = \rho_{+-;-+} = -1/2$$

d'où

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

qui ne vérifie pas $(\rho^{(1)})^2 = \rho^{(1)}$. Même si le système des deux particules est dans un état pur, l'état d'une particule individuelle est en général un mélange ! L'opérateur densité (6.24) décrit un mélange où le spin a 50 % de chances d'être orienté vers le haut et 50 % de chances d'être orienté vers le bas : c'est ce que l'on appelle un *état non polarisé* : cf. l'exercice 6.4.4. En fait la matrice densité (6.24) constitue un cas extrême de mélange, qui correspond à un désordre maximal et à une information minimale sur le spin. On peut montrer qu'une mesure quantitative de l'information contenue dans l'opérateur densité est donnée par l'*entropie statistique*⁷ $S_{\text{st}} = -\text{Tr} \rho \ln \rho$, qui est d'autant plus grande que l'information est réduite. Dans le cas d'un spin 1/2, elle est

7. Il faut prendre garde au fait que $\text{Tr} \rho \ln \rho \neq \sum_{\alpha} p_{\alpha} \ln p_{\alpha}$, sauf si les vecteurs $|\varphi_{\alpha}\rangle$ dans (6.20) sont orthogonaux entre eux.

comprise entre 0 et $\ln 2$ et vaut 0 pour un cas pur, $\ln 2$ pour le mélange (6.24) : $\ln 2$ est la valeur maximale de l'entropie statistique pour un spin $1/2$, et le mélange (6.24) est bien celui qui contient l'information minimale. Si l'espace de Hilbert des états d'un système quantique est de dimension N , l'opérateur densité correspondant au désordre maximal est $\rho = I/N$, soit une entropie statistique $S_{\text{st}} = \ln N$.

Il est essentiel de bien faire la différence entre état pur et mélange : supposons par exemple qu'un spin $1/2$ soit dans l'état pur

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \quad (6.25)$$

L'analyse par un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique $\vec{B}$ est parallèle à Oz va donner une probabilité de 50 % de déviation vers le haut et 50 % de déviation vers le bas, tout comme dans le cas non polarisé (6.24). Cependant l'état (6.25) est un état propre de S_x , $|\chi\rangle = |+, \hat{x}\rangle$: si $\vec{B}$ est parallèle à Ox , 100 % des spins seront déviés dans la direction des x positifs, alors que pour (6.24) les probabilités de déviation vers les x positifs et négatifs seront toujours de 50 % : en fait, quelle que soit l'orientation de l'appareil de Stern-Gerlach, il y aura toujours 50 % des spins déviés dans la direction de $\vec{B}$ et 50 % dans celle de $-\vec{B}$. La différence entre les deux cas est que pour le cas pur (6.25), ou état complètement polarisé, il existe une *relation de phase* bien définie entre les amplitudes pour trouver $|\chi\rangle$ dans les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. L'état pur $|\chi\rangle$ est une superposition *cohérente* des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, et le mélange (6.24) est une superposition *incohérente* de ces mêmes états. Dans un mélange, l'information sur les phases est perdue, au moins partiellement (car il peut bien sûr exister des états partiellement polarisés : cf. l'exercice 6.4.4) ; elle est totalement perdue pour un état non polarisé.

Les mêmes remarques valent pour la polarisation de la lumière, ou la polarisation d'un photon : une lumière non polarisée est une superposition incohérente de lumière polarisée linéairement à 50 % suivant Ox et 50 % suivant Oy , sans relation de phase entre les deux. Une lumière polarisée circulairement à droite $|D\rangle$ ou à gauche $|G\rangle$ est décrite par les vecteurs (3.24)

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

Une telle lumière sera arrêtée à 50 % par un polariseur linéaire dirigé suivant Ox , et plus généralement suivant un axe quelconque, tout comme une lumière non polarisée. Si les photons sont non polarisés, tout polariseur (λ, μ) (cf. § 3.1.1) laissera passer les photons avec une probabilité de 50 %.

De façon générale, la caractéristique d'un état pur est qu'il existe un test maximal dont un des résultats a une probabilité de 100 %, tandis que pour un mélange il n'existe pas de test maximal possédant cette propriété (exercice 6.4.3). Dans le cas du spin $1/2$, cela veut dire qu'il n'existe pas

d'orientation de $\vec{B}$ telle que 100 % des spins soient déviés dans la direction de $\vec{B}$, et dans celui du photon qu'il n'existe pas de polariseur (λ, μ) laissant passer tous les photons avec probabilité unité.

Il n'est pas difficile de trouver la loi d'évolution temporelle de l'opérateur densité pour un système isolé. En effet, si nous considérons d'abord l'opérateur densité d'un cas pur, en utilisant (4.11)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{P}_{\varphi(t)} = i\hbar \frac{d}{dt} (|\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)|) = H\mathcal{P}_{\varphi(t)} - \mathcal{P}_{\varphi(t)}H = [H, \mathcal{P}_{\varphi(t)}]$$

En sommant sur les probabilités p_α on obtient l'équation d'évolution de $\rho(t)$

$$\boxed{i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)]} \quad (6.26)$$

Nous avons écrit un hamiltonien indépendant du temps, mais (6.26) reste valable même si H dépend du temps. On obtient une loi équivalente en utilisant l'opérateur d'évolution $U(t, 0)$ (4.14)

$$\rho(t) = U(t, 0) \rho(t=0) U^{-1}(t, 0)$$

Une telle évolution temporelle de l'opérateur densité est réversible et est appelée *hamiltonienne* ou *unitaire*. Il est intéressant d'observer qu'un état de désordre maximal est un invariant dynamique car $[H, \rho] = 0$.

L'introduction de l'opérateur densité permet de donner une formulation plus générale des postulats du chapitre 4.

- **Postulat Ia.** L'état d'un système quantique est représenté mathématiquement par un opérateur densité ρ agissant dans un espace de Hilbert des états $\mathcal{H}$.
- **Postulat IIa.** La probabilité p_χ de trouver le système quantique dans l'état $|\chi\rangle$ est donnée par

$$p_\chi = \text{Tr}(\rho|\chi\rangle\langle\chi|) = \text{Tr} \rho \mathcal{P}_\chi$$

- **Postulat IVa.** L'évolution temporelle de l'opérateur densité est donnée par (6.26)

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H(t), \rho(t)]$$

Le postulat **III** reste inchangé, et le postulat **RPO** (réduction du paquet d'ondes) (4.7) devient

$$\rho \rightarrow \frac{\mathcal{P}_n \rho \mathcal{P}_n}{\text{Tr} \rho \mathcal{P}_n}$$

lorsque le résultat de la mesure de la grandeur physique A est la valeur propre a_n . Soulignons à nouveau que (6.26) ne vaut que pour un système isolé. L'évolution temporelle d'un opérateur densité réduit n'est pas hamiltonienne, sauf cas particulier⁸.

6.2 Exemples

6.2.1 Inégalités de Bell

Supposons que nous soyons capables de fabriquer un état $|\Phi\rangle$ (6.15) de deux particules identiques de spin $1/2$, les deux particules partant en sens inverse, avec des impulsions égales et opposées. Elles peuvent par exemple provenir de la désintégration d'une particule instable de spin zéro et d'impulsion nulle, auquel cas la conservation de l'impulsion implique qu'elles partent bien dans des directions opposées. Un exemple (simple théoriquement, mais pas expérimentalement !) est la désintégration d'un méson π^0 en un électron et un positron⁹ : $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^-$. Deux expérimentateurs, nommés conventionnellement Alice et Bob, mesurent suivant un axe donné la composante du spin de chaque particule (figure 6.1), lorsque les particules sont très éloignées comparativement à la portée des forces et ont cessé d'interagir entre elles depuis longtemps. Pour la clarté de la figure, les axes sont choisis perpendiculaires à la direction de propagation, bien que cela ne soit pas indispensable¹⁰. En utilisant un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à la direction $\hat{a}$, Alice mesure la composante du spin suivant cet axe de la particule partant vers la gauche, ou particule a , et de même Bob mesure la composante suivant un axe $\hat{b}$ du spin de la particule partant vers la droite, ou particule b . Examinons d'abord le cas où Alice et Bob utilisent tous deux l'axe Oz : $\hat{a} = \hat{b} = \hat{z}$. Les désintégrations sont supposées bien séparées dans le temps et chaque expérimentateur peut savoir qu'il mesure les spins de particules issues de la même désintégration. Autrement dit, chaque *paire* de particules est parfaitement bien identifiée dans l'expérience.

Grâce à son appareil de Stern-Gerlach, Alice mesure la composante suivant Oz , $S_z^{(a)}$, du spin de la particule a , avec pour résultat $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$, et Bob fait de même pour la composante $S_z^{(b)}$ de la particule b . Ainsi que nous l'avons vu en (6.24), chacune des deux particules est non polarisée : Alice et Bob observent une suite aléatoire de résultats $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$. Une fois la série

8. C'est ce que l'on observe en mécanique statistique pour l'opérateur densité d'un système en contact avec un réservoir de chaleur. Dans une évolution hamiltonienne, l'entropie statistique $-\text{Tr} \rho \ln \rho$ est conservée, mais ce n'est pas le cas pour une évolution non hamiltonienne : l'entropie statistique d'un système en contact avec un réservoir de chaleur n'est pas constante.

9. Ce mode de désintégration est rare, mais il s'agit pour le moment d'une discussion théorique.

10. Voir la note 14 du chapitre 3.

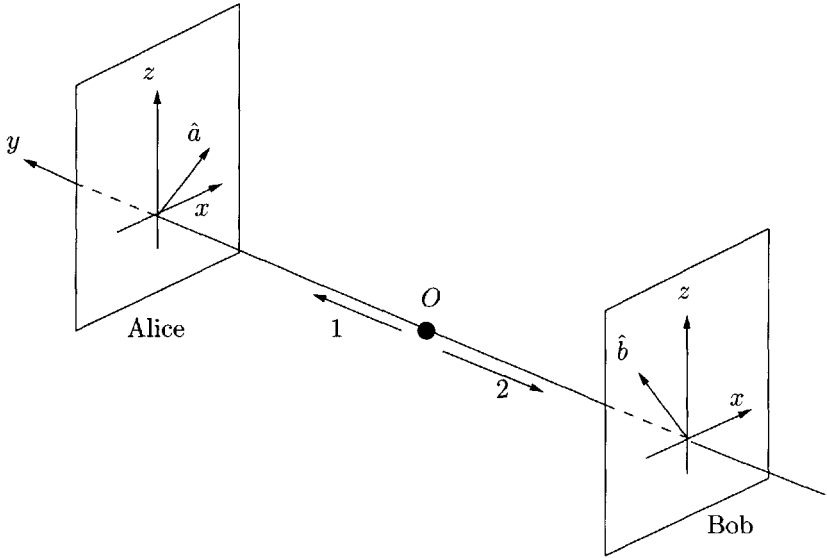


FIG. 6.1 – Configuration d’une expérience de type EPR.

de mesures faite, Alice et Bob se retrouvent sur un même site et confrontent leurs résultats. Ils constatent que *pour chaque paire ces résultats exhibent une parfaite (anti)corrélacion*. Lorsqu’Alice a mesuré $+\hbar/2$ pour la particule a , Bob a mesuré $-\hbar/2$ pour la particule b et vice-versa. Pour expliquer cette anticorrélacion, calculons le résultat d’une mesure dans l’état $|\Phi\rangle$ (6.15) de la grandeur physique $[S_z^{(a)} S_z^{(b)}]$ construite avec deux opérateurs compatibles. Compte tenu de (6.12), on voit immédiatement que $|\Phi\rangle$ est vecteur propre de $[S_z^{(a)} S_z^{(b)}]$ avec la valeur propre $-\hbar^2/4$

$$[S_z^{(a)} S_z^{(b)}] \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) = -\frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

La mesure de $[S_z^{(a)} S_z^{(b)}]$ doit donc donner le résultat $-\hbar^2/4$, ce qui implique que Bob doit mesurer $-\hbar/2$ si Alice a mesuré $+\hbar/2$ et vice-versa¹¹. Dans la limite de la précision du dispositif expérimental, il est impossible qu’Alice et Bob mesurent tous deux $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$.

11. On rencontre parfois le raisonnement suivant : si Alice obtient $+\hbar/2$ en mesurant la première $S_z^{(a)}$, l’état $|\Phi\rangle$ est projeté sur $|+-\rangle$ par réduction du paquet d’ondes (postulat **RPO**), et Bob mesure donc $S_z^{(b)} = -\hbar/2$. Ce raisonnement n’est pas satisfaisant, car l’énoncé « Alice effectue la première une mesure du spin » n’est pas invariant de Lorentz si Alice et Bob sont distants de L et si leurs mesures sont séparées par un intervalle de temps $\tau < L/c$.

À la réflexion ce résultat, pour l'instant, n'est pas trop surprenant. C'est une variante du « jeu¹² des deux douaniers » : deux voyageurs a et b partent en sens inverse depuis l'origine, chacun emportant une valise, et sont contrôlés ultérieurement par deux douaniers, Alice et Bob. L'une des valises contient une boule rouge, l'autre une boule verte, mais les voyageurs ont pris au hasard leur valise fermée et ils ne connaissent pas la couleur de la boule enfermée dans leur valise. Si Alice contrôle la valise du voyageur a , elle a 50 % de chances de trouver une boule verte. Mais si elle trouve effectivement une boule verte, il est clair que Bob, avec une probabilité de 100 %, va trouver une boule rouge ! Des corrélations ont été introduites au départ entre les valises, qui se retrouvent dans une corrélation des résultats d'Alice et Bob.

Cependant, comme l'ont remarqué pour la première fois Einstein, Podolsky et Rosen (EPR) dans un article célèbre¹³ — sur un exemple différent, la version exposée ici est due à Bohm —, la situation devient nettement moins banale si Alice et Bob décident d'utiliser dans une autre série de mesures l'axe Ox au lieu de l'axe Oz . Comme $|\Phi\rangle$ est invariant par rotation, si Alice et Bob orientent leurs appareils de Stern-Gerlach dans la direction Ox , ils vont à nouveau trouver une anticorrélation parfaite de leurs mesures car

$$[S_x^{(a)} S_x^{(b)}]|\Phi\rangle = -\frac{\hbar^2}{4} |\Phi\rangle$$

Le point de vue sous-jacent à l'analyse de ces résultats par EPR est celui du « réalisme » : EPR supposent que l'on peut attribuer aux systèmes microscopiques des propriétés intrinsèques, recouvrant une réalité physique. Plus précisément, *si la valeur d'une grandeur physique peut être prédite avec certitude sans perturber en rien le système, alors il existe une réalité physique attachée à cette grandeur*. Pour une particule de spin 1/2 dans l'état $|+\rangle$, S_z est une grandeur de ce type car on peut prédire avec certitude que $S_z = \hbar/2$. En revanche dans ce même état, la valeur de S_x ne peut pas être prédite avec certitude (elle vaut $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ avec une probabilité de 50 %) : S_x et S_z ne peuvent pas avoir simultanément une réalité physique. Étant donné que les opérateurs S_x et S_z ne commutent pas, il est impossible en physique quantique de leur attribuer des valeurs simultanées.

Poursuivant leur analyse, EPR s'appuient sur une deuxième hypothèse, celle du *principe de localité*, qui stipule que si Alice et Bob effectuent leurs mesures dans des régions locales de l'espace-temps¹⁴, qui ne peuvent pas être reliées de façon causale, alors il n'est pas possible que le choix d'un dispositif expérimental par Alice, par exemple l'orientation de son appareil de Stern-Gerlach, puisse affecter les propriétés de la particule b ¹⁵. D'après la discussion

12. Inventé pour la circonstance !

13. A. Einstein, B. Podolsky et N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935). On parle parfois du « paradoxe EPR », mais il n'y a aucun aspect paradoxal dans l'analyse EPR.

14. Par exemple si Alice et Bob sont distants de L dans un référentiel où ils sont tous deux au repos et que les mesures prennent un temps τ , on exigera que $\tau \ll L/c$.

15. Ce qui n'est pas équivalent à dire que les résultats d'Alice et de Bob ne sont pas corrélés ! Dans l'exemple élémentaire des deux voyageurs, l'ouverture de la valise du

précédente, ceci implique que sans perturber en rien la particule b , une mesure par Alice de $S_z^{(a)}$ permet de connaître avec certitude $S_z^{(b)}$ et une mesure de $S_x^{(a)}$ permet de connaître avec certitude $S_x^{(b)}$. Si l'on accepte le « réalisme local » d'EPR, le résultat de la mesure d'Alice ne sert qu'à révéler une information qui devait déjà être stockée dans la région locale d'espace-temps attachée à la particule b . Une théorie plus complète que la mécanique quantique devrait contenir une information simultanée sur les valeurs de $S_x^{(b)}$ et de $S_z^{(b)}$, capable de prédire avec certitude tous les résultats des mesures de ces deux grandeurs physiques dans une région locale de l'espace-temps attachée à la particule b . Les grandeurs physiques $S_x^{(b)}$ et $S_z^{(b)}$ ont donc simultanément une réalité physique en contradiction avec la description quantique du spin d'une particule par un vecteur d'état. EPR ne contestent pas que la mécanique quantique donne des prédictions *statistiquement* correctes, mais elle ne suffit pas pour décrire la réalité physique d'une paire *individuelle*. Dans le cadre du réalisme local, tel qu'il a été défini ci-dessus, l'argument d'EPR est imparable et leur verdict sans appel : la mécanique quantique est incomplète ! Toutefois EPR ne proposent aucun schéma pour « compléter » la mécanique quantique.

Selon le réalisme local, même si une expérience donnée ne permet pas de mesurer simultanément $S_x^{(b)}$ et $S_z^{(b)}$, ces deux quantités ont néanmoins une réalité physique simultanée dans la région locale de l'espace-temps attachée à la particule b , et il en est de même par symétrie pour $S_x^{(a)}$ et $S_z^{(a)}$ pour la particule a . Cette conséquence inéluctable du réalisme local permet de prouver les *inégalités de Bell*, qui fixent les corrélations maximales possibles dans une telle hypothèse. Revenant au cas des axes de mesure $\hat{a}$ et $\hat{b}$ quelconques, appelons $A(\hat{a})$ et $B(\hat{b})$ le résultat d'une mesure de $\vec{\sigma} \cdot \hat{a}$ et de $\vec{\sigma} \cdot \hat{b}$: afin de se débarrasser du facteur $\hbar/2$, il est commode d'utiliser les matrices de Pauli plutôt que les opérateurs de spin. De plus, nous allégerons les notations en omettant les exposants (a) et (b) lorsque les vecteurs $\hat{a}$ ou $\hat{b}$ lèvent toute ambiguïté

$$\sigma_{\hat{a}}^{(a)} = \vec{\sigma}^{(a)} \cdot \hat{a} \rightarrow \vec{\sigma} \cdot \hat{a} \quad \sigma_{\hat{b}}^{(b)} = \vec{\sigma}^{(b)} \cdot \hat{b} \rightarrow \vec{\sigma} \cdot \hat{b}$$

Les résultats des mesures ont pour valeurs possibles ± 1 :

$$A(\hat{a}) = \varepsilon_a = \pm 1 \quad B(\hat{b}) = \varepsilon_b = \pm 1$$

Soit $p_{\varepsilon_a \varepsilon_b}$ la probabilité jointe pour qu'Alice trouve le résultat ε_a et Bob le résultat ε_b et soit $E(\hat{a}, \hat{b})$ la valeur moyenne $\langle \varepsilon_a \varepsilon_b \rangle$

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \sum \varepsilon_a \varepsilon_b p_{\varepsilon_a \varepsilon_b} = [p_{++} + p_{--}] - [p_{+-} + p_{-+}] \quad (6.27)$$

voyageur a par Alice révèle la couleur de la boule de la valise b : cette ouverture ne perturbe en rien la valise b , bien qu'elle détermine le résultat de Bob, ce qui fait que les résultats sont corrélés. La couleur de la boule contenue dans la valise b préexistait à l'ouverture de la valise a .

$E(\hat{a}, \hat{b})$ mesure la corrélation entre les mesures d'Alice et celles de Bob quand ceux-ci utilisent des axes $\hat{a}$ et $\hat{b}$. $E(\hat{a}, \hat{b})$ est obtenu expérimentalement en effectuant une série de $N \gg 1$ mesures sur N paires : si $A_n(\hat{a})$ et $B_n(\hat{b})$ sont les résultats de la mesure sur la paire n pour les orientations $(\hat{a}, \hat{b})$

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N A_n(\hat{a}) B_n(\hat{b})$$

$E(\hat{a}, \hat{b})$ est une donnée expérimentale, indépendante de tout *a priori* théorique. Considérons maintenant deux orientations possibles $\hat{a}$ et $\hat{a}'$ pour les mesures d'Alice et de même deux orientations possibles $\hat{b}$ et $\hat{b}'$ pour celles de Bob, et utilisons la notation abrégée $A'_n = A_n(\hat{a}')$, $B'_n = B_n(\hat{b}')$ pour la paire n . Soit X_n la combinaison

$$X_n = A_n B_n + A_n B'_n + A'_n B_n - A'_n B'_n = A_n(B_n + B'_n) + A'_n(B_n - B'_n) \quad (6.28)$$

Contrairement à celle de $E(\hat{a}, \hat{b})$, l'écriture de X_n repose sur un *a priori* théorique, celui du schéma envisagé par EPR où les particules a et b « possèdent » les propriétés $A_n, \dots, B'_n$. Un seul des quatre couples possibles $(A_n, B_n), \dots, (A'_n, B'_n)$ peut être effectivement mesuré dans une expérience sur la paire n , mais le résultat potentiel des trois autres expériences est bien défini, même s'il nous est inconnu. Pour chaque paire, la combinaison X_n vaut ± 2 . En effet, on a soit $B_n = B'_n$, auquel cas $B'_n - B_n = 0$ et $B_n + B'_n = \pm 2$, soit $B_n = -B'_n$, auquel cas $B_n + B'_n = 0$ et $B'_n - B_n = \pm 2$. Comme les valeurs possibles de A_n et A'_n sont ± 1 , on a nécessairement $X_n = \pm 2$. La moyenne sur un grand nombre d'expériences ne peut donner qu'une valeur moyenne $\langle X \rangle$ dont la valeur absolue est inférieure à deux

$$|\langle X \rangle| = \left| \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N X_n \right| \leq 2 \quad (6.29)$$

Le résultat $|\langle X \rangle| \leq 2$ est un exemple d'*inégalité de Bell*. Soulignons à nouveau que cette inégalité dépend de façon cruciale du réalisme local : la particule a possède *simultanément* les propriétés A_n et A'_n , la particule b les propriétés B_n et B'_n , et A_n dans (6.28) ne peut pas dépendre de l'orientation $\hat{b}$ ou $\hat{b}'$ de l'analyseur Bob.

Quelles sont les prédictions de la mécanique quantique ? Pour calculer $E(\hat{a}, \hat{b})$ défini en (6.27) on se sert de l'invariance par rotation de $|\Phi\rangle$ qui permet de choisir $\hat{a}$ suivant Oz : les états propres de $S_{\hat{a}}$, ou de $\vec{\sigma} \cdot \hat{a}$, sont alors les états propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de $S_z^{(a)}$. Soit θ l'angle entre $\hat{b}$ et Oz ; d'après (3.56), dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$|+, \hat{b}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle$$

Le produit tensoriel¹⁶ $|+\otimes[+, \hat{b}]\rangle$ est donc donné par

$$|+\otimes[+, \hat{b}]\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\otimes+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |+\otimes-\rangle \quad (6.30)$$

et l'amplitude a_{++} , telle que $p_{++} = |a_{++}|^2$ vaut

$$a_{++} = \langle +\otimes[+, \hat{b}]|\Phi\rangle = \langle +\otimes[+, \hat{b}]|+\otimes-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\theta}{2} \quad (6.31)$$

Par symétrie dans l'échange $+\leftrightarrow -$

$$p_{++} = p_{--} = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

et donc

$$p_{+-} = p_{-+} = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

ce que l'on peut vérifier par un calcul explicite (exercice 6.4.7). On en déduit

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \sin^2 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} = -\cos \theta = -\hat{a} \cdot \hat{b} \quad (6.32)$$

Une autre façon de calculer $E(\hat{a}, \hat{b})$ est de remarquer que $A(\hat{a}) = \varepsilon_a$ est la valeur propre de $\vec{\sigma} \cdot \hat{a}$, $B(\hat{b}) = \varepsilon_b$ de $\vec{\sigma} \cdot \hat{b}$, et la mesure de $(\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b})$ a pour résultat $\varepsilon_a \varepsilon_b$. $E(\hat{a}, \hat{b})$ n'est autre que la valeur moyenne de $(\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b})$ dans l'état $|\Phi\rangle$

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \langle (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b}) \rangle_{\Phi} = \langle \Phi | (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b}) | \Phi \rangle \quad (6.33)$$

L'exercice 6.4.7 montre que l'on retrouve bien (6.32) à partir de (6.33).

Faisons maintenant le choix suivant pour les axes de mesure des deux spins : $\hat{a}$ est parallèle à $\hat{z}$ et $\hat{b}$ est dirigé suivant la seconde bissectrice des axes $\hat{x}$ et $\hat{z}$ (figure 6.2), $\hat{a}'$ parallèle à $\hat{x}$ et $\hat{b}'$ suivant la première bissectrice, orthogonal à $\hat{b}$. Les différentes valeurs moyennes sont données par

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = E(\hat{a}, \hat{b}') = E(\hat{a}', \hat{b}') = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad E(\hat{a}', \hat{b}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (6.34)$$

La combinaison $\langle X \rangle$ de ces valeurs moyennes vaut $-2\sqrt{2}$ en mécanique quantique

$$\langle X \rangle = E(\hat{a}, \hat{b}) + E(\hat{a}, \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b}') - E(\hat{a}', \hat{b}) = -2\sqrt{2} \quad (6.35)$$

On peut montrer que le choix des orientations de la figure 6.2 donne la valeur maximale de $|\langle X \rangle|$: $|\langle X \rangle|_{\max} = 2\sqrt{2}$. Cette valeur viole la borne (6.29)

16. Nous rétablissons provisoirement la notation du produit tensoriel pour la clarté de l'écriture.

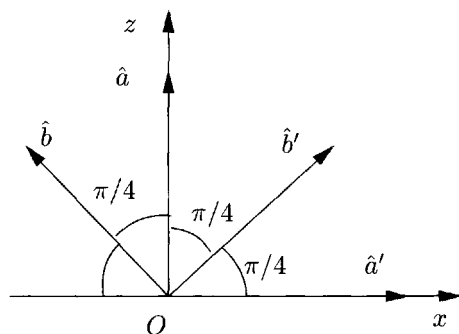


FIG. 6.2 – Configuration optimale des angles.

$|\langle X \rangle| \leq 2$. La mécanique quantique est incompatible avec les inégalités de Bell, et donc avec l'hypothèse EPR de réalisme local : les corrélations de la mécanique quantique sont trop fortes ! Les théories de variables additionnelles locales sont un exemple de théorie réaliste locale, et les prédictions de la mécanique quantique sont donc incompatibles avec toute théorie de ce type. La contradiction entre la mécanique quantique et les hypothèses EPR vient de ce qu'en mécanique quantique on ne peut pas attribuer simultanément des valeurs bien définies aux quatre quantités A_n, B_n, A'_n et B'_n de (6.28) pour une même paire de spins $1/2$, car ces quantités correspondent à des valeurs propres d'opérateurs qui ne commutent pas tous entre eux. Une expérience permet de mesurer au plus deux de ces quantités simultanément, et sur deux particules différentes, et on n'a pas le droit de supposer l'existence de ces quantités, même inconnues, dans un raisonnement physique. Contrairement à l'ouverture de la valise a , la mesure du spin de la particule a par Alice ne dévoile pas une propriété préexistante de la particule b ¹⁷. La quantité X_n dans (6.28) est « contrefactuelle », c'est-à-dire qu'elle ne peut être mesurée dans aucune expérience réalisable¹⁸.

Les expériences ont d'abord été réalisées avec deux photons provenant de la désexcitation successive de deux états excités d'un atome (cascade atomique),

17. De ce point de vue, la figure 2.18 de Lévy-Leblond et Balibar [1984] est susceptible d'une interprétation erronée : on peut comprendre que le quanton « possède » à la fois les propriétés d'onde et de particule, et que l'observation, qui met en évidence l'un ou l'autre de ces aspects, ne fait que dévoiler une réalité préexistante.

18. Comme l'écrit A. Peres [1995] : « Unperformed experiments have no results. » Il ne faudrait surtout pas en conclure qu'il est nécessairement illicite d'introduire dans la théorie des quantités non directement observables : par exemple les conséquences de la causalité sur une constante diélectrique dépendant du temps s'expriment le plus commodément en prenant sa transformée de Fourier et en montrant que cette transformée est une fonction analytique de la fréquence ω dans le demi-plan complexe $\text{Im } \omega > 0$. Pourtant on n'observe jamais expérimentalement une fréquence complexe ! Comme l'écrit Feynman (Feynman *et al.* [1965], chapitre 2) : « Il n'est pas vrai que nous puissions poursuivre une activité scientifique complète en utilisant uniquement les concepts directement soumis à l'expérience. »

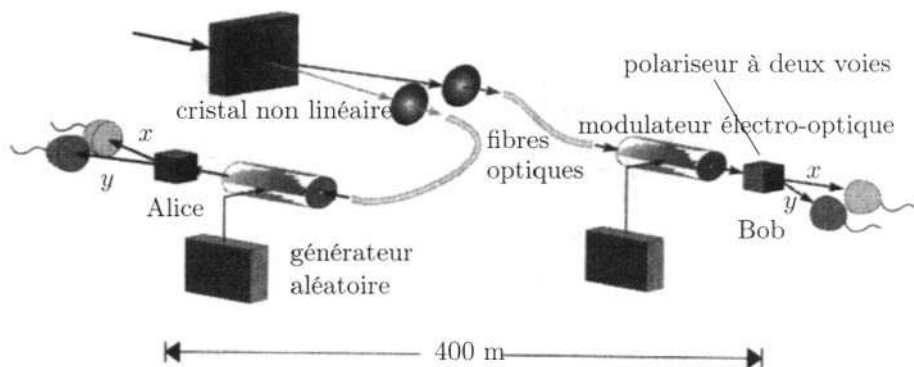


FIG. 6.3 – Expérience avec des photons intriqués. La paire de photons intriqués est produite dans un cristal non linéaire BBO et les deux photons partent dans des fibres optiques qui les amènent aux analyseurs de polarisation. D’après A. Zeilinger, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288 (1999).

les polarisations des deux photons étant intriquées dans un état¹⁹

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|DD\rangle + |GG\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|xx\rangle + |yy\rangle) \quad (6.36)$$

Les expériences d’Aspect *et al.*²⁰ au début des années 1980 ont été les premières à donner de façon convaincante des résultats excluant le réalisme local. Actuellement on réalise des expériences beaucoup plus précises en utilisant la conversion paramétrique de photons. Dans une expérience réalisée à Innsbrück²¹, un photon ultraviolet est converti dans un cristal non linéaire en deux photons dont l’état de polarisation est intriqué (figure 6.3). Dans cette expérience, on peut modifier de façon aléatoire l’orientation des analyseurs pendant que les photons sont en route entre leur point de production et les détecteurs. En effet les deux détecteurs sont distants de 400 m, distance franchie par la lumière en $1.3 \mu\text{s}$, alors que la durée combinée des mesures individuelles et de la rotation des polariseurs ne dépasse pas 100 ns et on élimine ainsi toute information qui pourrait être stockée à l’avance sur l’orientation des polariseurs. Il est impossible que les détections d’Alice et de Bob soient reliées de façon causale. La seule objection possible est que seulement 5 % des paires de photons sont détectés, et il faut admettre que ces 5 % constituent un échantillon représentatif. *A priori* on ne

19. Il faut faire très attention aux conventions d’orientation : cf. l’exercice 6.4.8.

20. A. Aspect, P. Grangier et G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982) ; A. Aspect, J. Dalibard et G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).

21. G. Weihs *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **81** 5039 (1998).

peut voir aucune raison qui s'y oppose²². On peut très raisonnablement affirmer que l'expérience a tranché en faveur de la mécanique quantique et a éliminé le principe de réalisme local d'Einstein. *La physique quantique est définitivement non locale*²³, même si l'on peut montrer que cette non-localité ne contredit jamais la relativité restreinte, en ne permettant pas par exemple de transmission d'information à une vitesse supérieure à celle de la lumière : Alice et Bob observent chacun une suite aléatoire de $+1$ et de -1 qui ne contient aucune information, et c'est seulement en comparant leurs résultats transmis par une voie classique, à une vitesse inférieure à c , qu'ils peuvent se rendre compte de leur corrélation. Mais même si la non localité de la mécanique quantique n'est pas en contradiction avec la relativité restreinte, il n'en reste pas moins qu'on observe au mieux une coexistence pacifique !

6.2.2 Interférences et états intriqués

Dans la discussion des expériences d'interférences du chapitre 1, nous avons insisté sur le fait que les interférences étaient détruites s'il était possible, au moins en principe, de connaître la trajectoire de la particule et de déterminer si elle était passée par une fente plutôt que par l'autre. La qualification « au moins en principe » est cruciale : il importe peu qu'un expérimentateur soit ou non présent pour effectuer l'observation, et il importe peu que l'observation soit ou non possible avec les techniques expérimentales d'aujourd'hui. Il suffit de concevoir que cette observation soit possible en principe dans le cadre du dispositif expérimental envisagé. L'utilisation des états intriqués va considérablement enrichir nos possibilités, et nous faire encore mieux apprécier l'étonnante singularité de la mécanique quantique par rapport aux préjugés hérités de notre expérience classique.

Imaginons une expérience où une particule 1 passe à travers un dispositif de fentes d'Young, et soit $|a\rangle$ (resp. $|a'\rangle$) l'état quantique où cette particule passe par la fente a (resp. a'), c'est-à-dire l'état quantique de la particule quand la fente a' (resp. a) est fermée. Supposons l'état de la particule 1 intriqué avec celui d'une particule 2, l'état global $|\Psi\rangle$ étant

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a \otimes b\rangle + |a' \otimes b'\rangle) \quad (6.37)$$

Si par exemple les deux particules sont issues de la désintégration d'une particule instable d'impulsion nulle, leurs impulsions sont corrélées par conservation de l'impulsion

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$$

22. On admet que le résultat de l'élection de Président de la République peut être prédit avec un bon niveau de confiance sur un échantillon de 1000 personnes sur 30 millions d'électeurs, soit 0.003 % !

23. Il n'y a aucune référence à l'espace-temps dans le vecteur $|\Phi\rangle$ (6.15). On parle aussi de la non-séparabilité du vecteur d'état.

tandis que le photon 2 part vers la droite avec une impulsion opposée, passe à travers une lentille convergente de focale f et est détecté sur un écran E_2 situé à une distance $2f$ de la lentille par une batterie de détecteurs. Le plan F des fentes d'Young est également situé à une distance $2f$ de la lentille. La position d'arrivée du photon 2 sur l'écran E_2 permet de remonter à celle du photon 1 sur le plan F , car les plans E_2 et F sont conjugués pour la lentille. Si un photon 1 est détecté sur l'écran E_1 après son passage à travers les fentes d'Young, un photon 2 sera détecté en coïncidence sur l'écran E_2 , ce qui donnera l'information sur la fente traversée. Les photons 1 ne vont donc pas former de figure d'interférences. Même en l'absence de lentille et de détecteur, il n'y aurait pas d'interférences, car on pourrait en principe installer la lentille et la batterie de détecteurs en E_2 et recueillir ainsi l'information sur la trajectoire du photon 1 : c'est l'existence du photon compagnon qui est cruciale.

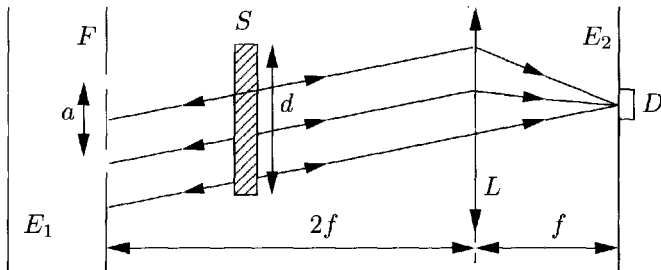


FIG. 6.5 – Interférences en coïncidence : le détecteur du photon 2 est placé maintenant dans un plan situé à une distance f de la lentille. L'information potentielle sur la trajectoire du photon 1 est effacée, et on observe une figure d'interférences si l'on détecte le photon 1 en coïncidence avec le photon 2.

Cependant il est possible d'effacer cette information potentielle en réalisant une expérience *différente* : un détecteur est placé dans le plan focal de la lentille (figure 6.5). La détection du photon 2 détermine alors la direction de l'impulsion du photon 2 avant la lentille, et par voie de conséquence celle du photon 1. Toute information sur la position du photon 1 au passage du plan F des fentes est maintenant effacée : le détecteur fonctionne comme une « gomme quantique ». Les photons 1 détectés *en coïncidence* avec un photon 2 vont se répartir sur une figure d'interférences sur l'écran E_1 , la position de la frange centrale étant fixée par la position du détecteur dans le plan focal de la lentille.

On doit toutefois faire la remarque suivante : l'angle caractéristique dans la géométrie de l'expérience est $\theta = a/D$, où a est la distance entre les fentes et D la distance des fentes à la source. La dispersion Δp_z sur la composante verticale de l'impulsion des photons produits dans la lame de hauteur d est

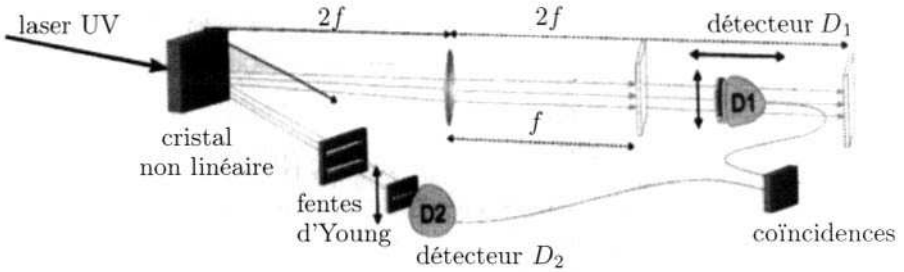


FIG. 6.6 – Expérience du groupe d’Innsbrück. La paire de photons intriqués est produite dans un cristal non linéaire. D’après A. Zeilinger, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288 (1999).

donnée en fonction de la longueur d’onde λ par

$$\Delta p_z \sim \frac{h}{d} \implies \frac{\Delta p_z}{p} \sim \frac{h}{dp} = \frac{\lambda}{d}$$

La discussion précédente suppose que cette dispersion est négligeable par rapport à θ

$$\frac{\lambda}{d} \ll \theta \quad (6.38)$$

En revanche, pour $\lambda/d \gg \theta$, on observera deux systèmes de franges indépendants si l’on fait passer les deux photons à travers des fentes d’Young (exercice 6.4.9).

L’expérience est réalisée dans une géométrie un peu différente : les deux photons sont produits par conversion paramétrique dans un cristal non linéaire d’un photon ultraviolet d’impulsion $\vec{P}$, et la condition $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$ est remplacée par $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{P}$. Les deux photons partent tous deux vers la droite avec une petite ouverture angulaire variable (figure 6.6). Pour obtenir la trajectoire du photon 1, il suffit sur les figures 6.4 et 6.5, de renverser sa direction de propagation à partir de la lame. L’expérience confirme en tout point la discussion précédente (figure 6.7).

6.2.3 États intriqués à trois particules : états GHZ

Les états GHZ (Greenberger-Horne-Zeilinger) sont des états intriqués à trois particules qui exhibent des propriétés non classiques de façon encore plus spectaculaire que les états à deux particules. On sait réaliser expérimentalement des états intriqués à trois photons en utilisant la conversion paramétrique. Afin de simplifier la discussion, nous nous limiterons à la discussion théorique d’états intriqués de trois particules de spin 1/2. On suppose qu’une particule instable se désintègre en trois particules identiques de spin 1/2, émises dans un plan, dans une configuration où les trois

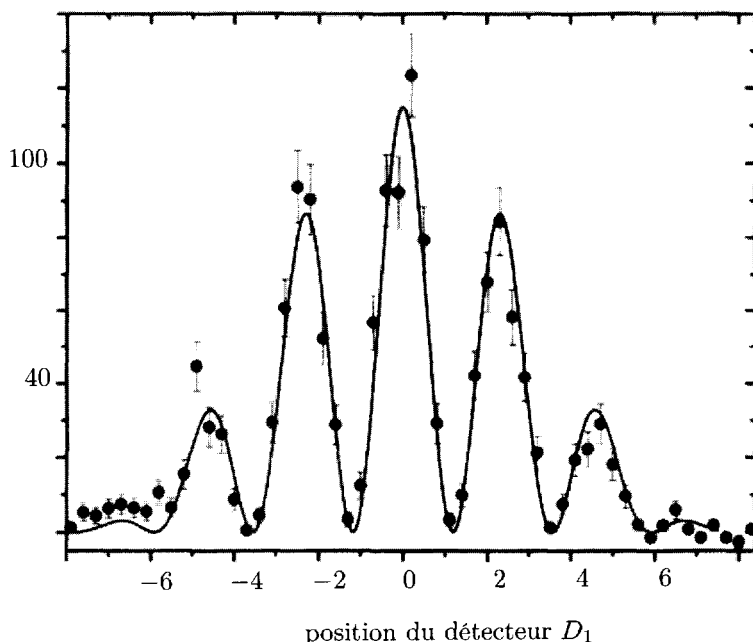


FIG. 6.7 – Interférences observées par le groupe d’Innsbrück. D’après A. Zeilinger, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288 (1999).

impulsions font entre elles un angle de $2\pi/3$ et dans l’état intriqué de spin

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+++ \rangle - |-- \rangle \right) \quad (6.39)$$

Trois expérimentateurs, Alice (a), Bob (b) et Charlotte (c), peuvent mesurer la composante du spin suivant une direction perpendiculaire à la direction de propagation de chaque particule (figure 6.8). Le plan des impulsions est le plan horizontal, l’axe Oz est choisi le long de la direction de propagation (il dépend donc de la particule), l’axe Oy est vertical et $\hat{x} = \hat{y} \times \hat{z}$. Examinons les trois opérateurs suivants

$$\Sigma_a = \sigma_{ax}\sigma_{by}\sigma_{cy} \quad \Sigma_b = \sigma_{ay}\sigma_{bx}\sigma_{cy} \quad \Sigma_c = \sigma_{ay}\sigma_{by}\sigma_{cx} \quad (6.40)$$

Les matrices σ_i agissent dans l’espace des états de spin de la particule i , $i = a, b, c$. L’indice i de Σ_i donne la position de la matrice σ_x dans les produits (6.40). Les trois opérateurs Σ_i commutent entre eux : pour le montrer, on utilise le fait que des matrices σ agissant sur des espaces différents commutent, par exemple

$$\sigma_{ax}\sigma_{by} = \sigma_{by}\sigma_{ax}$$

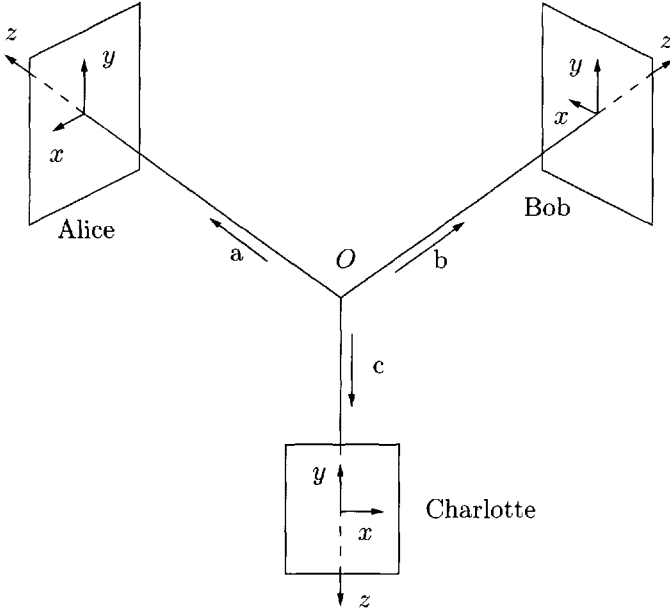


FIG. 6.8 – Configuration d’une expérience de type GHZ.

Pour des matrices agissant dans le même espace on se servira de (3.48)

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x$$

ainsi que de

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = I$$

Montrons par exemple que Σ_a et Σ_b commutent

$$\begin{aligned} \Sigma_a \Sigma_b &= \sigma_{ax} \sigma_{by} \sigma_{cy} \sigma_{ay} \sigma_{bx} \sigma_{cy} = \sigma_{ax} \sigma_{by} \sigma_{ay} \sigma_{bx} \\ &= -\sigma_{ay} \sigma_{ax} \sigma_{by} \sigma_{bx} = \sigma_{ay} \sigma_{bx} \sigma_{ax} \sigma_{by} \\ &= \sigma_{ay} \sigma_{bx} \sigma_{cy} \sigma_{cy} \sigma_{ax} \sigma_{by} = \Sigma_b \Sigma_a \end{aligned}$$

Les autres relations de commutation se démontrent de la même façon. Les opérateurs Σ_i sont de carré un ($\Sigma_i^2 = I$), leurs valeurs propres sont ± 1 , et comme ils commutent entre eux, ils peuvent être diagonalisés simultanément. Il existe donc un vecteur propre $|\Psi\rangle$ préservant la symétrie entre les trois particules, construit explicitement en (6.39), tel que

$$\Sigma_a |\Psi\rangle = \Sigma_b |\Psi\rangle = \Sigma_c |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad (6.41)$$

Les mesures de spin sont faites dans les configurations (x, y, y) , (y, x, y) et (y, y, x) : par exemple dans la configuration (x, y, y) , Alice oriente son appareil

de Stern-Gerlach dans la direction Ox , Bob et Charlotte dans la direction Oy . Les mesures de σ_{ix} ou de σ_{iy} ont toujours pour résultat ± 1 , et si le triplet de particules est dans l'état $|\Psi\rangle$, le produit des résultats d'Alice, Bob et Charlotte doit être $+1$, quelle que soit la configuration des appareils. En revanche, si ceux-ci sont dans la configuration (x, x, x) , le produit des résultats est -1 parce que

$$\sigma_{ax}\sigma_{bx}\sigma_{cx} = \Sigma = -\Sigma_a\Sigma_b\Sigma_c$$

et par conséquent, si $|\Psi\rangle$ est donné par (6.39)

$$\Sigma|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle \quad (6.42)$$

On vérifie sans peine que Σ commute avec Σ_a , Σ_b et Σ_c . Compte tenu de

$$\begin{aligned} \sigma_x|+\rangle &= |-\rangle & \sigma_x|-\rangle &= |+\rangle \\ \sigma_y|+\rangle &= i|-\rangle & \sigma_y|-\rangle &= -i|+\rangle \end{aligned}$$

on montre directement (6.41) en examinant l'action des Σ_i sur $|\Psi\rangle$; on montre de même (6.42) en faisant agir $\sigma_{ax}\sigma_{bx}\sigma_{cx}$ sur $|\Psi\rangle$

$$\begin{aligned} \sigma_{ax}\sigma_{bx}\sigma_{cx}|\Psi\rangle &= \sigma_{ax}\sigma_{bx}\sigma_{cx} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|+++ \rangle - |-- \rangle) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-- \rangle - |+++ \rangle) = -|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Essayons maintenant de rendre compte des résultats expérimentaux à l'aide du réalisme local : une fois les trois particules suffisamment éloignées, chacune d'entre elles possède en propre ses caractéristiques physiques. Notons A_x le résultat de la mesure de la composante x du spin de la particule a par Alice, ..., C_y celui de la composante y du spin de la particule c par Charlotte, avec $A_x, \dots, C_y = \pm 1$. Lorsqu'une mesure de la composante x est effectuée en conjonction avec deux mesures de la composante y , nous avons vu en (6.41) que le produit des résultats est $+1$

$$A_x B_y C_y = +1 \quad A_y B_x C_y = +1 \quad A_y B_y C_x = +1 \quad (6.43)$$

Cependant, alors que les particules sont en vol, les trois expérimentateurs peuvent décider de modifier l'orientation de leurs axes d'analyse et de les orienter tous suivant Ox ; le produit des trois composantes des spins vaut alors -1

$$A_x B_x C_x = -1 \quad (6.44)$$

Mais on remarque que

$$A_x B_x C_x = (A_x B_y C_y)(A_y B_x C_y)(A_y B_y C_x) = 1$$

car $A_y^2 = B_y^2 = C_y^2 = 1$. Les équations (6.43) et (6.44) sont incompatibles ! Il ne s'agit pas comme au § 6.2.1 d'une inégalité reposant sur des corrélations

statistiques, mais d'une anticorrélation parfaite ! Le réalisme local voudrait que la grandeur σ_{ax} ait une réalité physique au sens de EPR, puisque qu'on peut la mesurer sans perturber en rien la particule a en mesurant σ_{by} et σ_{cy} : $A_x = B_y C_y$. Mais on peut aussi obtenir A_x en mesurant σ_{bx} et σ_{cx} : $A_x = -B_x C_x$. Le réalisme local implique qu'il s'agit du *même* A_x , mais ce n'est pas le cas en mécanique quantique : la valeur de A_x est contextuelle, elle dépend des grandeurs physiques non compatibles entre elles qui sont mesurées simultanément à σ_{ax} , et A_x dans (6.43) n'est pas le même que A_x dans (6.44). Comme dans le cas des inégalités de Bell, le problème vient de ce que l'on ne peut pas mesurer simultanément les six quantités $A_x, \dots, C_y$, qui sont les valeurs propres d'opérateurs ne commutant pas tous entre eux, et la mesure simultanée de ces six quantités est contrefactuelle : on peut en mesurer au maximum trois dans une expérience. Les opérateurs $\Sigma_a, \Sigma_b, \Sigma_c$ et Σ commutent tous entre eux. Il serait donc possible d'envisager une expérience où ils soient mesurés tous les quatre simultanément. Mais le réalisme local exige en plus que la mesure du produit $\Sigma_a \Sigma_b \Sigma_c$ donne un résultat identique au produit des valeurs individuelles des six opérateurs de spin, ce qui n'est pas un énoncé compatible avec la physique quantique.

6.3 Applications

6.3.1 Mesure et décohérence

Dans l'interprétation de Bohr (ou de Copenhague) de la mesure en mécanique quantique exposée au chapitre 4, l'appareil de mesure est un objet classique : le résultat de la mesure se lit par exemple comme la position d'une aiguille sur un cadran. Cette interprétation est d'une efficacité remarquable, et elle est utilisée sans états d'âme par des milliers de physiciens. Du point de vue de la pratique quotidienne, il n'y a rien à y ajouter. Il n'en va pas de même si l'on réfléchit aux fondements de cette interprétation. En effet, les lois universelles de la physique sont quantiques, et la physique classique n'est qu'une approximation, dans certaines limites et sous certaines conditions qui restent d'ailleurs encore largement inconnues aujourd'hui, sauf dans des cas modèles trop simples pour être réalistes. On pourrait être tenté d'affirmer que les objets macroscopiques sont classiques, mais ce serait ignorer qu'il existe des échantillons macroscopiques de fluides quantiques comme l'hélium (^3He et ^4He) superfluides ou les supraconducteurs. Le processus de mesure commence certainement par une interaction microscopique entre l'objet quantique à mesurer et l'appareil de mesure, et la description de cette interaction relève du domaine quantique. Ensuite, par des processus dont personne ne maîtrise encore les détails, la mesure se traduit en fin de compte par un effet classique, la position d'une aiguille sur un écran. La faiblesse de la théorie de Bohr est que la frontière quantique-classique est floue, et peut être déplacée plus ou moins arbitrairement (jusqu'au cerveau de l'expérimentateur,

ce qui a donné lieu à une abondante littérature). Conscient de cette faiblesse de la théorie de Bohr, von Neumann avait proposé de la compléter grâce à un mécanisme de mesure comportant une interaction quantique initiale entre l'objet à mesurer et l'appareil de mesure, considéré lui aussi comme un objet quantique. Dans la théorie de von Neumann, on suit sans difficulté la première phase du processus de mesure, celle qui relève de l'équation d'évolution (4.11) et que l'on peut appeler *phase de pré-mesure*. Mais pour obtenir une véritable mesure, il faut *nécessairement* passer par une étape qui n'est plus régie par (4.11), mais par une évolution *irréversible*. L'interaction du système à mesurer S avec l'appareil de mesure M crée un état intriqué $S + M$. Cela ne pose aucun problème tant que M reste microscopique, mais ne peut pas persister jusqu'à la fin du processus de mesure. En effet, dans le cas contraire, rien n'interdirait à l'appareil de mesure de se trouver dans un état de superposition linéaire, et par exemple une aiguille pourrait pointer sur deux positions à la fois sur le cadran. La description de l'appareil de mesure relève d'un ensemble statistique classique, et non d'un vecteur d'état, et c'est l'interaction irréversible de M avec son environnement, ou *décohérence*, qui conduit à ce résultat. Il faut cependant souligner que si la décohérence est une étape essentielle du processus de mesure, elle ne suffit pas à rendre compte de l'intégralité de ce processus. Elle explique comment on passe d'une superposition quantique à un mélange statistique, mais elle n'a rien à dire sur l'origine du postulat II, ni sur le fait que d'une expérience particulière sur un système quantique émerge toujours un résultat unique.

Afin de rendre ces considérations plus concrètes, nous allons nous appuyer sur une expérience conduite à l'École Normale Supérieure en 1996²⁴, dont le schéma est donné dans la figure 6.9. Notre discussion sera schématique : des détails complémentaires se trouvent à l'annexe B. Dans cette expérience, la mesure est effectuée par un champ électromagnétique enfermé dans la cavité supraconductrice C du schéma de la figure 6.9. Le facteur de qualité de cette cavité est très élevé, de l'ordre de 5×10^7 : la vie moyenne T_r d'un photon dans la cavité est de quelques centaines de μs , alors que la fréquence de résonance ω_C est de $3.21 \times 10^{11} \text{ rad.s}^{-1}$ ($\nu_C = 51.1 \text{ GHz}$). Une fois le champ établi dans la cavité, on coupe toute interaction avec la source S du champ et on travaille avec un nombre moyen $\langle n \rangle$ de photons de 3 à 10. L'objet à mesurer est un atome qui parcourt le trajet de O aux détecteurs D en traversant la cavité. Cet atome peut exister dans deux états : un état fondamental $|g\rangle$ et un état excité²⁵ $|e\rangle$. Le passage de l'atome dans la cavité induit un déphasage $\pm\Phi$ du champ électromagnétique²⁶ selon l'état de l'atome. On note $|G\rangle$, déphasé de $+\Phi$ (resp. $|E\rangle$), déphasé de $-\Phi$ l'état (quantique) du champ après que l'atome dans l'état $|g\rangle$ (resp. $|e\rangle$) a traversé la cavité. Selon que l'atome est

24. M. Brune *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996).

25. Ces deux états sont des états de Rydberg d'un atome de rubidium, correspondant à un électron de valence dans un niveau $n \simeq 50$: exercice 14.5.4.

26. En effet, on travaille hors résonance, et les photons de la cavité ne sont pas absorbés par les atomes : voir § 5.2.4.

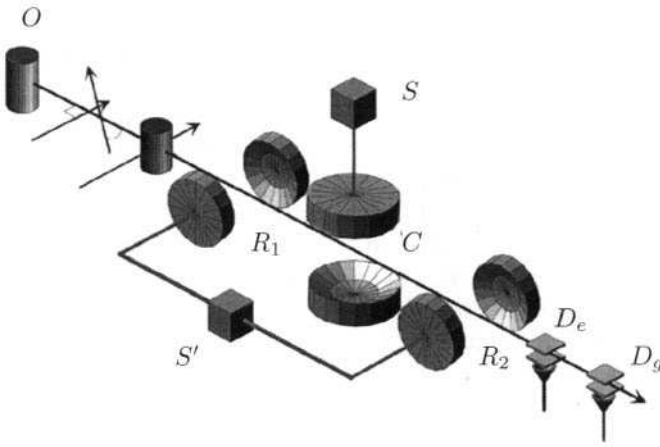


FIG. 6.9 – Expérience sur la décohérence. Les atomes sortent du four O et traversent une première cavité micro-onde R_1 . Ils traversent ensuite la cavité supraconductrice C puis la seconde cavité micro-onde R_2 . Les cavités R_1 et R_2 sont alimentées par la même source S . Les atomes sont finalement détectés par les deux détecteurs à ionisation D_e et D_g , qui sont déclenchés respectivement par les atomes dans les états e ou g . D'après M. Brune *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996).

dans l'état $|e\rangle$ ou $|g\rangle$, on obtient un vecteur d'état atome + champ

$$|eE\rangle \quad \text{ou} \quad |gG\rangle$$

La mesure de l'état du champ permet en principe²⁷ – sinon en pratique – de mesurer l'état de l'atome : si le champ est trouvé dans l'état $|E\rangle$, cela veut dire que l'atome était dans l'état $|e\rangle$, et l'état du champ est donc l'aiguille qui donne le résultat de la mesure. La position de l'aiguille est soit $+\Phi$, correspondant à $|g\rangle$, soit $-\Phi$, correspondant à $|e\rangle$, mais nous en sommes encore au stade d'une pré-mesure : toute l'évolution a été régie jusqu'à présent par une équation du type (4.11), pour un système atome + champ isolé. Les états $|G\rangle$ et $|E\rangle$ sont des états « presque classiques » : si le nombre de photons était grand, le module et la phase du champ seraient parfaitement définis²⁸. Une représentation module et phase de ces états est donnée dans la figure 6.10 : dans le plan complexe du champ électrique, le module du champ est proportionnel à la racine carrée $\langle n \rangle^{1/2}$ du nombre moyen de photons. Cependant, contrairement au cas classique, l'extrémité du vecteur champ

27. L'existence potentielle d'une telle mesure est confirmée par la disparition d'interférences : voir l'annexe B.

28. D'un point de vue technique, ces états sont des « états cohérents » : voir la section 11.2.

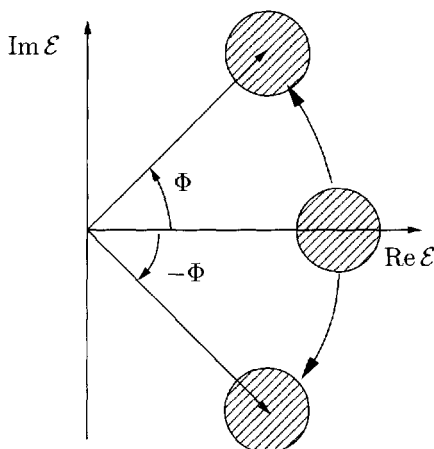


FIG. 6.10 – Représentation module et phase du champ électrique dans la cavité C . Les cercles hachurés donnent la dispersion sur l'extrémité du champ.

électrique n'est pas exactement fixée : elle est affectée par des fluctuations quantiques qui vérifient $\Delta n \Delta \Phi \sim 1$ (cf. § 11.3.4).

Appliquons en R_1 une impulsion micro-onde sur l'atome avant son passage dans C (figure 6.9). L'effet de cette impulsion sur le vecteur d'état de l'atome est le suivant

$$\begin{aligned} |e\rangle &\rightarrow |a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e\rangle + |g\rangle) \\ |g\rangle &\rightarrow |b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|e\rangle + |g\rangle) \end{aligned} \quad (6.45)$$

Si l'atome est initialement dans l'état $|e\rangle$, l'impulsion micro-onde l'envoie dans l'état $|a\rangle$, et l'état atome + champ est alors finalement l'état intriqué

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|eE\rangle + |gG\rangle) \quad (6.46)$$

mais on a toujours $E \rightarrow e$, $G \rightarrow g$. Les difficultés vont venir de ce que l'on peut faire des transformations linéaires sur l'état de l'atome *après* son passage dans C tant qu'une véritable mesure n'a pas été menée à son terme et que le système atome + champ est resté isolé. Au point où nous en sommes de la mesure lorsque l'atome sort de C , rien n'est joué, nous en sommes encore au stade d'une évolution réversible. Il est possible d'effectuer des transformations linéaires sur l'état de l'atome dont l'effet est de laisser le champ dans une superposition linéaire de $|E\rangle$ et $|G\rangle$. Pour ce faire, on applique une seconde

impulsion micro-onde en R_2 avant les détecteurs : $|\Psi\rangle$ devient $|\Psi'\rangle$

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle &= \frac{1}{2} \left[(|e\rangle + |g\rangle)|E\rangle + (-|e\rangle + |g\rangle)|G\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|e\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} (|E\rangle - |G\rangle) + |g\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} (|E\rangle + |G\rangle) \right] \quad (6.47) \end{aligned}$$

Si l'on décide maintenant d'utiliser l'atome comme appareil de mesure du champ, cette équation montre que selon que l'atome est détecté dans l'état $|e\rangle$ par D_e ou dans l'état $|g\rangle$ par D_g , le champ est dans une superposition linéaire

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|E\rangle - |G\rangle) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|E\rangle + |G\rangle) \quad (6.48)$$

Comme dans une expérience de type EPR, l'état final du champ n'est fixé qu'après l'interaction de l'atome avec le champ, car cet état est déterminé par des manipulations (dans la cavité R_2) postérieures à cette interaction : c'est un exemple d'expérience « à choix retardé ». L'équation (6.48) montre que l'appareil de mesure antérieur, le champ, est projeté dans un état de superposition linéaire. Contrairement aux états $|E\rangle$ et $|G\rangle$, les états (6.48) ne sont pas des états « presque classiques ». De tels états, qui sont appelés *chats de Schrödinger*²⁹, seraient *a priori* très surprenants pour des objets macroscopiques, et en fait c'est l'environnement qui privilégie les états où l'aiguille pointe sur une position déterminée ; comme on le verra à l'annexe B, les superpositions linéaires sont détruites très rapidement par les interactions avec l'environnement, et ceci d'autant plus vite que les objets sont gros. On ne peut pas vraiment identifier $|E\rangle$ et $|G\rangle$ aux deux positions d'une aiguille, et cette première étape de la mesure ne peut être en fait qu'une *pré-mesure*, car dans une mesure menée à son terme on n'observe pas de superpositions linéaires.

Pour en savoir plus sur l'état du champ, on envoie un second atome sonder le champ dans la cavité (une souris pour tester le chat !). Il est alors possible de montrer expérimentalement que l'état de superposition linéaire (6.48) est très fragile. La cohérence entre les états $|E\rangle$ et $|G\rangle$ disparaît au bout de quelques dizaines de microsecondes, en un temps beaucoup plus court que le temps de relaxation du champ, et ce dernier se retrouve dans un mélange statistique des états $|E\rangle$ et $|G\rangle$: c'est le phénomène de *décohérence*, dû au couplage dissipatif du champ avec son environnement. Si l'on avait initialement un état pur du champ

$$|\Phi\rangle = \lambda|E\rangle + \mu|G\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (6.49)$$

29. En transposant la discussion originale de Schrödinger, si l'état intriqué est (6.46), l'observation de l'atome dans l'état $|e\rangle$ entraîne la mort du chat (état $|E\rangle$), alors que le chat reste vivant (état $|G\rangle$) si l'atome est observé dans l'état $|g\rangle$. Après envoi de l'impulsion micro-onde et observation de l'état de l'atome, le chat est dans un état de superposition linéaire vivant + mort !

l'opérateur densité dans la base $\{|E\rangle, |G\rangle\}$ serait

$$\rho_{\text{in}} = \begin{pmatrix} |\lambda|^2 & \lambda\mu^* \\ \lambda^*\mu & |\mu|^2 \end{pmatrix} \quad (6.50)$$

La décohérence transforme cet opérateur densité en

$$\rho_{\text{fin}} = \begin{pmatrix} |\lambda|^2 & 0 \\ 0 & |\mu|^2 \end{pmatrix} \quad (6.51)$$

Dans le cas présent, la décohérence est due principalement à la fuite de photons en dehors de la cavité, en raison des imperfections des miroirs. Les éléments non diagonaux, aussi appelés *cohérences*, qui contiennent l'information sur la phase, tendent très rapidement vers zéro. Cette évolution $\rho_{\text{in}} \rightarrow \rho_{\text{fin}}$ est non unitaire : elle n'est pas régie par un hamiltonien. En effet l'interaction du champ avec son environnement conduit à un état intriqué champ + environnement, et l'opérateur densité du champ est obtenu par une trace partielle

$$\rho_{\text{champ}} = \text{Tr}_{\text{env}}[\rho_{\text{champ+env}}]$$

Cette évolution non unitaire se traduit par une fuite d'information vers les degrés de liberté de l'environnement, correspondant à un accroissement de l'entropie statistique du champ, caractéristique d'un phénomène dissipatif

$$S_{\text{stat}}(\rho_{\text{fin}}) \geq S_{\text{stat}}(\rho_{\text{in}})$$

En résumé, le processus de mesure débute par une interaction $S + M$ régie par (4.11), mais cela ne suffit pas pour mener la mesure à son terme. Il est nécessaire de passer par une étape d'évolution irréversible, avec une fuite d'information vers des degrés de liberté inobservables. Tant que le système $S + M$ reste isolé, la mesure ne peut être achevée et en reste à l'étape de pré-mesure. C'est l'interaction de M avec l'environnement qui est responsable de l'irréversibilité et de la décohérence. L'expérience de l'ENS permet de montrer la propriété de décohérence dans une situation expérimentale bien contrôlée, même s'il y a encore une marge considérable entre une cavité contenant quelques photons et un appareil de mesure macroscopique. Cependant il semble acquis que l'interaction avec l'environnement est bien à l'origine de la perte d'information sur les phases et de l'absence de chats de Schrödinger : par exemple une superposition cohérente de deux paquets d'ondes partant en sens inverse doit perdre rapidement sa cohérence de phase, et donner un mélange statistique de deux états d'impulsion opposée. La plus grande partie de l'espace de Hilbert des états est extrêmement fragile à cause de l'environnement, et après un temps très court, seule subsiste une fraction minimale de cet espace, celle qui est sélectionnée par la décohérence et définit les mélanges statistiques d'états possédant une limite classique, les états robustes vis-à-vis de la dissipation dans l'environnement : le chat de Schrödinger est soit vivant, soit mort !

6.3.2 Information quantique

Pour conclure ce chapitre, nous allons examiner quelques applications des états intriqués à *l'information quantique*, c'est-à-dire la théorie du traitement et de la transmission de l'information qui utilise les spécificités de la mécanique quantique. Comme résultat préliminaire, montrons le *théorème de non clonage quantique*. La condition indispensable pour que la méthode de cryptographie quantique décrite au § 3.1.3 soit parfaitement sûre est que l'espionne Ève ne puisse pas reproduire (cloner) l'état de la particule envoyée par Bob à Alice tout en conservant pour elle le résultat de sa mesure, ce qui rendrait l'interception du message indétectable. Que ceci ne soit pas possible est garanti par le théorème de non clonage quantique. Pour montrer ce théorème, supposons que l'on souhaite dupliquer un état quantique *inconnu* $|\chi_1\rangle$. Le système sur lequel on veut imprimer la copie est noté $|\varphi\rangle$: c'est l'équivalent de la feuille blanche. Par exemple, si l'on veut cloner un état de spin $1/2$ $|\chi_1\rangle$, $|\varphi\rangle$ est aussi un état de spin $1/2$. L'évolution du vecteur d'état dans le processus de clonage doit être de la forme

$$|\chi_1 \otimes \varphi\rangle \rightarrow |\chi_1 \otimes \chi_1\rangle \quad (6.52)$$

Cette évolution est régie par un opérateur unitaire U qu'il n'est pas nécessaire de préciser

$$U|\chi_1 \otimes \varphi\rangle = |\chi_1 \otimes \chi_1\rangle \quad (6.53)$$

U doit être indépendant de $|\chi_1\rangle$, qui est inconnu par hypothèse. Si l'on veut cloner un second original $|\chi_2\rangle$, on doit avoir

$$U|\chi_2 \otimes \varphi\rangle = |\chi_2 \otimes \chi_2\rangle$$

Évaluons maintenant le produit scalaire

$$X = \langle \varphi \otimes \chi_1 | U^\dagger U | \varphi \otimes \chi_2 \rangle$$

de deux façons différentes

$$\begin{aligned} (1) \quad X &= \langle \varphi \otimes \chi_1 | \varphi \otimes \chi_2 \rangle = \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle \\ (2) \quad X &= \langle \chi_1 \otimes \chi_1 | \chi_2 \otimes \chi_2 \rangle = (\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle)^2 \end{aligned} \quad (6.54)$$

Il en résulte que soit $|\chi_1\rangle \equiv |\chi_2\rangle$, soit $\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle = 0$. Cette preuve du théorème de non clonage explique pourquoi on ne peut pas se restreindre en cryptographie quantique à une base d'états de polarisation orthogonaux $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ pour les photons. C'est l'utilisation de superpositions linéaires des états de polarisation $|x\rangle$ et $|y\rangle$ qui permet de détecter la présence éventuelle d'un espion.

Venons-en maintenant au second sujet de cette sous-section, le calcul quantique. En théorie de l'information, l'unité élémentaire est le bit, qui peut prendre deux valeurs, conventionnellement 0 ou 1. Ce bit est stocké

classiquement par un système à deux états, par exemple un condensateur qui peut être non chargé (valeur 0 du bit) ou chargé (valeur 1 du bit). Un bit d'information implique typiquement 10^6 électrons dans la mémoire vive d'un ordinateur actuel. Une question intéressante est alors : est-il possible de stocker l'information sur des électrons (ou d'autres particules) isolé(s) ? Ainsi que nous l'avons déjà vu, un système quantique à deux états est susceptible de stocker un bit d'information : par exemple nous avons utilisé au § 3.1.3 deux états de polarisation orthogonaux d'un photon pour stocker un bit. Pour fixer les idées, nous allons plutôt utiliser les deux états de polarisation d'un spin $1/2$: par convention l'état de spin down $|-\rangle$ correspondra à la valeur 0, l'état de spin up $|+\rangle$ à la valeur 1. Mais, contrairement au système classique qui ne peut exister que dans les états 0 ou 1, le système quantique peut exister dans des états de superposition linéaire $|\varphi\rangle$ de $|+\rangle$ et $|-\rangle$

$$|\varphi\rangle = \lambda|+\rangle + \mu|-\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (6.55)$$

Au lieu d'un bit ordinaire, le système quantique stocke un *bit quantique*, ou *q-bit*, dont la valeur dans l'état (6.55) reste indéterminée jusqu'à la mesure de la composante z du spin : la mesure donnera le résultat 0 avec une probabilité $|\mu|^2$, et le résultat 1 avec une probabilité $|\lambda|^2$, ce qui n'est pas en soi une propriété particulièrement utile. L'information stockée à l'aide de q-bits est un exemple d'information quantique. Le théorème de non clonage implique qu'il est impossible de recopier cette information exactement.

Supposons que nous voulions inscrire dans un registre un nombre entre 0 et 7. Il faudra pour cela disposer de 3 bits. En effet, dans un système de base 2, on peut représenter un nombre de 0 à 7 par une suite de trois nombres 0 ou 1. Un registre classique stockera l'une des huit configurations suivantes

$$\begin{aligned} 0 &= \{000\} & 1 &= \{001\} & 2 &= \{010\} & 3 &= \{011\} \\ 4 &= \{100\} & 5 &= \{101\} & 6 &= \{110\} & 7 &= \{111\} \end{aligned}$$

Un système de trois spins $1/2$ permettra également de stocker un nombre de 0 à 7, par exemple en faisant correspondre ces nombres aux huit états suivants de trois spins

$$\begin{aligned} 0 : |---\rangle & \quad 1 : |--+ \rangle & \quad 2 : |-+- \rangle & \quad 3 : |++ \rangle \\ 4 : |+- \rangle & \quad 5 : |+ -+ \rangle & \quad 6 : |+-+ \rangle & \quad 7 : |+++ \rangle \end{aligned} \quad (6.56)$$

On notera $|x\rangle$, $x = 0, \dots, 7$ un des huit états de (6.56), par exemple $|5\rangle = |+-+\rangle$. Comme on peut former une superposition linéaire des états (6.56), on pourrait en conclure que le vecteur d'état d'un système de trois spins nous a permis de stocker d'un seul coup $2^3 = 8$ nombres, et avec n spins on pourrait stocker 2^n nombres ! Cependant une mesure des trois spins suivant l'axe Oz donnera nécessairement un des huit états (6.56). Nous disposons d'une importante information virtuelle, mais lorsque nous cherchons à la matérialiser

dans une mesure effective, nous ne faisons pas mieux que le système classique : la mesure donne un des huit nombres, et pas les huit à la fois !

Quel gain peut-on alors attendre d'un ordinateur quantique qui fonctionnerait avec des q-bits ? En fait, un ordinateur quantique serait susceptible de mener en parallèle un grand nombre d'opérations. Les opérations élémentaires sur les q-bits, et donc sur les états du type (6.56), sont des évolutions unitaires régies par l'équation d'évolution (4.11), ou sa version intégrale (4.14). Dans certains cas, une information utile pourrait être extraite de ces opérations, si l'on peut utiliser le calcul parallèle quantique. Le principe d'un tel calcul est le suivant : un registre d'entrée de n q-bits stocke un état $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle \quad (6.57)$$

où $|x\rangle$ a été défini précédemment dans le cas $n = 3$. Si l'on part de l'état $|- \dots -\rangle$, on peut montrer qu'il suffit de n (et non $\exp n$) opérations élémentaires pour arriver à (6.57). On construit ensuite le produit tensoriel $|\Psi\rangle$ de $|\psi\rangle$ avec l'état $|0\rangle$ d'un registre de sortie de 2^m q-bits

$$|\Psi\rangle = |\psi \otimes 0\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x \otimes 0\rangle \quad (6.58)$$

et une opération unitaire correspondant à une évolution temporelle du système transforme $|\Psi\rangle$ en $|\Psi'\rangle$

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x \otimes f(x)\rangle \quad (6.59)$$

L'ensemble des deux registres contient *simultanément* les 2^{n+m} valeurs du couple $(x, f(x))$. Bien sûr une mesure donnera un couple unique, mais il est possible d'utiliser l'information stockée dans le vecteur d'état (6.59) pour effectuer par exemple une transformée de Fourier sur cette superposition et échantillonner ensuite le spectre de puissance pour remonter à la période de $f(x)$: nous renvoyons le lecteur intéressé aux articles cités en référence.

Un exemple est la détermination de la période d'une fonction $f(x)$. Supposons $f(x)$ définie sur Z_N , le groupe additif des entiers modulo N ; un algorithme mis en œuvre sur un ordinateur classique exige un nombre d'opérations de l'ordre de N , alors qu'avec un ordinateur quantique ce nombre serait $O(\ln^2 N)$. Ce résultat est à la base de l'algorithme de Shor pour la décomposition d'un nombre en facteurs premiers, la fonction $f(x)$ étant alors $a^x \bmod N$, a entier. Pour un entier N , cet algorithme requiert $O(\ln^3 N)$ opérations sur un ordinateur quantique, alors que les algorithmes classiques exigent $O(\exp[(\ln N)^{1/3}])$ opérations.

La principe d'algorithmes fonctionnant sur des ordinateurs quantiques étant acquis, reste la réalisation concrète d'un tel ordinateur. Les avis sur cette question sont partagés : ils vont du pessimisme intégral à un optimisme

mesuré. À l'heure actuelle, un groupe d'IBM³⁰ vient d'obtenir la factorisation de $15 : 15 = 3 \times 5$ (!) à l'aide d'un ordinateur quantique utilisant la RMN, mais on est encore très loin de résultats utiles. Le principal problème est celui de la décohérence : en effet le calcul parallèle décrit précédemment exige que l'évolution soit unitaire, ce qui implique l'absence d'interactions incontrôlées avec l'environnement. Bien sûr une isolation totale est impossible : il s'agit au mieux de réduire au maximum les perturbations induites par l'environnement, et de concevoir des algorithmes de correction d'erreurs inévitables en utilisant une information redondante.

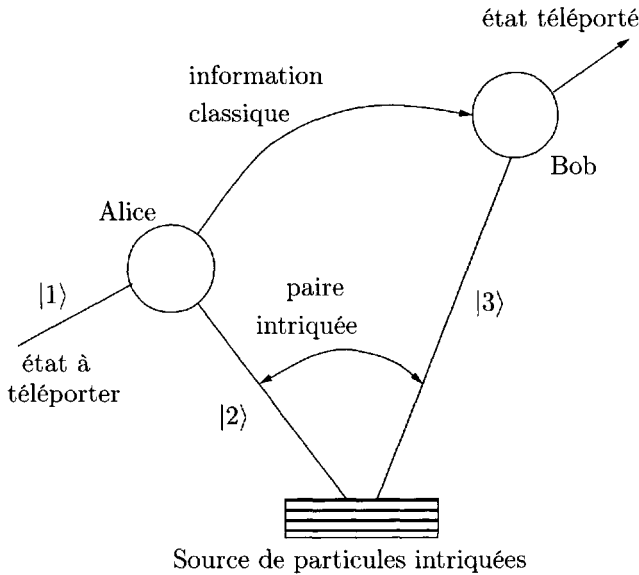


FIG. 6.11 – Téléportation : Alice effectue une mesure de Bell sur les particules 1 et 2 et informe Bob du résultat par une voie classique.

La *téléportation* est une application amusante des états intriqués, qui pourrait servir à transférer l'information quantique (figure 6.11). Supposons qu'Alice souhaite transférer à Bob l'information sur l'état de spin $|\varphi\rangle_1$ d'une particule 1 de spin $1/2$

$$|\varphi\rangle_1 = \lambda|+\rangle_1 + \mu|-\rangle_1 \quad (6.60)$$

qui lui est *a priori* inconnu, sans lui transmettre directement cette particule. Elle ne peut pas faire une mesure du spin, car elle ne connaît pas l'orientation du spin de la particule 1, et toute mesure projetterait en général $|\varphi\rangle_1$ sur un autre état. Le principe du transfert de l'information consiste à utiliser une paire de particules intriquées 2 et 3 de spin $1/2$: la particule 2 est utilisée par Alice et la particule 3 est envoyée vers Bob. Ces particules 2 et 3 se trouvent

30. L. Vandersypen *et al.*, *Nature* **414**, 883 (2001).

par exemple dans l'état de spin (6.15) que nous noterons ici $|\Phi^-\rangle_{23}$

$$|\Phi^-\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle_{23} - |-+\rangle_{23} \right) \quad (6.61)$$

Alice va mesurer l'état de spin de la paire de particules 1 et 2 en utilisant une base particulière, la *base des états de Bell* : l'état de spin de la paire de particules 1 et 2 (non intriquées) peut se décomposer sur cette base formée d'états intriqués

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle_{12} + |-+\rangle_{12} \right) \\ |\Phi^-\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+-\rangle_{12} - |-+\rangle_{12} \right) \\ |\Psi^+\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|++\rangle_{12} + |--\rangle_{12} \right) \\ |\Psi^-\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|++\rangle_{12} - |--\rangle_{12} \right) \end{aligned} \quad (6.62)$$

L'état de spin des trois particules est

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{123} &= |\varphi\rangle_1 \otimes |\Phi^-\rangle_{23} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\lambda |++-\rangle_{123} + \mu |-+-\rangle_{123} - \lambda |+-+\rangle_{123} - \mu |--+\rangle_{123} \right) \end{aligned} \quad (6.63)$$

On utilise maintenant

$$|++\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Psi^+\rangle_{12} + |\Psi^-\rangle_{12} \right)$$

et trois relations analogues pour réécrire

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{123} &= \frac{1}{2} \left[|\Psi^+\rangle_{12} \left(-\mu |+\rangle_3 + \lambda |-\rangle_3 \right) + |\Psi^-\rangle_{12} \left(\mu |+\rangle_3 + \lambda |-\rangle_3 \right) \right. \\ &\quad \left. + |\Phi^+\rangle_{12} \left(-\lambda |+\rangle_3 + \mu |-\rangle_3 \right) - |\Phi^-\rangle_{12} \left(\lambda |+\rangle_3 + \mu |-\rangle_3 \right) \right] \end{aligned} \quad (6.64)$$

La mesure par Alice de l'état de spin de la paire de particules 1 et 2 projette cet état sur l'un des quatre états de base (6.62), ce qui projette l'état de la particule 3 sur l'état correspondant dans (6.64). Par exemple si la mesure projette sur $|\Phi^-\rangle_{12}$, l'état de spin de la particule 3 est $|\varphi\rangle_3 = \lambda |+\rangle_3 + \mu |-\rangle_3$. Alice transmet alors à Bob par une voie classique le résultat de sa mesure, et Bob sait que la particule 3 lui arrive précisément dans l'état inconnu de départ (6.60), mais qui reste tout aussi inconnu ! L'état de la particule 1 a été téléporté, mais il n'y a jamais eu de mesure de cet état. Si le résultat de la mesure d'Alice n'est pas $|\Phi^-\rangle_{12}$, Bob en sait assez pour faire la correction et appliquer un champ magnétique convenable pour réorienter son spin dans l'état (6.60).

Il est utile d'ajouter les remarques finales suivantes :

- À aucun moment les coefficients λ et μ ne sont mesurés, et l'état $|\varphi\rangle_1$ est détruit au cours de la mesure faite par Alice. Il n'y a donc pas de contradiction avec le théorème de non clonage.
- Bob ne « connaît » l'état de la particule 3 que lorsqu'il a reçu le résultat de la mesure d'Alice. La transmission de cette information doit se faire par une voie classique, à une vitesse au plus égale à celle de la lumière. Il n'y a donc pas transmission instantanée de l'information à distance.
- Il n'y a jamais transport de matière dans la téléportation.

6.4 Exercices

6.4.1 Indépendance du produit tensoriel par rapport au choix de la base

Vérifier que la définition (6.3) du produit tensoriel de deux vecteurs est bien indépendante du choix de la base dans $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$.

6.4.2 Produit tensoriel de deux matrices 2×2

Écrire explicitement la matrice 4×4 produit tensoriel des matrices 2×2

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

6.4.3 Propriétés des opérateurs densité

1. On construit avec les éléments de matrice ρ_{ii} , ρ_{ij} , ρ_{ji} et ρ_{jj} d'un opérateur densité ρ la matrice 2×2

$$A = \begin{pmatrix} \rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & \rho_{jj} \end{pmatrix}$$

Montrer que $\rho_{ii} \geq 0$, $\rho_{jj} \geq 0$ et que $\det A \geq 0$, d'où $|\rho_{ij}|^2 \leq \rho_{ii}\rho_{jj}$. En déduire également que si $\rho_{ii} = 0$, alors $\rho_{ij} = \rho_{ji}^* = 0$.

2. Montrer que s'il existe un test maximal donnant une probabilité de 100 % pour l'état physique décrit par un opérateur densité ρ , alors cet état est un cas pur. Montrer également que si ρ décrit un cas pur, et que l'on peut écrire

$$\rho = \lambda \rho' + (1 - \lambda) \rho'' \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

alors $\rho = \rho' = \rho''$

3. En revanche, dans le cas d'un mélange, un opérateur densité ne détermine pas l'ensemble dont il est issu de façon unique. Soit par exemple l'opérateur densité en dimension 2, $0 \leq p \leq 1$

$$\rho = p|+\rangle\langle+| + (1-p)|-\rangle\langle-|$$

et les vecteurs unitaires mais non orthogonaux

$$\begin{aligned}|a\rangle &= \sqrt{p}|+\rangle + \sqrt{(1-p)}|-\rangle \\ |b\rangle &= \sqrt{p}|+\rangle - \sqrt{(1-p)}|-\rangle\end{aligned}$$

Trouver une valeur de p' telle que

$$\rho = p'|a\rangle\langle a| + (1-p')|b\rangle\langle b|$$

4. Soit $|\Psi\rangle$ l'état pur dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{H}_1^{(N)} \otimes \mathcal{H}_2^{(M)}$

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M c_{ij} |\varphi_i \otimes \chi_j\rangle$$

Donner l'expression de $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ et montrer que l'opérateur densité réduit $\rho^{(1)}$ dans $\mathcal{H}_1^{(N)}$ vaut

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{ijkl} c_{ij} c_{kl}^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_k| \langle\chi_l|\chi_j\rangle \quad (6.65)$$

Suggestion : montrer que $\text{Tr}|a\rangle\langle b| = \langle b|a\rangle$. En déduire (ou montrer directement) que si $N = M$ et dans le cas particulier

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\varphi_i \otimes \chi_i\rangle$$

on obtient

$$\rho^{(1)} = \sum_i c_i c_j^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \langle\chi_j|\chi_i\rangle \quad (6.66)$$

Si les $|\chi_i\rangle$ sont orthogonaux, $\langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij}$, que peut-on dire des cohérences dans $\rho^{(1)}$?

6.4.4 Opérateur densité pour le spin 1/2

On considère un système quantique à deux niveaux : l'espace de Hilbert des états est de dimension deux. On se propose d'étudier l'opérateur densité d'un tel système. Les applications en sont multiples : description de la polarisation d'une particule massive de spin 1/2, de la polarisation d'un

photon, d'un atome à deux niveaux, etc. Comme un cas très courant de système à deux niveaux est celui du spin $1/2$, nous utiliserons ce cas particulier pour fixer les notations et la terminologie. On choisit deux vecteurs de base de l'espace des états notés $|+\rangle$ et $|-\rangle$, qui sont par exemple les vecteurs propres de la composante z du spin. Dans cette base l'opérateur densité est représenté par une matrice 2×2 , la matrice densité ρ .

1. La matrice densité doit être hermitique et de trace 1

$$\rho = \begin{pmatrix} a & c \\ c^* & 1-a \end{pmatrix}$$

où a est un nombre réel et c un nombre complexe. Montrer que la positivité de ρ (et donc de ses valeurs propres) introduit une contrainte supplémentaire sur les éléments de la matrice :

$$0 \leq a(1-a) - |c|^2 \leq \frac{1}{4}$$

Montrer que la condition nécessaire et suffisante pour que ρ décrive un cas pur est que $a(1-a) = |c|^2$. Calculer a et c pour la matrice densité décrivant le vecteur d'état normalisé $|\psi\rangle = \lambda|+\rangle + \mu|-\rangle$ avec $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$, et vérifier que cette matrice densité représente bien un cas pur.

2. Montrer que ρ peut s'écrire en fonction d'un vecteur $\vec{b}$, appelé *vecteur de Bloch*

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & 1-b_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (I + \vec{b} \cdot \vec{\sigma})$$

pourvu que $|\vec{b}|^2 \leq 1$. L'opérateur vectoriel $\vec{\sigma}$ a pour composante les matrices de Pauli σ_i (3.47). Montrer que le cas pur correspond à $|\vec{b}|^2 = 1$. Le cas pur $|\vec{b}| = 1$ est aussi appelé complètement polarisé, le cas $\vec{b} = 0$ non polarisé, ou de polarisation nulle, et le cas $0 < |\vec{b}| < 1$ partiellement polarisé. Pour interpréter physiquement le vecteur $\vec{b}$, on calcule la valeur moyenne du spin $\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$

$$\langle S_i \rangle = \text{Tr}(\rho S_i)$$

En déduire que $\frac{1}{2} \hbar \vec{b}$ est la valeur moyenne du spin.

3. Lorsque le spin est placé dans un champ magnétique $\vec{B}$ constant, le hamiltonien est donné par (3.61)

$$H = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}$$

où γ est le facteur gyromagnétique, $\gamma \simeq q/m$ pour un électron de charge q et de masse m . En supposant que $\vec{B}$ est parallèle à l'axe Oz , $\vec{B} = (0, 0, B)$, calculer à partir de (6.26) l'équation d'évolution de ρ et montrer que le vecteur $\vec{b}$ tourne (précesse) autour de $\vec{B}$ avec une fréquence angulaire que l'on déterminera. Comparer avec le cas du mouvement d'un moment magnétique classique (3.31) et retrouver les résultats du § 3.2.5.

6.4.5 Structure fine et effet Zeeman du positronium

Le positronium est un état lié électron-positron très semblable à l'état lié électron-proton de l'atome d'hydrogène.

1. Calculer l'énergie de l'état fondamental du positronium en fonction de celui de l'atome d'hydrogène. On rappelle que la masse du positron est égale à celle de l'électron.

2. Dans la suite de l'exercice, on s'intéressera uniquement à la structure en spin de l'état fondamental du positronium. L'espace des états à prendre en compte est donc un espace $\mathcal{H}$ à quatre dimensions, produit tensoriel des espaces des états de spin $1/2$ de l'électron et du positron. Suivant les notations du § 6.1.2, on notera $|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle$ un état où la composante z du spin de l'électron est $\hbar\varepsilon_1/2$ et celle du positron $\hbar\varepsilon_2/2$, avec $\varepsilon = \pm 1$. Déterminer l'action des opérateurs $\sigma_{1x}\sigma_{2x}$, $\sigma_{1y}\sigma_{2y}$ et $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ sur les quatre états de base $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$ et $|--\rangle$ de $\mathcal{H}$. En déduire l'action sur ces états de

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = \sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}$$

3. Montrer que les quatre vecteurs

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |++\rangle \\ |II\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |III\rangle &= |--\rangle \\ |IV\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \end{aligned}$$

forment une base orthonormée de $\mathcal{H}$ et que ces vecteurs sont vecteurs propres de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ avec des valeurs propres 1 et -3 .

4. Déterminer les projecteurs $\mathcal{P}_1$ et $\mathcal{P}_{-3}$ sur les sous-espaces des valeurs propres 1 et -3 , en écrivant ces projecteurs sous la forme

$$\lambda I + \mu \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$$

5. Montrer que l'opérateur $\mathcal{P}_{12}$

$$\mathcal{P}_{12} = \frac{1}{2}(I + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$

échange les valeurs de ε_1 et ε_2

$$\mathcal{P}_{12}|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = |\varepsilon_2 \varepsilon_1\rangle$$

6. Le hamiltonien H_0 du système de spins est donné en l'absence de champ extérieur par

$$H_0 = E_0 I + A \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad A > 0$$

où E_0 et A sont des constantes. Déterminer les vecteurs propres et valeurs propres de H_0 .

7. Le positronium est placé dans un champ magnétique $\vec{B}$ uniforme et constant parallèle à Oz . Montrer que le hamiltonien devient

$$H = H_0 - \frac{q_e \hbar}{2m} B(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$$

où m est la masse de l'électron et q_e sa charge. Déterminer la matrice représentative de H dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$. On définit le paramètre x par

$$\frac{q_e \hbar}{2m} B = -Ax$$

Déterminer les valeurs propres de H et tracer sur un graphique leur dépendance en fonction de x .

6.4.6 Ondes de spin et magnons

NB: Cet exercice utilise les notations et les résultats des questions 2 à 5 de l'exercice précédent.

On peut représenter un corps ferromagnétique à une dimension comme une chaîne de spins $1/2$: N spins $1/2$ numérotés $n = 0, \dots, N-1$, $N \gg 1$, sont disposés en chaque point d'un réseau à une distance l l'un de l'autre. Il sera commode d'utiliser des conditions aux limites périodiques, où le spin N est identifié au spin 0 : $N \equiv 0$. On suppose que chaque spin peut interagir uniquement avec ses deux plus proches voisins et le hamiltonien s'écrit en fonction d'une constante A

$$H = \frac{1}{2} N A I - \frac{1}{2} A \sum_{n=0}^{N-1} \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1}$$

1. Montrer que toute valeur propre E de H vérifie $E \geq 0$ et que le minimum E_0 correspondant à l'état fondamental est atteint quand tous les spins sont orientés dans la même direction. Dans la suite de l'exercice on choisira cette direction comme axe des z . Un choix possible pour l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ est alors³¹

$$|\Phi_0\rangle = |++++\dots++\rangle$$

2. Montrer que H s'écrit

$$H = N A I - A \sum_{n=0}^{N-1} \mathcal{P}_{n,n+1} = A \sum_{n=0}^{N-1} (I - \mathcal{P}_{n,n+1})$$

31. Tout état obtenu à partir de $|\Phi_0\rangle$ par une rotation de l'ensemble des spins d'un même angle autour de Oz est encore un état fondamental possible.

où

$$\mathcal{P}_{n,n+1} = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})$$

En utilisant le résultat de la question 5 de l'exercice précédent, montrer que les vecteurs propres de H sont des combinaisons linéaires de vecteurs où le nombre de spins up moins le nombre de spins down est une constante. Soit $|\Psi_n\rangle$ l'état où le spin n est down, tous les autres spins étant up. Quelle est l'action de H sur $|\Psi_n\rangle$?

3. On cherche des vecteurs propres $|k_s\rangle$ de H comme combinaisons linéaires des $|\Psi_n\rangle$. Compte tenu de la symétrie cyclique, on pose

$$|k_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{ik_s n l} |\Psi_n\rangle$$

avec

$$k_s = \frac{2\pi s}{Nl} \quad s = 0, 1, \dots, N-1$$

Montrer que $|k_s\rangle$ est vecteur propre de H et déterminer l'énergie correspondante E_k . Montrer que l'énergie est proportionnelle à k_s^2 si $k_s \rightarrow 0$. On associe à l'état $|k_s\rangle$ de (pseudo-)vecteur d'onde k_s et d'énergie E_k une particule appelée *magnon*.

6.4.7 Calcul de $E(\hat{a}, \hat{b})$

1. Déterminer les amplitudes (6.31) a_{+-} , a_{-+} , a_{--} .

2. Vérifier (cf. 6.32)

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \langle (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b}) \rangle_{\Phi} = \langle \Phi | (\vec{\sigma} \cdot \hat{a}) \otimes (\vec{\sigma} \cdot \hat{b}) | \Phi \rangle = -\hat{a} \cdot \hat{b}$$

où $|\Phi\rangle$ est l'état intriqué (6.15) de deux spins 1/2

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Suggestion : montrer à partir de l'invariance par rotation de $|\Phi\rangle$ que $\vec{\sigma}^{(a)}|\Phi\rangle = -\vec{\sigma}^{(b)}|\Phi\rangle$ et utiliser (3.50).

6.4.8 Inégalités de Bell avec des photons

On considère deux photons partant en sens inverse, l'un (1) suivant Oz et l'autre (2) suivant $-Oz$, dans un état de polarisation intriqué

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle_1 \otimes |y\rangle_2 - |y\rangle_1 \otimes |x\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|xy\rangle - |yx\rangle)$$

Les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont des états de polarisation linéaire suivant Ox et Oy .

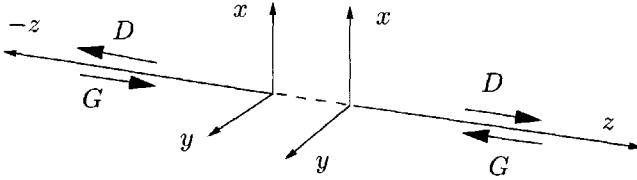


FIG. 6.12 – Configuration des polarisations des photons intriqués.

1. Soit

$$|\theta\rangle = \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle$$

l'état de polarisation linéaire suivant la direction $\hat{n}_\theta$ du plan xOy (cf. (3.23)) et $|\theta_\perp\rangle$ l'état de polarisation orthogonale (3.24). Montrer que

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\theta\theta_\perp\rangle - |\theta_\perp\theta\rangle)$$

L'état $|\Phi\rangle$ est donc invariant par rotation autour de Oz .

2. Écrire $|\Phi\rangle$ en fonction des états de polarisation circulaire $|D\rangle$ et $|G\rangle$ (3.11) en prenant garde à l'orientation des axes (figure 6.12): le sens de la rotation dépend de la direction de propagation

$$|\Phi\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|DD\rangle - |GG\rangle)$$

Vérifier en utilisant (3.27) que cette deuxième forme de $|\Phi\rangle$ est bien invariante par rotation autour de Oz .

3. Alice et Bob analysent la polarisation des photons à l'aide de polariseurs linéaires orientés suivant les directions $\hat{n}_\alpha$ pour le photon 1 et $\hat{n}_\beta$ pour le photon 2 dans le plan xOy . On définit :

- $p_{++}(\alpha, \beta)$ = probabilité pour que le photon 1 soit polarisé suivant $\hat{n}_\alpha$ et le photon 2 suivant $\hat{n}_\beta$
- $p_{+-}(\alpha, \beta)$ = probabilité pour que le photon 1 soit polarisé suivant $\hat{n}_\alpha$ et le photon 2 suivant $\hat{n}_{\beta_\perp}$

$p_{-+}(\alpha, \beta)$ et $p_{--}(\alpha, \beta)$ étant définis de façon analogue. On définit comme pour le spin 1/2 (cf. (6.30))

$$E(\alpha, \beta) = [p_{++}(\alpha, \beta) + p_{--}(\alpha, \beta)] - [p_{+-}(\alpha, \beta) + p_{-+}(\alpha, \beta)]$$

Montrer que

$$E(\alpha, \beta) = -\cos[2(\alpha - \beta)]$$

Utiliser l'invariance par rotation de $|\Phi\rangle$ pour simplifier le calcul. Quelles valeurs de α , α' , β et β' doit-on utiliser pour obtenir comme dans (6.35)

$$X = E(\alpha, \beta) + E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta') - E(\alpha', \beta) = -2\sqrt{2} ?$$

4. Montrer que l'état

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|xx\rangle + |yy\rangle)$$

est également invariant par rotation autour de Oz . Donner son expression en fonction des états de polarisation circulaire³².

6.4.9 Interférences avec deux photons

On considère l'expérience d'interférences de fentes d'Young à deux photons dont le schéma est représenté sur la figure 6.13. Les deux photons sont émis dans des directions opposées avec des vecteurs d'onde $\sim \pm \vec{k}$ approximativement horizontaux par une source dont la position verticale sur l'axe des x est définie avec une précision $\pm d/2$; on peut par exemple supposer que les deux photons proviennent de la désintégration d'une particule Ω d'impulsion $\simeq 0$ se trouvant sur le segment CD de hauteur d . La distance entre les fentes est l et celle entre les fentes et la source, ainsi qu'entre les fentes et les écrans, est D , avec $l \ll D$.

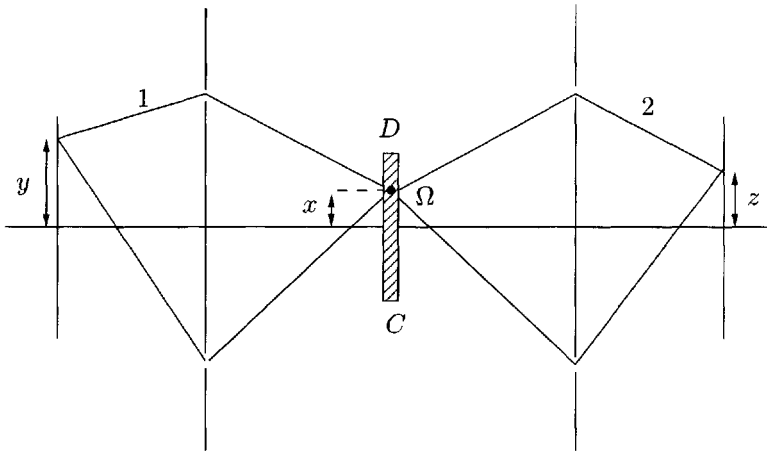


FIG. 6.13 – Interférences avec deux photons.

1. Quelle est la dispersion Δk_x sur la composante x du vecteur d'onde des photons ? On supposera toujours $\Delta k_x \ll k$.

32. Les états $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ sont tous deux de moment angulaire nul. Si les deux photons proviennent de la désintégration d'une particule de spin 0, le choix entre les deux états dépend de la parité de la particule mère : voir exercice 13.4.4

2. La position de la source est donnée par son ordonnée x , les impacts des photons 1 et 2 par les ordonnées y et z . Montrer que pour le photon 1 la différence de marche $\delta(x, y)$ vérifie

$$\delta(x, y) - \delta(0, 0) = \mp \frac{l}{2D} (x + y) = \mp \theta (x + y)$$

où le signe $\mp$ correspond au passage du photon 1 par la fente supérieure ($-$) ou inférieure ($+$), et $\theta = l/(2D)$; 2θ est l'angle sous lequel l'intervalle entre les fentes est vu depuis la source.

3. Montrer que l'amplitude de probabilité pour détecter en coïncidence le photon 1 en y et le photon 2 en z est proportionnelle à

$$\bar{a}(x|y, z) = \cos[k\theta(y + x)] \cos[k\theta(x + z)]$$

lorsque la source est au point x .

4. Montrer que l'amplitude totale de détection en coïncidence est proportionnelle à

$$a(y, z) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} \bar{a}(x|y, z) dx$$

et en déduire

$$a(y, z) = \frac{1}{2d} \left[\frac{1}{k\theta} \sin(k\theta d) \cos[k\theta(y + z)] + d \cos[k\theta(y - z)] \right]$$

Justifier soigneusement le fait que l'on doit additionner les amplitudes, et non les intensités comme dans les interférences avec un seul photon.

5. Montrer que pour $d \gg 1/(k\theta) \sim \lambda/\theta$, la probabilité de détection en coïncidence est

$$p(y, z) \propto \cos^2[k\theta(y - z)]$$

Comment ce résultat s'interprète-t-il en termes d'interférences conditionnelles ? Que se passe-t-il si on observe un seul écran ?

6. Montrer que lorsque $d \ll 1/(k\theta)$

$$p(y, z) = \cos^2(k\theta y) \cos^2(k\theta z)$$

et l'on obtient donc deux systèmes de franges indépendants. Pour quelle raison physique le système de franges individuelles est-il rétabli ?

7. À quelles conditions sur Δk_x correspondent les cas limites $d \gg \lambda/\theta$ et $d \ll \lambda/\theta$? Comment peut-on interpréter les résultats des questions 5 et 6 ?

8. Au lieu d'utiliser des trous d'Young, on fait interférer les photons en utilisant deux séparateurs de faisceau S et S' symétriques (figure 6.14) ; les probabilités de réflexion et de transmission sont de 50 %. Le déphasage entre

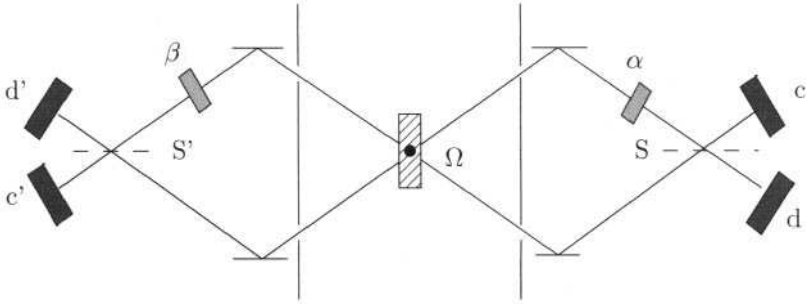


FIG. 6.14 – Interférences avec des diviseurs de faisceau.

réflexion et transmission par le séparateur de faisceau est $\pi/2$ (exercice 2.4.12). On introduit sur les deux bras de l'interféromètre des déphasages α et β et on pose $\phi = (\alpha - \beta)$. Soit $p(c, c')$ la probabilité de détection en coïncidence par les détecteurs c et c' . Montrer que

$$p(c, c') = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\phi}{2}$$

et que

$$E(\alpha, \beta) = [p(c, c') + p(d, d')] - [p(c, d') + p(c', d)] = -\cos \phi$$

Construire une inégalité de Bell analogue à celle obtenue avec des spins $1/2$ en faisant varier α et β .

6.4.10 Interférences des temps d'émission

Dans une expérience réalisée par une collaboration Nice-Genève³³, un faisceau laser (laser de pompe) incident de longueur d'onde $\lambda = 655 \text{ nm}$ arrive sur un cristal non linéaire (figure 6.15). Une fraction des photons incidents est convertie en paires de photons de longueur d'onde $2\lambda = 1310 \text{ nm}$, chaque photon partant dans une des deux fibres optiques et traversant ensuite un interféromètre de Mach-Zehnder (MZ) (*cf.* exercice 1.6.6). Ces interféromètres ont un bras court et un bras long, la différence entre les deux bras étant $\Delta l = 20 \text{ cm}$. Une lame permet de faire varier le chemin optique de δ sur le bras long de l'interféromètre de droite. La longueur de cohérence $l_{\text{coh}} \simeq 40 \mu\text{m}$ des photons convertis est très petite par rapport à Δl : $l_{\text{coh}} \ll \Delta l$ (alors que la longueur de cohérence du laser de pompe est voisine de 100 m).

1. On fait varier la phase δ sur le bras long de l'interféromètre de droite. Montrer que le taux de comptage des photons par le détecteur D_1 est indépendant de δ .

33. S. Tanzilli, W. Tittel, H. de Riedmatten, H. Zbinden, P. Baldi, M. de Micheli, D. Ostrowsky et N. Gisin *Eur. Phys. J. D* **18**, 155, (2002).

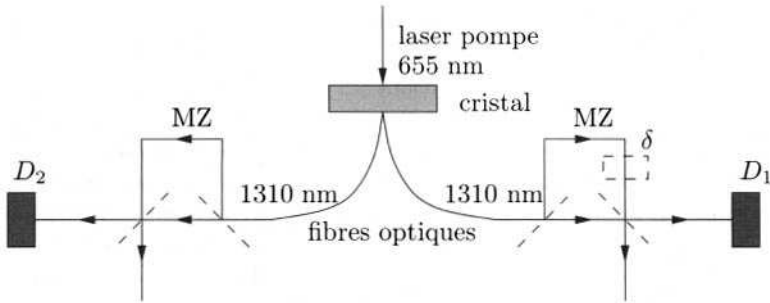


FIG. 6.15 – Interférences des temps d'émission.

2. On détecte les deux photons en coïncidence dans D_1 et D_2 , avec une fenêtre de coïncidence de l'ordre de 0.1 ns ; comme le faisceau pompe est continu, on ne dispose d'aucune information sur le temps de formation d'une paire de photons. Montrer qu'il n'est pas possible de distinguer les deux chemins court-court et long-long suivis par les photons. En déduire que si l'on fait varier δ on obtient une variation sinusoïdale du taux de comptage en coïncidence, mais que les taux de détection individuels dans D_1 et D_2 restent indépendants de δ . Suggestion : montrer que si l'on supprime les deux diviseurs de faisceau du MZ de gauche, on peut déduire une information sur le trajet suivi par le photon de droite. Que se passe-t-il si on supprime l'ensemble du dispositif de gauche (MZ et détecteur) ?

6.5 Bibliographie

Le produit tensoriel et l'opérateur densité sont traités dans Messiah [1959], chapitres VII et VIII ou Cohen-Tannoudji [1973] *et al.*, compléments E_{III} et E_{IV}. Deux références plus récentes sont Isham [1995], chapitre 6 ou Basdevant et Dalibard [2001], annexe D. Pour les applications de l'opérateur densité à la mécanique statistique et les propriétés de l'entropie statistique, on pourra consulter Balian [1991], chapitres 2 à 5, Diu *et al.* [1990], chapitre 2 ou Le Bellac et Mortessagne [2001], chapitre 2. Il existe de nombreux exposés sur les inégalités de Bell, parmi lesquels on peut recommander ceux de Peres [1993], chapitres 6 et 7, Isham [1995], chapitres 8 et 9 ou Laloë [1999]. On trouvera dans ces références une discussion des importants théorèmes de Gleason et de Kochen-Specker. L'article original correspondant à l'expérience décrite au § 6.3.1 est de M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J.-M. Raimond et S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996). Une version grand public en est donnée par S. Haroche, J.-M. Raimond et M. Brune, *La Recherche* **301**, 50 (1997) et une discussion pédagogique dans Omnès [1999], chapitre 22. Les interférences avec des états intriqués sont décrites par D. Greenberger, M. Horne et A. Zeilinger, *Physics*

Today août 1991, p. 22, ou par A. Zeilinger, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S288 (1999). Le cours 1989-90 du Collège de France de C. Cohen-Tannoudji (disponible sur le WEB du Collège de France) contient un exposé très complet de la théorie de la mesure et de la décohérence ; voir aussi W. Zurek, *Physics Today*, octobre 1991, p. 36. Pour une excellente introduction au calcul quantique, on pourra consulter livre de Nielsen et Chuang [2000] ; les divers aspects de l'information quantique sont couverts dans l'ouvrage collectif édité par D. Bouwmeester, A. Ekert et A. Zeilinger, *The Physics of Quantum Information*, Springer (2000), et on trouvera une version grand public de la téléportation dans A. Zeilinger, *Pour la Science* **272**, 36 (2000). Les articles « historiques » (antérieurs à 1982 : EPR, etc.) ont été rassemblés dans un ouvrage édité par J.-A. Wheeler et W. Zurek, *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton (1983).

Chapitre 7

Mathématiques de la mécanique quantique II : dimension infinie

NOUS AVONS VU AU CHAPITRE 4 que les relations de commutation canoniques imposaient d'utiliser un espace des états de dimension infinie, dont le traitement rigoureux exigerait un outillage mathématique important. Heureusement, les physiciens peuvent en général se contenter de transposer au cas de la dimension infinie les résultats démontrés dans le cas de la dimension finie, avec des modifications simples que nous allons indiquer, sans avoir à se lancer dans des mathématiques trop complexes. Néanmoins il n'est pas inutile d'être conscient des impasses sur la rigueur dont les physiciens sont coutumiers, afin d'éviter d'éventuelles mauvaises surprises.

L'objectif de ce chapitre est donc d'une part d'illustrer sur quelques exemples concrets les nouveautés apportées par la dimension infinie, et d'autre part de donner des règles de calcul pratiques, et en particulier d'écrire la décomposition spectrale des opérateurs hermitiques et unitaires. Les explications mathématiques sont un peu plus détaillées que celles données habituellement dans les manuels de mécanique quantique. Le lecteur intéressé uniquement par les aspects pratiques peut passer directement à la section 3, où sont rassemblés les résultats essentiels pour la suite.

7.1 Espaces de Hilbert

7.1.1 Définitions

L'espace des états de la mécanique quantique est un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, en général de dimension infinie. La définition axiomatique d'un espace de

Hilbert est la suivante :

1. C'est un espace vectoriel qui, pour les besoins de la mécanique quantique, est défini sur le corps des complexes. Les vecteurs de cet espace sont notés $|\varphi\rangle$.
2. Cet espace est muni d'un produit scalaire défini positif ; si $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont deux vecteurs, ce produit scalaire est noté $\langle\chi|\varphi\rangle$ et il vérifie

$$\langle\chi|\varphi\rangle = (\langle\varphi|\chi\rangle)^* \quad (7.1)$$

$$\langle\chi|\varphi + \lambda\psi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle + \lambda\langle\chi|\psi\rangle \quad (7.2)$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \|\varphi\|^2 = 0 \iff |\varphi\rangle = 0 \quad (7.3)$$

λ étant un nombre complexe arbitraire ; $\|\varphi\|$ désigne la norme de $|\varphi\rangle$.

3. $\mathcal{H}$ est un *espace complet*, c'est-à-dire un espace où toute suite de Cauchy a une limite : si une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ de $\mathcal{H}$ est telle que $\|\varphi^{(l)} - \varphi^{(m)}\| \rightarrow 0$ pour $l, m \rightarrow \infty$, alors il existe un vecteur $|\varphi\rangle$ de $\mathcal{H}$ tel que $\|\varphi^{(l)} - \varphi\| \rightarrow 0$ pour $l \rightarrow \infty$. Si $\mathcal{H}$ n'est pas complet, on peut toujours lui rajouter les vecteurs limites de suites de Cauchy et le rendre complet¹.
4. Un espace de Hilbert est caractérisé par sa *dimension* : tous les espaces de même dimension sont isomorphes. La dimension d'un espace de Hilbert peut être finie et égale à N , elle peut être infinie dénombrable, ou bien non dénombrable. Les espaces de Hilbert qui interviennent en mécanique quantique sont soit de dimension finie, soit de dimension infinie dénombrable.

Nous avons étudié en détail au chapitre 2 les espaces de Hilbert de dimension finie. Si la dimension est N , il faut N vecteurs unitaires orthogonaux $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$ pour former une base orthonormée : $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle$. Dans le cas dénombrable, il existe une suite dénombrable de vecteurs unitaires orthogonaux $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ formant une base de $\mathcal{H}$: tout vecteur de $\mathcal{H}$ peut s'écrire comme combinaison linéaire de ces vecteurs de base

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (7.4)$$

mais contrairement au cas de la dimension finie, toute combinaison de la forme (7.4) n'est pas un vecteur de $\mathcal{H}$! En effet, le carré de la norme de $|\varphi\rangle$ est donné par

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (7.5)$$

1. Cet axiome est donc en fait un peu superflu. Il est automatiquement vérifié dans le cas de la dimension finie.

et (7.4) ne définit un vecteur que si cette norme est finie : la série dans (7.5) doit être une série convergente

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty$$

Dans ces conditions, quel que soit $\varepsilon > 0$, il existe un entier N tel que le vecteur $|\varphi_N\rangle$ défini par la combinaison suivante finie de vecteurs de base

$$|\varphi_N\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle$$

vérifie

$$\|\varphi - \varphi_N\|^2 = \sum_{n=N+1}^{\infty} |c_n|^2 \leq \varepsilon \quad (7.6)$$

Autrement dit, il est possible d'approcher $|\varphi\rangle$ par un vecteur $|\varphi_N\rangle$ dont la norme diffère arbitrairement peu de celle de $|\varphi\rangle$. On peut maintenant approcher les c_n par des nombres rationnels, et on voit qu'il est possible de construire dans $\mathcal{H}$ une suite dénombrable de vecteurs qui soit dense² dans $\mathcal{H}$. Cette propriété, commune aux espaces de dimension finie et dénombrable, s'appelle la *séparabilité* de l'espace de Hilbert : les espaces de Hilbert de la mécanique quantique sont séparables.

La convergence définie par (7.6) est la *convergence en norme*, aussi appelée *convergence forte* : on dit qu'une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ converge en norme vers $|\varphi\rangle$ pour $l \rightarrow \infty$ si quel que soit $\varepsilon > 0$, il existe un entier N tel que pour $l \geq N$

$$\|\varphi - \varphi^{(l)}\| \leq \varepsilon \quad \forall l \geq N \quad (7.7)$$

Il existe un autre type de convergence, la *convergence faible* : une suite de vecteurs $|\varphi^{(l)}\rangle$ converge faiblement vers $|\varphi\rangle$ si pour tout vecteur $|\chi\rangle$ de $\mathcal{H}$

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \langle \varphi^{(l)} | \chi \rangle = \langle \varphi | \chi \rangle \quad (7.8)$$

Nous n'aurons pas à nous servir de la convergence faible³, mais l'existence de cette convergence permet d'illustrer une différence avec la dimension finie : les deux convergences sont identiques pour un espace de dimension finie, mais non pour un espace de dimension infinie. La convergence forte implique la convergence faible, mais non l'inverse (exercice 7.4.1).

2. Un ensemble de vecteurs $\{|\varphi^{(\alpha)}\rangle\}$ est dense dans $\mathcal{H}$ si pour tout $\varepsilon > 0$ et pour tout vecteur $|\varphi\rangle$ de $\mathcal{H}$ on peut trouver un $|\varphi^{(\alpha)}\rangle$ tel que $\|\varphi - \varphi^{(\alpha)}\| < \varepsilon$.

3. Elle intervient par exemple dans certains problèmes de théorie quantique des champs.

7.1.2 Réalisations d'espaces séparables et de dimension infinie

Tous les espaces de Hilbert séparables et de dimension infinie sont isomorphes ; cependant les réalisations concrètes peuvent *a priori* sembler différentes et il est intéressant de pouvoir les identifier. Nous allons définir successivement les espaces $\ell^{(2)}$, $L^{(2)}[a, b]$ et $L^{(2)}(\mathbb{R})$, qui sont tous séparables et de dimension infinie.

(i) *Espace $\ell^{(2)}$* . Un vecteur $|\varphi\rangle$ est défini par une suite infinie de nombres complexes $c_1, \dots, c_n \dots$ telle que

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \quad (7.9)$$

Comme dans (7.4), les c_n sont les coordonnées de $|\varphi\rangle$. Vérifions que $|\varphi + \lambda\chi\rangle$ appartient à $\mathcal{H}$. Si $|\chi\rangle$ a pour composantes d_n , étant donné que

$$|c_n + \lambda d_n|^2 \leq 2(|c_n|^2 + |\lambda|^2 |d_n|^2)$$

il est clair que $\|\varphi + \lambda\chi\| < \infty$. Le produit scalaire de deux vecteurs

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} d_n^* c_n$$

est bien défini car, d'après l'inégalité de Schwartz (2.10)

$$|\langle \chi | \varphi \rangle| = \left| \sum_{n=1}^{\infty} d_n^* c_n \right| \leq \|\chi\| \|\varphi\|$$

Vérifions ensuite que $\ell^{(2)}$ est complet. Soit $|\varphi^{(l)}\rangle$ et $|\varphi^{(m)}\rangle$ deux vecteurs de composantes $c_n^{(l)}$ et $c_n^{(m)}$. Si $\|\varphi^{(m)} - \varphi^{(l)}\| < \varepsilon$ pour $l, m > N$, cela veut dire que

$$\left(\sum_{n=1}^{\infty} |c_n^{(l)} - c_n^{(m)}|^2 \right)^{1/2} < \varepsilon$$

L'inégalité est *a fortiori* vraie pour chaque valeur individuelle de n et, pour n fixé, les nombres $c_n^{(l)}$ forment une suite de Cauchy qui converge vers c_n pour $l \rightarrow \infty$. On montre facilement (exercice 7.4.1) que le vecteur $\varphi^{(l)}$ converge vers $|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ pour $l \rightarrow \infty$

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_n |c_n - c_n^{(l)}|^2 = \lim_{l \rightarrow \infty} \|\varphi - \varphi^{(l)}\|^2 = 0$$

Enfin $\ell^{(2)}$ est de dimension dénombrable par construction.

(ii) *Espace* $L^{(2)}[a, b]$. Nous allons maintenant introduire une classe d'espaces vectoriels qui vont jouer un rôle capital, les espaces fonctionnels. L'exemple le plus simple est celui des fonctions de carré sommable sur l'intervalle $[a, b]$. Considérons les fonctions complexes $\varphi(x)$ telles que⁴

$$\int_a^b dx |\varphi(x)|^2 < \infty \quad (7.10)$$

ou fonctions de carré sommable sur l'intervalle $[a, b]$. Ces fonctions forment un espace vectoriel, noté $L^{(2)}[a, b]$. En effet (i) $\varphi(x) + \lambda\chi(x)$ est de carré sommable si $\varphi(x)$ et $\chi(x)$ le sont (ii) le produit scalaire $\langle \chi | \varphi \rangle$

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \int_a^b dx \chi^*(x) \varphi(x) \quad (7.11)$$

est bien défini en raison de l'inégalité de Schwartz

$$\left| \int_a^b dx \chi^*(x) \varphi(x) \right|^2 \leq \int_a^b dx |\chi(x)|^2 \int_a^b dx |\varphi(x)|^2 = \|\chi\|^2 \|\varphi\|^2 \quad (7.12)$$

Le fait que $L^{(2)}[a, b]$ soit complet résulte d'un théorème dû à Riesz et Fischer, et la séparabilité résulte d'un théorème standard de l'analyse de Fourier : toute fonction de carré sommable $\varphi(x)$ peut s'écrire, au sens de la convergence en moyenne (ou en norme), comme la somme d'une série de Fourier

$$\varphi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \exp\left(\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \quad (7.13)$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \int_a^b dx \varphi(x) \exp\left(-\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \quad (7.14)$$

Les fonctions

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(b-a)}} \exp\left(\frac{2i\pi nx}{b-a}\right) \quad (7.15)$$

forment une base orthonormée dénombrable de $L^{(2)}[a, b]$, qui est donc un espace de Hilbert séparable.

(iii) *Espace* $L^{(2)}(\mathbb{R})$. Quand l'intervalle $[a, b]$ s'identifie à la droite réelle $\mathbb{R}$, $[a, b] \rightarrow [-\infty, +\infty]$, on obtient l'espace de Hilbert $L^{(2)}(\mathbb{R})$ (ou $L^{(2)}(-\infty, +\infty)$), l'espace des fonctions de carré sommable sur $[-\infty, +\infty]$. Bien que la démonstration soit plus délicate, on peut montrer que $L^{(2)}(\mathbb{R})$ reste un espace séparable, et donc isomorphe à $\ell^{(2)}$.

4. Deux fonctions $\varphi(x)$ et $\bar{\varphi}(x)$ telles que

$$\int_a^b dx |\varphi(x) - \bar{\varphi}(x)|^2 = 0$$

représentent le même vecteur de $\mathcal{H}$: $\|\varphi - \bar{\varphi}\| = 0$.

7.2 Opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$

7.2.1 Domaine et norme d'un opérateur

On définit des opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$ comme dans le cas de la dimension finie. Cependant il existe des différences importantes. Il peut arriver, et c'est très souvent le cas en mécanique quantique, qu'un opérateur ne soit pas défini pour tout vecteur de $\mathcal{H}$, mais seulement sur un sous-ensemble de ces vecteurs. Soit par exemple l'opérateur A agissant dans $\ell^{(2)}$ de la façon suivante : si $|\varphi\rangle$ a pour composantes $\{c_1, c_2, \dots, c_n, \dots\}$, alors $A|\varphi\rangle$ a pour composantes $\{c_1, 2c_2, \dots, nc_n, \dots\}$. Dans $L^{(2)}[a, b]$, cet opérateur correspond à la différentiation à un facteur multiplicatif près, comme on le voit immédiatement en examinant la décomposition de Fourier (7.13). Il est clair que la norme au carré de $A|\varphi\rangle$, donnée par

$$\|A\varphi\|^2 = \sum_n n^2 |c_n|^2$$

peut diverger alors que $\sum_n |c_n|^2$ converge : il suffit par exemple de prendre $c_n = 1/n$. Autrement dit $A|\varphi\rangle$ n'est pas un vecteur de $\mathcal{H}$. On appelle *domaine* de A , noté $\mathcal{D}_A$, l'ensemble des vecteurs $|\varphi\rangle$ tel que $A|\varphi\rangle$ soit un vecteur de $\mathcal{H}$. Dans l'exemple ci-dessus, le domaine de A est l'ensemble des vecteurs tels que $\sum_n n^2 |c_n|^2 < \infty$. Il est facile de se convaincre que ce domaine est dense dans $\mathcal{H}$. En pratique, un opérateur A ne présente un intérêt que si son domaine est dense dans $\mathcal{H}$.

Si $A|\varphi\rangle$ existe quel que soit $|\varphi\rangle$, on dit que l'opérateur A est *borné* : on doit alors avoir $\|A\varphi\| < \infty$ quel que soit $|\varphi\rangle$. Le maximum de $\|A\varphi\|/\|\varphi\|$ est appelé la *norme* de A , qui est notée $\|A\|$

$$\|A\| = \sup_{\|\varphi\|=1} \|A\varphi\| \quad (7.16)$$

Si la norme de $\|A\|$ n'existe pas, A est dit non-borné. Les opérateurs non-bornés sont d'un maniement beaucoup plus délicat que les opérateurs bornés. Malheureusement ils sont omniprésents en mécanique quantique.

Dans $L^{(2)}[0, 1]$, l'opérateur X qui à $\varphi(x)$ fait correspondre la fonction $x\varphi(x)$

$$\varphi(x) \rightarrow (X\varphi)(x) = x\varphi(x) \quad (7.17)$$

est un opérateur borné de norme un. En revanche l'opérateur d/dx , qui à $\varphi(x)$ fait correspondre sa dérivée

$$\varphi(x) \rightarrow \frac{d\varphi(x)}{dx} \quad (7.18)$$

n'est pas un opérateur borné. Nous l'avons déjà vu ci-dessus ; un autre argument simple consiste à trouver une fonction telle que la norme de $\varphi(x)$

soit finie, mais non celle de $\varphi'(x)$. Par exemple

$$\varphi(x) = x^{-1/4} \quad \frac{d\varphi(x)}{dx} = -\frac{1}{4} x^{-5/4}$$

car

$$\int_0^1 dx x^{-1/2} = 2 \quad \int_0^1 dx \frac{1}{16} x^{-5/2} \text{ diverge à } x = 0$$

Les problèmes de domaines peuvent rendre délicats la définition de la somme et du produit de deux opérateurs non-bornés. Par exemple on ne peut *a priori* définir la somme $A+B$ de deux opérateurs non-bornés A et B que sur l'intersection $\mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B$ des deux domaines, ce qui peut devenir problématique si cette intersection est réduite au vecteur nul ! Lorsque deux opérateurs A et B sont égaux sur un même domaine $\mathcal{D}_A$, mais que le domaine de B contient celui de A : $\mathcal{D}_A \subseteq \mathcal{D}_B$, on dit que B est un prolongement de A : $A \subseteq B$. Donnons un exemple : la relation de commutation canonique (4.32) entre les opérateurs position X et impulsion P , écrite pour une seule dimension d'espace

$$[X, P] = i\hbar I \quad (7.19)$$

implique qu'au moins un des deux opérateurs est non-borné (exercice 7.4.3). Le membre de gauche $[X, P]$ de (7.19) n'est défini *a priori* que sur un sous-ensemble de $\mathcal{H}$, tandis que le membre de droite $i\hbar I$ est défini pour tout vecteur de $\mathcal{H}$. L'écriture correcte de la relation de commutation canonique est donc

$$[X, P] \subseteq i\hbar I$$

Notons une autre différence avec la dimension finie : alors que dans un espace vectoriel de dimension finie l'existence d'un inverse à gauche entraîne celle d'un inverse à droite, et réciproquement, cette propriété n'est plus vraie en dimension infinie⁵. Soit par exemple les opérateurs A et B définis par leur action sur les composantes c_n d'un vecteur $|\varphi\rangle$

$$A(c_1, c_2, c_3 \dots) = (c_2, c_3, c_4 \dots) \quad B(c_1, c_2, c_3 \dots) = (0, c_1, c_2, \dots)$$

alors

$$\begin{aligned} BA(c_1, c_2, c_3 \dots) &= B(c_2, c_3, c_4 \dots) = (0, c_2, c_3, \dots) \\ AB(c_1, c_2, c_3 \dots) &= A(0, c_1, c_2, \dots) = (c_1, c_2, c_3, \dots) \end{aligned}$$

et $AB = I$ tandis que $BA \neq I$, bien que A et B soient tous deux bornés.

5. Un exemple important d'un tel opérateur en physique est l'opérateur de Møller de la théorie de la diffusion.

7.2.2 Conjugaison hermitique

Dans le cas d'un opérateur borné, il n'y a pas de difficulté de principe pour définir l'opérateur hermitique conjugué $A^\dagger$ de A par

$$\langle \chi | A \varphi \rangle = \langle A^\dagger \chi | \varphi \rangle \quad (7.20)$$

Comme dans le cas de la dimension finie, on dira que A est hermitique si $A = A^\dagger$ et on aura alors

$$\langle \chi | A \varphi \rangle = \langle A \chi | \varphi \rangle \quad (7.21)$$

Les choses se compliquent si A n'est pas borné en raison des questions de domaines. Tout d'abord (7.20) ne peut définir $A^\dagger$ que si $\mathcal{D}_A$ est dense dans $\mathcal{H}$. Ensuite le domaine de définition de $A^\dagger$ est en général plus grand que celui de A : $\mathcal{D}_A \subseteq \mathcal{D}_{A^\dagger}$. Nous allons le voir sur un exemple dans un instant. En général pour un opérateur non-borné vérifiant (7.21), on n'aura pas $A = A^\dagger$ mais plutôt $A \subseteq A^\dagger$. Les mathématiciens réservent la dénomination « opérateurs hermitiques » aux opérateurs tels que $A \subseteq A^\dagger$, et appellent « auto-adjoints » les opérateurs tels que $A = A^\dagger$.

Illustrons cette discussion par un exemple dans $L^{(2)}[0, 1]$, qui va nous familiariser avec le produit scalaire et la conjugaison hermitique dans cet espace. Soit A_0 l'opérateur $-\text{id}/\text{dx}$, défini sur le domaine $\mathcal{D}_{A_0}$ des fonctions $\varphi(x)$ de $L^{(2)}[0, 1]$, dérivables et dont la dérivée est de carré sommable, et vérifiant de plus les conditions aux limites $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$, d'où l'indice 0 de A_0 . Il est intuitivement évident, et facile à vérifier, que ce domaine est dense dans $L^{(2)}[0, 1]$. Montrons d'abord que A_0 est hermitique ; $\chi(x)$ étant une fonction de $L^{(2)}[0, 1]$ dérivable et dont la dérivée appartient à $L^{(2)}[0, 1]$

$$\begin{aligned} \langle \chi | A_0 \varphi \rangle &= \int_0^1 dx \chi^*(x) \left(-i \frac{d}{dx} \varphi(x) \right) = -i \int_0^1 dx \chi^*(x) \varphi'(x) \\ \langle A_0 \chi | \varphi \rangle &= \int_0^1 dx \left(-i \frac{d}{dx} \chi(x) \right)^* \varphi(x) = i \int_0^1 dx (\chi'(x))^* \varphi(x) \\ \langle \chi | A_0 \varphi \rangle - \langle A_0 \chi | \varphi \rangle &= -i [\chi^*(x) \varphi(x)]_0^1 = 0 \end{aligned} \quad (7.22)$$

On remarquera la nécessité pour l'hermiticité du facteur i et des conditions aux limites. On peut définir $A_0^\dagger$ sur un domaine plus grand que $\mathcal{D}_{A_0}$. En effet, pour des fonctions $\chi(x)$ non contraintes par des conditions aux limites, c'est-à-dire telles que $\chi(0)$ et $\chi(1)$ soient quelconques

$$\begin{aligned} \langle A_0^\dagger \chi | \varphi \rangle &= i \int_0^1 dx (\chi'(x))^* \varphi(x) \\ &= i [\chi^*(x) \varphi(x)]_0^1 - i \int_0^1 dx \chi^*(x) \varphi'(x) = \langle \chi | A_0 \varphi \rangle \end{aligned}$$

et par conséquent $A_0 \subseteq A_0^\dagger$. Enfin, définissons A_C comme l'opérateur $-\text{id}/\text{dx}$ agissant dans le domaine $\mathcal{D}_{A_C}$ des fonctions $\varphi(x)$ de $L^{(2)}[0, 1]$, dérivables, dont

la dérivée appartient à $L^{(2)}[0, 1]$, et vérifiant les conditions aux limites

$$\varphi(1) = C\varphi(0) \quad |C| = 1$$

L'opérateur A_C est auto-adjoint. En effet

$$\langle A_C \chi | \varphi \rangle - \langle \chi | A_C \varphi \rangle = -i(C\chi^*(1) - \chi^*(0))\varphi(0)$$

La condition nécessaire et suffisante pour que le membre de droite s'annule⁶ est que $\chi(1) = C\chi(0)$, ce qui montre que le domaine de l'opérateur hermitique conjugué est aussi $\mathcal{D}_{A_C} : A_C^\dagger = A_C$. Les opérateurs A_C représentent pour chaque valeur de C des *prolongements différents* de A_0 : même si la définition est superficiellement la même ($A = -\text{id}/dx$), la différence des domaines fait que A_C et $A_{C'}$ sont des opérateurs différents pour $C \neq C'$! On le vérifie en montrant que les valeurs propres et vecteurs propres de A_C et $A_{C'}$ sont différents pour $C \neq C'$ (exercice 7.4.3).

7.3 Décomposition spectrale

7.3.1 Opérateurs hermitiques

Le théorème de décomposition spectrale qui généralise (2.31) est en toute rigueur valable uniquement pour les opérateurs auto-adjoints⁷. Suivant la tradition des physiciens nous ne ferons désormais plus la différence entre hermitique et auto-adjoint, et nous parlerons uniquement d'opérateurs hermitiques. Si un opérateur A est hermitique, et même s'il est borné, l'équation aux valeurs propres

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \quad (7.23)$$

n'a pas toujours de solution. Par exemple dans $L^{(2)}(\mathbb{R})$ l'opérateur $-\text{id}/dx$ est hermitique, ce que l'on voit par une généralisation immédiate de (7.22). L'équation

$$-i \frac{d}{dx} \varphi(x) = a\varphi(x) \quad (7.24)$$

a pour solution l'onde plane

$$\varphi_a(x) = C e^{iax} \quad (7.25)$$

où C est une constante, mais $\varphi_a(x)$ n'appartient pas à $L^{(2)}(\mathbb{R})$ car

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi_a(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |C|^2$$

6. Noter que $C^* = 1/C$.

7. Plus précisément pour les opérateurs « essentiellement auto-adjoints » : $(A^\dagger)^\dagger = A^\dagger$.

est une intégrale divergente ; $-id/dx$ est un opérateur non-borné, mais même pour un opérateur borné, par exemple x dans $L^{(2)}[0, 1]$, l'équation

$$x\chi_a(x) = a\chi_a(x) \quad (7.26)$$

n'a pas de solution dans $L^{(2)}[0, 1]$. En fait la généralisation de (7.23) au cas de la dimension infinie n'est assurée que pour une classe très particulière d'opérateurs, les opérateurs compacts.

En dimension finie, lorsque $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a suivant (7.23), on dit que a appartient au *spectre* de A . Pour généraliser cette notion à la dimension infinie, considérons l'opérateur $(zI - A)$, où z est un nombre complexe et l'équation

$$(zI - A)|\varphi\rangle = |\chi\rangle \quad (7.27)$$

Soit $\mathcal{D}$ le domaine de $(zI - A)$ et $\Delta(z)$ son image. Si $\Delta(z) = \mathcal{H}$, z est une valeur régulière de A : la correspondance entre $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ est biunivoque et la résolvante (2.46) $R(z, A) = (zI - A)^{-1}$ existe. Le spectre de A est par définition l'ensemble des valeurs de z non régulières. Cette définition coïncide bien avec celle de la dimension finie : en effet si $|\varphi\rangle$ vérifie (7.23)

$$(zI - A)\Big|_{z=a} |\varphi\rangle = (aI - A)|\varphi\rangle = 0$$

et la résolvante n'est pas définie pour $z = a$. Si A est hermitique, il est facile de montrer (exercice 7.4.2) que $z = a + ib$ est une valeur régulière lorsque $b \neq 0$: le spectre de A est donc réel, comme dans le cas de la dimension finie. Les valeurs de a peuvent, soit être indicées par un indice discret : $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$, soit prendre des valeurs continues, par exemple toutes les valeurs sur un intervalle de la droite réelle : on distingue donc un *spectre discret* et un *spectre continu*. Les valeurs de a appartenant au spectre discret vérifient une équation aux valeurs propres (7.23), mais non celles du spectre continu. Le spectre continu et le spectre discret peuvent se recouvrir : par exemple si a prend toutes les valeurs entre 0 et 1, il peut arriver que le spectre de A contienne des valeurs propres discrètes $0 \leq a_n \leq 1$, bien que ce cas soit exceptionnel en pratique. En général, pour les opérateurs utilisés en physique quantique, spectre discret et spectre continu ne se recouvrent pas.

Bien que le spectre de la dimension infinie présente des propriétés nouvelles par rapport à celui de la dimension finie, il existe un théorème de décomposition spectrale qui généralise (2.31)

$$A = \sum_n a_n \mathcal{P}_n$$

La forme mathématique précise de ce théorème est complexe, et les physiciens s'en sortent en utilisant des « pseudo-vecteurs propres », c'est-à-dire comme dans (7.25) des objets qui vérifient formellement l'équation aux valeurs propres

mais ne sont pas des éléments de $\mathcal{H}$. Dans le cas de (7.26), la « solution » sera

$$\chi_a(x) = \delta(x - a) \quad \text{car} \quad x\delta(x - a) = a\delta(x - a) \quad (7.28)$$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac, qui n'est pas une fonction, et certainement pas un élément de $L^{(2)}[0, 1]$.

Les exemples que nous venons de donner nous mettent sur la voie du résultat général. La condition de « normalisation » des pseudo-vecteurs propres (7.25) de $-id/dx$ est, avec le choix $C = 1/\sqrt{2\pi}$

$$\langle \varphi_a | \varphi_b \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax} e^{ibx} = \delta(a - b) \quad (7.29)$$

tandis que pour les valeurs propres (7.28) de x

$$\langle \chi_a | \chi_b \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - a) \delta(x - b) = \delta(a - b) \quad (7.30)$$

La normalisation des pseudo-vecteurs propres est donc donnée, non par un delta de Kronecker, mais par un delta de Dirac. La généralisation du théorème de décomposition spectrale s'énonce ainsi.

- Pour les valeurs a_n du spectre discret étiquetées par un indice discret n , on peut écrire une équation aux valeurs propres et des conditions de normalisation analogues à celles de la dimension finie

$$A|n, r\rangle = a_n|n, r\rangle \quad (7.31)$$

$$\langle n, r | n', r' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{rr'} \quad (7.32)$$

où r est un indice de dégénérescence discret.

- Pour les valeurs $a(\nu)$ du spectre continu étiquetées par un indice continu ν , nous aurons

$$A|\nu, s\rangle = a(\nu)|\nu, s\rangle \quad (7.33)$$

$$\langle \nu, s | \nu', s' \rangle = \delta(\nu - \nu') \delta_{ss'} \quad (7.34)$$

où $|\nu, s\rangle$ n'est pas un vecteur de $\mathcal{H}$; s est un indice de dégénérescence qui peut être discret ou continu, mais que nous avons pris discret pour fixer les notations.

- En outre les vecteurs propres du spectre discret et ceux du spectre continu sont orthogonaux

$$\langle n, r | \nu, s \rangle = 0 \quad (7.35)$$

La généralisation de la décomposition de l'identité, ou relation de fermeture (2.30) s'écrit

$$I = \sum_{n,r} |n, r\rangle \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle \langle \nu, s| \quad (7.36)$$

tandis que la décomposition spectrale (2.31) de A devient

$$A = \sum_{n,r} |n, r\rangle a_n \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle a(\nu) \langle \nu, s| \quad (7.37)$$

Insistons sur le fait que l'existence d'un spectre discret et/ou continu n'est en rien liée au fait que l'opérateur A soit ou non-borné : il existe des opérateurs non-bornés dont le spectre est entièrement discret, comme le hamiltonien de l'oscillateur harmonique (§ 11.1.1) ou le carré du moment angulaire $\vec{J}^2$ (section 10.1), et des opérateurs bornés comme l'opérateur X sur $L^{(2)}[0, 1]$ dont le spectre est entièrement continu.

7.3.2 Opérateurs unitaires

Un opérateur unitaire est défini par

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I \quad \text{ou} \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (7.38)$$

Comme dans le cas de la dimension finie, on peut construire des opérateurs unitaires par exponentiation d'opérateurs hermitiques. Utilisant la décomposition spectrale de A (7.37)

$$\begin{aligned} U(\alpha) &= \exp(i\alpha A) \\ &= \sum_{n,r} |n, r\rangle \exp(i\alpha a_n) \langle n, r| + \sum_s \int d\nu |\nu, s\rangle \exp[i\alpha a(\nu)] \langle \nu, s| \end{aligned} \quad (7.39)$$

Cette équation montre que le spectre de $\exp(i\alpha A)$ est localisé sur le cercle $|z| = 1$, et il est facile de vérifier que cette propriété est vraie de tout opérateur unitaire. De plus (7.39) montre que $U(\alpha)$ vérifie la propriété de groupe abélien

$$U(\alpha_1 + \alpha_2) = U(\alpha_1)U(\alpha_2) \quad U(0) = I \quad (7.40)$$

La réciproque de cette propriété est un théorème important, le théorème de Stone⁸.

Théorème de Stone. Soit un ensemble d'opérateurs unitaires dépendant d'un paramètre continu α et vérifiant la loi de groupe abélien (7.40). Il existe alors un opérateur hermitique T , appelé *générateur infinitésimal* du groupe de transformations $U(\alpha)$ tel que $U(\alpha) = \exp(i\alpha T)$. ■

8. Aussi appelé théorème SNAG : Stone, Naimark, Ambrose et Godement.

On peut donner une démonstration heuristique de ce théorème, en montrant que $U(\alpha)$ vérifie une équation différentielle. Si $\delta\alpha \rightarrow 0$

$$U(\alpha + \delta\alpha) = U(\delta\alpha)U(\alpha) \simeq \left(I + \delta\alpha \frac{dU}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} \right) U(\alpha) \quad (7.41)$$

Si l'on pose

$$T = -i \frac{dU}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} \quad (7.42)$$

T doit être hermitique car

$$\begin{aligned} U(\delta\alpha)U^\dagger(\delta\alpha) &\simeq (I + i\delta\alpha T)(I - i\delta\alpha T^\dagger) \\ &\simeq I + i\delta\alpha(T - T^\dagger) = I \end{aligned}$$

d'où $T = T^\dagger$. On déduit de (7.41)

$$\frac{dU(\alpha)}{d\alpha} = iTU(\alpha) \quad (7.43)$$

ce qui donne le théorème de Stone par intégration et en tenant compte de la condition $U(0) = I$.

7.4 Exercices

7.4.1 Espaces de dimension infinie

1. Montrer que l'espace ℓ^2 est complet.
2. Montrer que la convergence forte implique la convergence faible, mais non l'inverse, sauf si l'espace est de dimension finie.

7.4.2 Spectre d'un opérateur hermitique

Montrer que si $A = A^\dagger$ et $z = x + iy$, le vecteur

$$|\chi\rangle = (zI - A)|\varphi\rangle$$

ne peut pas s'annuler si $y \neq 0$.

7.4.3 Relations de commutation canoniques

1. Soit deux opérateurs hermitiques A et B vérifiant la relation de commutation $[B, A] = iI$. Montrer que l'un au moins des deux opérateurs est non-borné. On pourra supposer sans restreindre la généralité (pourquoi ?) que $\|B\| < 1$. Suggestion : montrer que

$$[B, A^n] = inA^{n-1}$$

et en déduire

$$\|A^n\| \geq \frac{n}{2} \|A^{n-1}\|$$

2. On suppose que A possède un vecteur propre normalisable $|\varphi\rangle$

$$A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle \quad a = a^*$$

On a d'une part

$$\begin{aligned} \langle\varphi|(BA - AB)|\varphi\rangle &= \langle\varphi|B|A\varphi\rangle - \langle A\varphi|B|\varphi\rangle \\ &= a(\langle\varphi|B|\varphi\rangle - \langle\varphi|B|\varphi\rangle) = 0 \end{aligned}$$

et d'autre part

$$\langle\varphi|(BA - AB)|\varphi\rangle = \langle\varphi|[B, A]|\varphi\rangle = i\|\varphi\|^2$$

Quelle est la solution de ce pseudo-paradoxe ? Suggestion : examiner le cas où $B = X$ et $A = -i\hbar/dx$ sur $L^2[0, 1]$ avec les conditions aux limites $\varphi(x=0) = \varphi(x=1)$.

3. On considère les opérateurs A_C définis au § 7.2.2. Trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de A_C , et montrer que le spectre de A_C est différent suivant les valeurs de C . Le théorème de von Neumann (chapitre 8) énonce que les relations de commutation canoniques sont uniques à une équivalence unitaire près. Pourtant

$$[X, A_C] = i\hbar \quad \text{et} \quad [X, A_{C'}] = i\hbar$$

et $A_C \neq A_{C'}$ si $C \neq C'$. Quelle est la solution de ce nouveau pseudo-paradoxe (non indépendant du précédent) ?

7.4.4 Opérateurs de dilatation et de transformation conforme

1. Soit A l'opérateur

$$A = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}$$

A est-il hermitique ? Montrer que

$$\left[e^{-i\alpha A} \Phi \right](x) = \Phi(e^{-\alpha} x)$$

Méthode 1 : utiliser la variable $u = \ln x$

2. Méthode 2 : obtenir l'équation aux dérivées partielles

$$\left(\frac{\partial}{\partial \alpha} + x \frac{\partial}{\partial x} \right) \left[e^{-i\alpha A} \Phi \right](x) = 0$$

3. Soit B l'opérateur

$$B = -i x^2 \frac{\partial}{\partial x}$$

Montrer que

$$\left[e^{-i\alpha B} \Phi \right](x) = \Phi \left(\frac{x}{1 + \alpha x} \right)$$

7.5 Bibliographie

Jauch [1968], chapitres 1 à 4, et Peres, chapitre 4, contiennent un exposé assez détaillé et mathématiquement rigoureux des notions utiles sur les espaces de Hilbert de dimension infinie et les opérateurs sur ces espaces. Le lecteur porté sur les aspects mathématiques pourra se plonger dans le livre classique de F. Riesz et B. Nagy, *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Gauthier-Villars, Paris (1955).

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Chapitre 8

Symétries en physique quantique

LA RÉOLUTION DE PROBLÈMES de physique classique se simplifie, parfois de façon considérable, en présence de *symétries*, c'est-à-dire de transformations qui laissent invariantes certaines propriétés physiques. Par exemple en mécanique classique le problème d'une particule dans une force centrale $\vec{F}(r)$ indépendante du temps est invariant par translation de temps et par rotation autour de tout axe passant par l'origine. L'invariance par translation de temps assure la conservation de l'énergie mécanique E , et l'invariance par rotation la conservation du moment angulaire $\vec{J}$. En l'absence de symétries, on doit *a priori* résoudre un système de trois équations différentielles du second ordre (une par composante). Grâce à ces symétries, on se ramène à la résolution d'une seule équation différentielle du premier ordre. Résumons ci-dessous les conséquences des principales invariances en mécanique classique.

- L'invariance par translation de temps de l'énergie potentielle V entraîne la conservation de l'énergie mécanique $K + V$, somme de l'énergie cinétique K et de l'énergie potentielle V .
- L'invariance de l'énergie potentielle par translation d'espace parallèle à un vecteur $\hat{n}$ entraîne la conservation de la composante $\vec{P} \cdot \hat{n} = P_{\hat{n}}$ de l'impulsion.
- L'invariance de l'énergie potentielle par rotation autour d'un axe $\hat{n}$ entraîne la conservation de la composante $\vec{J} \cdot \hat{n} = J_{\hat{n}}$ du moment angulaire.

Les propriétés de symétrie jouent un rôle encore plus important en mécanique quantique. Elles permettent d'obtenir des résultats très généraux, qui sont indépendants des approximations faites par exemple pour le hamiltonien (bien sûr si ces approximations respectent les symétries du

problème !). Dans ce chapitre, nous exploiterons les hypothèses d'invariance suivantes, que nous supposerons valables¹ pour un système isolé.

- La description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'origine des temps : elle doit être invariante par translation de l'origine des temps.
- L'espace est homogène, ce qui veut dire que la description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'origine des axes : elle doit être invariante par translation d'espace.
- L'espace est isotrope, ce qui veut dire que la description d'un système isolé ne doit pas dépendre de l'orientation choisie pour les axes : elle doit être invariante par rotation.
- La forme des lois physiques doit être inchangée lorsque l'on passe d'un référentiel d'inertie à un autre.

Cette dernière hypothèse doit être précisée, car il existe deux lois de transformations possibles entre référentiels d'inertie, la transformation de Lorentz et celle de Galilée, cette dernière étant valable lorsque $v/c \rightarrow 0$. Naturellement, c'est la transformation de Lorentz que l'on doit choisir en général, mais on ne peut alors éviter le cadre de la théorie quantique des champs. Comme nous considérerons uniquement des particules dont les vitesses sont faibles par rapport à la vitesse de la lumière, nous pourrions nous limiter à la transformation de Galilée, et travailler dans le cadre de ce qui est appelé conventionnellement, mais improprement², la « mécanique quantique non relativiste ».

8.1 Transformation d'un état dans une opération de symétrie

8.1.1 Invariance des probabilités dans une opération de symétrie

Le point de vue adopté implicitement dans l'introduction de ce chapitre était le point de vue dit *passif* : le système physique est inchangé, mais on

1. Ces hypothèses sont éminemment plausibles, mais après tout il pourrait exister des effets subtils qui remettent en cause une (ou plusieurs) de ces invariances. Avant 1957, l'immense majorité des physiciens auraient parié sur l'invariance de la physique par l'opération *parité*. Pauli avait même interdit que l'on fasse au CERN à Genève une expérience destinée à montrer l'éventuelle violation de cette invariance, tellement il trouvait cette possibilité absurde. Aussi la violation de l'invariance par *parité* fut-elle découverte aux USA dans l'expérience de C.S. Wu (cf. 8.3.3).

2. En effet, cette théorie est parfaitement relativiste, puisqu'elle obéit à la relativité... galiléenne !

modifie le système d'axes. Il est en général équivalent³ d'adopter le point de vue *actif*, où le système d'axes est inchangé, et où l'on applique une opération de symétrie sur le système physique. Nous avons d'ailleurs déjà utilisé cette équivalence dans la discussion du § 3.2.4. Dans la suite de ce chapitre, nous allons adopter le point de vue actif, qui est peut-être plus intuitif⁴ et sera plus commode pour certaines discussions, par exemple celles de la section 10.5.

Nous avons vu au chapitre 4, postulat I, que l'objet mathématique en correspondance biunivoque avec un état physique était un rayon unitaire de l'espace des états $\mathcal{H}$, c'est-à-dire un vecteur unitaire à un facteur de phase près. Dans cette section, *uniquement*, la distinction entre vecteurs et rayons sera cruciale ; nous pourrions l'oublier par la suite. On vérifie immédiatement que la relation entre deux vecteurs de $\mathcal{H}$

$$|\varphi'\rangle = e^{i\theta}|\varphi\rangle \quad (8.1)$$

où θ est un nombre réel, est une relation d'équivalence⁵ $|\varphi'\rangle \sim |\varphi\rangle$. La classe d'équivalence est un rayon, que nous noterons $\tilde{\varphi}$. Le produit scalaire de deux rayons $\tilde{\varphi}$ et $\tilde{\chi}$ n'est pas défini, mais le module de ce produit scalaire, que nous noterons $|\langle\tilde{\chi}, \tilde{\varphi}\rangle|$ est bien défini : on peut choisir deux représentants arbitraires $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ dans les classes d'équivalence et écrire

$$|\langle\tilde{\chi}, \tilde{\varphi}\rangle| = |\langle\chi|\varphi\rangle| \quad (8.2)$$

car les facteurs de phase disparaissent lorsque l'on prend le module. Le résultat est indépendant du choix des représentants dans les classes d'équivalence.

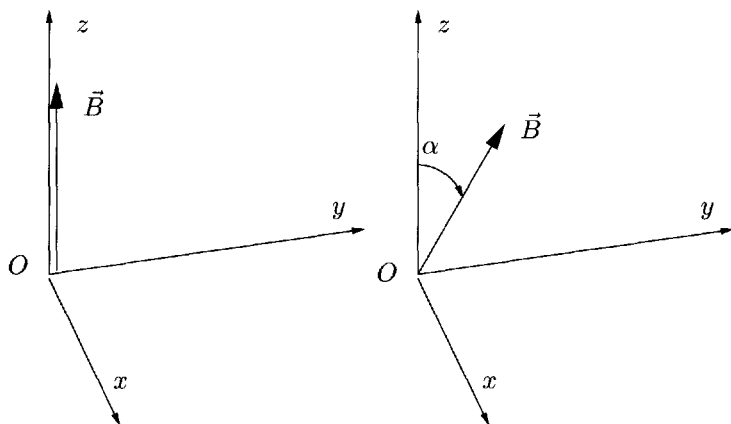
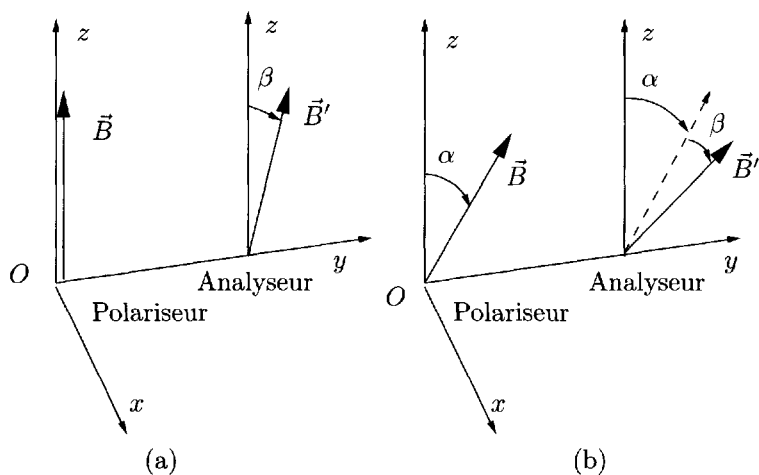
Revenons au spin 1/2 du chapitre 3 : nous avons vu comment préparer un état de spin orienté suivant Oz que nous représenterons par le rayon $\tilde{\varphi}_+$, en utilisant un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est orienté suivant Oz et en sélectionnant les atomes déviés vers le haut (en choisissant un signe approprié pour le champ). Faisons tourner le champ d'un angle α autour de la direction de propagation Oy pour l'amener suivant une direction $\hat{n}_\alpha$ faisant un angle α avec Oz , $0 \leq \alpha < 2\pi$. Nous préparons ainsi l'état représenté par le rayon $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$, qui sera par définition l'état transformé de $\tilde{\varphi}_+$ par une rotation de α autour de Oy (figure 8.1). Avec les notations du chapitre 3, la classe d'équivalence du vecteur $|+\rangle$ est le rayon $\tilde{\varphi}_+$, celle du vecteur $|+, \hat{n}_\alpha\rangle$ le rayon $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$. En général, le transformé $\tilde{\varphi}_\mathcal{R}$ par une rotation $\mathcal{R}$ d'un état $\tilde{\varphi}$ sera obtenu en effectuant une rotation $\mathcal{R}$ sur l'appareil qui prépare $\tilde{\varphi}$.

Supposons maintenant qu'à la suite du premier appareil de Stern-Gerlach dont le champ est parallèle à Oz , le polariseur, on place un second appareil,

3. Pour certaines transformations comme la réflexion par rapport à un plan, il est plus simple d'utiliser le point de vue passif, qui consiste à regarder le système dans un miroir, mais on peut aussi imaginer de construire un appareillage symétrique de l'original par rapport à un plan.

4. Au moins pour l'auteur !

5. La notation $\sim$ désigne ici une relation d'équivalence, et non « de l'ordre de ».

FIG. 8.1 – Préparation des états (rayons) $\tilde{\varphi}_+$ et $\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha)$.FIG. 8.2 – Rotations simultanées du polariseur et de l'analyseur d'un angle α .

l'analyseur, dont le champ est parallèle à la direction $\hat{n}_\beta$, obtenue à partir de Oz par une rotation d'angle β autour de Oy (figure 8.2a). S'il n'y a pas sur le trajet de champ magnétique susceptible de faire tourner le spin, la probabilité pour que le spin soit dévié dans la direction $\hat{n}_\beta$ est

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\beta), \tilde{\varphi}_+)|^2$$

Effectuons maintenant l'expérience en faisant tourner à la fois le polariseur et l'analyseur d'un angle α (figure 8.2b). La probabilité de déviation dans la direction $\hat{n}_{\alpha+\beta}$ est

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_{\alpha+\beta}), \tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha))|^2$$

Comme on a fait subir la même rotation au polariseur et à l'analyseur, l'invariance par rotation implique que les probabilités sont inchangées

$$|(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_{\alpha+\beta}), \tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\alpha))|^2 = |(\tilde{\varphi}_+(\hat{n}_\beta), \tilde{\varphi}_+)|^2 \quad (8.3)$$

Généralisons (8.3) : si l'on effectue une transformation g sur un état $\tilde{\varphi}$ en appliquant cette transformation sur l'appareil de préparation de $\tilde{\varphi}$ pour obtenir l'état transformé $\tilde{\varphi}_g : \tilde{\varphi} \rightarrow \tilde{\varphi}_g$, et si l'on effectue la même opération sur l'appareil de mesure pour $\tilde{\chi} : \tilde{\chi} \rightarrow \tilde{\chi}_g$, alors les probabilités doivent être inchangées si la physique est invariante dans cette opération

$$|(\tilde{\chi}_g, \tilde{\varphi}_g)|^2 = |(\tilde{\chi}, \tilde{\varphi})|^2 \quad (8.4)$$

8.1.2 Théorème de Wigner

La propriété (8.4) sur les *rayons* se traduit par une propriété sur les *vecteurs* grâce à un théorème d'une grande importance dû à Wigner.

Théorème de Wigner. Si l'on traduit mathématiquement la loi de transformation des états physiques par une loi de transformation sur les *rayons* correspondants : $\tilde{\varphi} \rightarrow \tilde{\varphi}_g$ lorsque l'on applique une transformation g à un système physique, et si l'on suppose que les probabilités sont invariantes dans cette transformation

$$|(\tilde{\chi}_g, \tilde{\varphi}_g)|^2 = |(\tilde{\chi}, \tilde{\varphi})|^2 \quad \forall \tilde{\varphi}, \tilde{\chi}$$

alors il est possible de choisir un représentant $|\varphi_g\rangle$ de $\tilde{\varphi}_g$ tel que pour tout vecteur $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\varphi_g\rangle = U(g)|\varphi\rangle \quad (8.5)$$

où l'opérateur $U(g)$ est unitaire ou antiunitaire et est unique à un facteur de phase près. ■

La loi de transformation des *rayons* devient donc une loi de transformation des *vecteurs*, par application d'un opérateur qui ne dépend que de la transformation g . Si $U(g)$ est unitaire, le théorème de Wigner implique non seulement l'invariance de la norme du produit scalaire, mais aussi celle de sa phase, puisque

$$\langle U(g)\chi | U(g)\varphi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle$$

Les opérateurs antiunitaires transforment le produit scalaire en son complexe conjugué

$$\langle U(g)\chi | U(g)\varphi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \chi \rangle \quad (8.6)$$

La démonstration du théorème de Wigner ne fait intervenir que des notions élémentaires, mais elle est fastidieuse, et nous la renvoyons à l'annexe A. Les opérateurs antiunitaires n'interviennent que lorsque la transformation g inclut le renversement du sens du temps ; nous en dirons un mot au § 8.3.3, mais nous

en renvoyons l'étude détaillée à l'appendice A. Nous nous limitons désormais aux transformations unitaires.

Le théorème de Wigner a des conséquences particulièrement intéressantes si les transformations g forment un groupe $\mathcal{G}$. Le produit $g = g_2 g_1$ de deux transformations, de même que la transformation inverse g^{-1} , sont alors des transformations de $\mathcal{G}$. L'ordre des transformations dans $g_2 g_1$ est important car le groupe $\mathcal{G}$ n'est pas en général abélien : $g_2 g_1 \neq g_1 g_2$. Si $g = g_2 g_1$, les rayons $\vec{\varphi}_g$ et $\vec{\varphi}_{g_2 g_1}$ doivent être identiques. Par exemple si $\mathcal{G}$ est le groupe des rotations autour de Oz , et si $\mathcal{R}_z(\theta)$ représente la rotation d'angle θ autour de Oz on a

$$\mathcal{R}_z(\theta = \theta_2 + \theta_1) = \mathcal{R}_z(\theta_2) \mathcal{R}_z(\theta_1) \quad (8.7)$$

L'état physique obtenu en effectuant une rotation d'angle $\theta = \theta_2 + \theta_1$ doit être identique à celui obtenu en effectuant d'abord une rotation d'angle θ_1 suivie d'une rotation d'angle θ_2 .

Utilisons maintenant le théorème de Wigner pour faire un choix de phases sur les vecteurs tel que la correspondance entre $|\varphi\rangle$ et $|\varphi_g\rangle$ soit donnée par (8.5). Nous avons d'une part

$$|\varphi_g\rangle = U(g)|\varphi\rangle \quad (8.8)$$

et d'autre part

$$|\varphi_{g_2 g_1}\rangle = U(g_2)|\varphi_{g_1}\rangle = U(g_2)U(g_1)|\varphi\rangle \quad (8.9)$$

Les vecteurs $|\varphi_g\rangle$ et $|\varphi_{g_2 g_1}\rangle$ représentent des états physiques identiques, et ils doivent être égaux à un facteur de phase près

$$|\varphi_g\rangle = e^{i\alpha(g_2, g_1)} |\varphi_{g_2 g_1}\rangle \quad (8.10)$$

Le facteur de phase dans (8.10) pourrait *a priori* dépendre de $|\varphi\rangle$, mais en fait il dépend uniquement de g_1 et de g_2 . En effet, si nous écrivons

$$|\varphi_g\rangle = e^{i\alpha} |\varphi_{g_2 g_1}\rangle \quad |\chi_g\rangle = e^{i\beta} |\chi_{g_2 g_1}\rangle$$

nous pouvons examiner le produit scalaire $\langle\chi|\varphi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\chi|\varphi\rangle &= \langle\chi_g|\varphi_g\rangle = e^{i(\alpha-\beta)} \langle\chi_{g_2 g_1}|\varphi_{g_2 g_1}\rangle \\ &= e^{i(\alpha-\beta)} \langle U(g_2)U(g_1)\chi | U(g_2)U(g_1)\varphi \rangle \\ &= e^{i(\alpha-\beta)} \langle\chi|\varphi\rangle \end{aligned}$$

ce qui implique $\alpha = \beta$. Comme le vecteur $|\varphi\rangle$ est arbitraire, (8.10) entraîne une relation correspondante pour les opérateurs $U(g)$

$$U(g) = e^{i\alpha(g_2, g_1)} U(g_2)U(g_1) \quad (8.11)$$

Cette équation traduit une propriété mathématique : on dit que les opérateurs $U(g)$ forment une *représentation projective* du groupe $\mathcal{G}$. Dans la suite du livre,

nous aurons uniquement à considérer deux versions simples de (8.11), l'une où le facteur de phase est $+1$, et dans ce cas on a affaire à une *représentation vectorielle* de $\mathcal{G}$

$$U(g) = U(g_2)U(g_1) \quad (8.12)$$

et l'autre où le facteur de phase vaut ± 1

$$U(g) = \pm U(g_2)U(g_1) \quad (8.13)$$

Nous verrons apparaître ce facteur $\pm$ dans le cas où $\mathcal{G}$ est le groupe des rotations ; les représentations (8.13) de ce groupe sont appelées *représentations spinorielles* du groupe des rotations.

8.2 Générateurs infinitésimaux

8.2.1 Définitions

On distingue deux types de groupes de transformations.

- Les groupes discrets, dont le nombre d'éléments est fini ou dénombrable. Comme cas particuliers simples on peut citer la parité, ou opération qui change le signe des coordonnées $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ (cf. § 8.3.3), ou les groupes cristallographiques qui jouent un rôle important en physique du solide.
- Les groupes continus, dont les éléments sont paramétrés par un ou plusieurs paramètres variant de façon continue⁶. Par exemple la rotation $\mathcal{R}_z(\theta)$ autour de Oz est paramétrée par l'angle θ qui varie de façon continue entre 0 et 2π .

Les groupes continus intéressants en physique sont les groupes de Lie (exercice 8.5.4), dont un exemple est le groupe des rotations dans un espace à trois dimensions, ou groupe $SO(3)$, le groupe des matrices orthogonales : $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{R}^T = I$ de déterminant $+1$ dans l'espace à trois dimensions⁷ ; A^T désigne l'opérateur transposé de A . Ce groupe va jouer un rôle majeur dans la suite. C'est un groupe à trois paramètres : on peut par exemple paramétrer une rotation par deux angles donnant la direction $\hat{n}$ de l'axe de rotation dans un référentiel $Oxyz$ et l'angle de rotation, donc en tout trois angles qui varient de façon continue. Le groupe des rotations possède une infinité

6. On peut remarquer que dans le cas d'un groupe continu, les transformations $U(g)$ doivent nécessairement être unitaires par continuité, si tout élément du groupe peut être relié de façon continue à l'élément neutre e du groupe (en d'autres termes si le groupe est connexe) : en effet $U(e) = I$ est unitaire.

7. La relation $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = I$ implique que $\det \mathcal{R} = \pm 1$. Dans la notation $SO(3)$, S indique que l'on doit choisir $\det \mathcal{R} = +1$, O qu'il s'agit du groupe orthogonal et 3 désigne la dimension de l'espace. Si l'on ajoute aux rotations l'opération d'inversion des axes, ou parité, on obtient le groupe $O(3)$, qui inclut aussi les matrices de déterminant -1 . Le groupe $SO(3)$ est connexe, mais non $O(3)$: on ne peut pas passer de façon continue de $\det \mathcal{R} = +1$ à $\det \mathcal{R} = -1$.

de sous-groupes abéliens, les rotations autour d'un axe fixe. Nous allons montrer qu'il suffit de considérer trois sous-groupes abéliens correspondant aux rotations autour de Ox , Oy et Oz : le nombre de ces sous-groupes est égal au nombre de paramètres indépendants. Les rotations de ces sous-groupes sont paramétrées par un angle θ , et selon (8.7), ce paramètre est un paramètre *additif* : le produit de deux rotations d'angles θ_1 et θ_2 est la rotation d'angle $\theta = \theta_1 + \theta_2$. De façon générale, si un groupe de Lie $\mathcal{G}$ est paramétré par n paramètres indépendants, on dira que la dimension du groupe est n , et on pourra se ramener à l'étude de n sous-groupes abéliens (exercice 8.5.4). Soit un sous groupe abélien de $\mathcal{G}$, dont les éléments h sont paramétrés à l'aide d'un paramètre additif α

$$h(\alpha_1 + \alpha_2) = h(\alpha_2)h(\alpha_1) \quad (8.14)$$

D'après (8.12) on doit avoir pour les opérateurs $U_h(\alpha)$ qui transforment les vecteurs d'état de $\mathcal{H}$

$$U_h(\alpha_1 + \alpha_2) = U_h(\alpha_2)U_h(\alpha_1) \quad (8.15)$$

Le théorème de Stone (§ 7.3.2) implique qu'il existe alors un opérateur hermitique $T_h = T_h^\dagger$ tel que

$$U_h(\alpha) = e^{-i\alpha T_h} \quad (8.16)$$

L'opérateur T_h est appelé *générateur infinitésimal* de la transformation considérée. Comme T_h est hermitique, c'est un bon candidat pour une grandeur physique, et de fait à toutes les transformations dont la liste figure dans l'introduction de ce chapitre correspondent des grandeurs physiques fondamentales. En effet, on établit la correspondance suivante entre générateurs infinitésimaux et grandeurs physiques pour ces diverses transformations, que nous allons revoir en détail dans la suite de ce chapitre.

- Translations de temps de t : $U(t) = \exp(-itH/\hbar)$: $T_h = H =$ hamiltonien : voir le chapitre 4.
- Translations d'espace de $\vec{a} = a\hat{a}$: $U(\vec{a}) = \exp(-ia(\vec{P} \cdot \hat{a})/\hbar)$: $T_h = \vec{P} \cdot \hat{a} =$ composante suivant $\hat{a}$ de l'impulsion $\vec{P}$.
- Rotations autour d'un axe $\hat{n}$: $U_{\hat{n}}(\theta) = \exp(-i\theta(\vec{J} \cdot \hat{n})/\hbar)$: $T_h = \vec{J} \cdot \hat{n} =$ composante suivant $\hat{n}$ du moment angulaire $\vec{J}$.
- Transformation de Galilée de vitesse $\vec{v}$: $U(\vec{v}) = \exp(-i(\vec{v} \cdot \vec{G})/\hbar)$: $\vec{G} = -m\vec{R}$, $\vec{R} =$ position, m étant la masse.

Dans chaque cas, la présence de $\hbar$ dans l'exponentielle assure que l'exposant est une quantité sans dimensions. Si l'on choisit précisément $\hbar$, et non $\hbar$ que multiplie une constante numérique, alors les expressions précédentes *définissent* les opérateurs représentant les grandeurs physiques énergie, impulsion, moment angulaire et position. En fait ces expressions donnent la définition *la plus générale* de ces opérateurs.

8.2.2 Lois de conservation

Nous allons montrer qu'aux lois de conservation de la physique classique en présence d'une symétrie correspondent en physique quantique des lois de conservation pour les valeurs moyennes de grandeurs physiques. Généralisons d'abord (4.26) au cas où l'opérateur A dépend explicitement du temps. Au membre de droite de (4.26) on doit ajouter

$$\langle \varphi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \varphi(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\varphi}$$

et cette équation donne la forme générale du théorème d'Ehrenfest

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_{\varphi} + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\varphi}} \quad (8.17)$$

Lorsque l'opérateur A est indépendant du temps, $(\partial A / \partial t) = 0$ et l'on retrouve (4.26)

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_{\varphi} \quad (8.18)$$

Comme cette égalité est valable quel que soit $|\varphi\rangle$, nous obtenons le théorème suivant (nous supposons H indépendant du temps).

Théorème de conservation de la valeur moyenne. Lorsque la grandeur physique A est indépendante du temps, la condition $d\langle A \rangle / dt = 0$ implique $[H, A] = 0$ et réciproquement.

$$\text{Si } \frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\varphi} = 0 \iff [H, A] = 0 \quad \blacksquare \quad (8.19)$$

Comme application, supposons que les propriétés d'un système physique soient invariantes par toute translation d'espace. Ce sera le cas par exemple pour un système isolé de deux particules dont l'énergie potentielle dépend uniquement de la différence de leurs positions $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. La valeur moyenne du hamiltonien doit être la même dans l'état $|\varphi\rangle$ et l'état $|\varphi_{\vec{a}}\rangle = \exp[-i(\vec{P} \cdot \vec{a})/\hbar]|\varphi\rangle$ obtenu par translation de $\vec{a}$, où $\vec{a}$ est un vecteur arbitraire

$$\langle \varphi_{\vec{a}} | H | \varphi_{\vec{a}} \rangle = \langle \varphi | \exp\left(i \frac{\vec{P} \cdot \vec{a}}{\hbar}\right) H \exp\left(-i \frac{\vec{P} \cdot \vec{a}}{\hbar}\right) | \varphi \rangle = \langle \varphi | H | \varphi \rangle$$

Faisant tendre $\vec{a}$ vers zéro on en déduit

$$\boxed{\text{Invariance par translation d'espace} \iff [H, \vec{P}] = 0} \quad (8.20)$$

La notation $[H, \vec{P}] = 0$ indique que les trois composantes de l'impulsion commutent avec H . D'après (8.18), cette équation implique que la valeur moyenne $\langle \vec{P} \rangle$ de $\vec{P}$ est indépendante du temps : l'invariance par translation

entraîne la conservation de l'impulsion (en valeur moyenne). Un raisonnement identique montre que

$$\boxed{\text{Invariance par rotation} \iff [H, \vec{J}] = 0} \quad (8.21)$$

La valeur moyenne $\langle \vec{J} \rangle$ de $\vec{J}$ est indépendante du temps : l'invariance par rotation entraîne la conservation du moment angulaire (en valeur moyenne).

Il est également utile de faire les deux remarques suivantes :

- Si $[H, A] = 0$, A et H peuvent être diagonalisés simultanément, et en particulier on peut choisir pour vecteurs propres de A les états stationnaires.
- La condition $[H, A] = 0$ implique que A commute avec l'opérateur d'évolution $U(t - t_0)$ (4.20). Si $|\varphi(t_0)\rangle$ est vecteur propre de A au temps t_0

$$A|\varphi(t_0)\rangle = a|\varphi(t_0)\rangle$$

alors $|\varphi(t)\rangle$ est vecteur propre de A avec la même valeur propre

$$A|\varphi(t)\rangle = AU(t - t_0)|\varphi(t_0)\rangle = U(t - t_0)A|\varphi(t_0)\rangle = a|\varphi(t)\rangle$$

La valeur propre a est conservée : c'est une constante du mouvement. On aurait pu déduire ce résultat directement de (8.19), puisque dans ce cas $\langle A \rangle = a$.

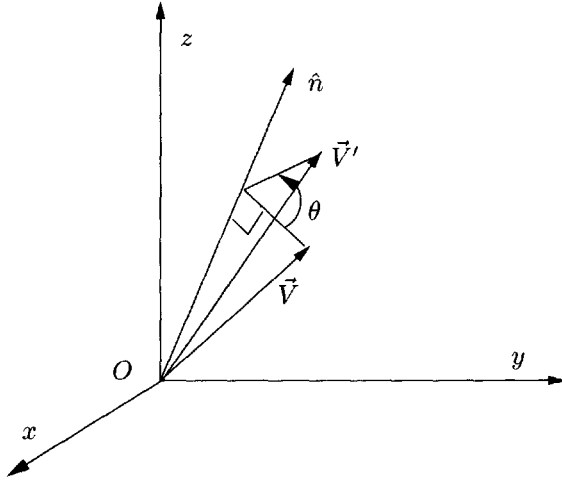
8.2.3 Relations de commutation des générateurs infinitésimaux

On peut déterminer la plupart des propriétés d'un groupe de Lie en examinant le voisinage de l'identité, plus précisément en étudiant les relations de commutation de ses générateurs infinitésimaux : l'ensemble de ces relations de commutation constitue l'*algèbre de Lie* du groupe (exercice 8.5.4). Cependant, deux groupes de Lie isomorphes dans le voisinage de l'identité peuvent différer par des propriétés topologiques globales : nous en verrons bientôt un exemple. Examinons plus en détail le cas du groupe des rotations⁸. L'opérateur de rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ d'un angle θ autour d'un axe $\hat{n}$ est un opérateur orthogonal de l'espace à trois dimensions : $\mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathcal{R} \mathcal{R}^T = I$. Les rotations $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ forment un sous-groupe abélien du groupe des rotations, et toujours d'après le théorème de Stone, on peut écrire

$$\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta) = \exp \left(-i\theta(\vec{T} \cdot \hat{n}) \right) \quad (8.22)$$

où $\vec{T} \cdot \hat{n}$ est un opérateur hermitique : $\mathcal{R}$ étant orthogonal et réel, est aussi unitaire. Dans une telle rotation, un vecteur $\vec{V}$ se transforme en $\vec{V}'$ (figure 8.3)

8. Sauf mention explicite du contraire, il s'agira toujours du groupe $SO(3)$ des rotations dans l'espace euclidien à trois dimensions.

FIG. 8.3 – Rotation de θ d'un vecteur $\vec{V}$ autour d'un axe $\hat{n}$.

$$\vec{V}' = (1 - \cos \theta)(\hat{n} \cdot \vec{V})\hat{n} + \cos \theta \vec{V} + \sin \theta(\hat{n} \times \vec{V}) \quad (8.23)$$

On peut écrire cette loi de transformation sous forme matricielle

$$V'_i = \sum_{j=1}^3 [\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij} V_j \quad (8.24)$$

La détermination explicite de la matrice $[\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij}$ est proposée à l'exercice 8.5.1. Nous n'aurons pas à nous en servir, car nous allons prendre la limite $\theta \rightarrow 0$, c'est-à-dire la limite des rotations infinitésimales

$$\boxed{\vec{V}' = \vec{V} + \theta(\hat{n} \times \vec{V}) + O(\theta)^2} \quad (8.25)$$

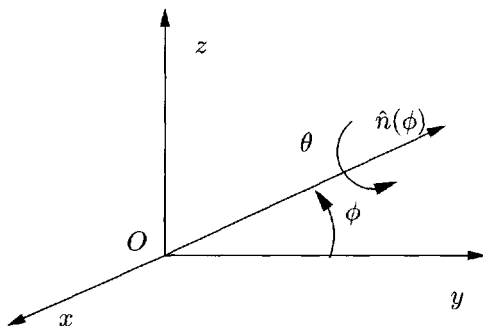
Le développement de l'exponentielle dans (8.22) et la comparaison avec (8.25) donnent

$$(\vec{T} \cdot \hat{n})\vec{V} = i \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

et par identification les opérateurs hermitiques T_x , T_y et T_z

$$T_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad T_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.26)$$

Lorsque θ est fini, on peut aisément calculer l'exponentielle dans (8.22) en remarquant que $(\vec{T} \cdot \hat{n})^3 = \vec{T} \cdot \hat{n}$ (exercice 8.5.1) et vérifier que l'on retrouve

FIG. 8.4 – Rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta)$.

bien (8.23). Un calcul direct (exercice 8.5.1) permet de montrer les relations de commutation⁹ suivantes, qui constituent l'algèbre de Lie de $SO(3)$

$$[T_x, T_y] = iT_z \quad [T_y, T_z] = iT_x \quad [T_z, T_x] = iT_y \quad (8.27)$$

ou en reprenant les notations de (3.52)

$$\boxed{[T_i, T_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} T_k} \quad (8.28)$$

Nous allons donner une démonstration plus rapide et surtout plus instructive de (8.27) en utilisant l'expression suivante pour une rotation d'angle θ autour d'un axe $\hat{n}(\phi)$ du plan yOz , obtenu à partir de l'axe Oy par une rotation d'angle ϕ autour de Ox (figure 8.4)

$$\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta) = \mathcal{R}_x(\phi) \mathcal{R}_y(\theta) \mathcal{R}_x(-\phi) \quad (8.29)$$

En effet la rotation $\mathcal{R}_x(-\phi)$ amène d'abord l'axe $\hat{n}(\phi)$ sur Oy ; on effectue ensuite la rotation d'angle θ autour de Oy et on revient enfin à la position initiale de l'axe par la rotation $\mathcal{R}_x(\phi)$. Exprimons $\mathcal{R}_{\hat{n}(\phi)}(\theta)$ et $\mathcal{R}_y(\theta)$ sous forme exponentielle (8.22) et développons au premier ordre en θ

$$\vec{T} \cdot \hat{n}(\phi) = \cos \phi T_y + \sin \phi T_z = e^{-i\phi T_x} T_y e^{i\phi T_x}$$

En développant au premier ordre en ϕ , on obtient

$$[T_x, T_y] = iT_z$$

et les deux autres relations de commutation (8.27) s'en déduisent par permutation circulaire.

9. Il suffit bien sûr de montrer la première relation, les deux autres s'en déduisant par permutation circulaire.

Considérons maintenant les opérateurs qui effectuent des rotations sur les états physiques dans $\mathcal{H}$. Nous avons vu que l'opérateur qui effectue une rotation d'angle θ autour d'un axe $\hat{n}$ est

$$U_{\hat{n}}(\theta) = \exp \left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) \quad (8.30)$$

Comme ces opérateurs forment une représentation du groupe des rotations, on déduit de (8.12) et de (8.29)

$$U_{\hat{n}(\phi)}(\theta) = U_x(\phi)U_y(\theta)U_x(-\phi)$$

En développant comme précédemment les exponentielles au premier ordre en θ puis en ϕ , on obtient les relations de commutation du moment angulaire

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (8.31)$$

ou

$$[J_i, J_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k \quad (8.32)$$

Les relations de commutation des J_i sont donc, au facteur $\hbar$ près, identiques à celles des T_i . *Les générateurs infinitésimaux des rotations dans $\mathcal{H}$ ont des relations de commutation identiques à celles des générateurs infinitésimaux du groupe des rotations dans l'espace ordinaire.* Notre démonstration des relations (8.31) ou (8.32) souligne leur origine géométrique.

Les relations de commutation des opérateurs scalaires et vectoriels avec $\vec{J}$ sont d'une grande importance pratique. Un *opérateur scalaire* $\mathcal{S}$ est un opérateur dont la valeur moyenne est invariante dans une rotation. Si $U(\mathcal{R})$ est l'opérateur qui effectue la rotation $\mathcal{R}$ dans l'espace des états

$$|\varphi_{\mathcal{R}}\rangle = U(\mathcal{R})|\varphi\rangle$$

nous devons avoir

$$\langle \varphi_{\mathcal{R}} | \mathcal{S} | \varphi_{\mathcal{R}} \rangle = \langle \varphi | U^\dagger(\mathcal{R}) \mathcal{S} U(\mathcal{R}) | \varphi \rangle = \langle \varphi | \mathcal{S} | \varphi \rangle$$

et par conséquent pour une rotation $R_{\hat{n}}(\theta)$

$$\exp \left(i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) \mathcal{S} \exp \left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) = \mathcal{S}$$

Prenant θ infinitésimal, nous constatons que $\mathcal{S}$ commute avec $\vec{J}$

$$[\vec{J}, \mathcal{S}] = 0$$

Un opérateur scalaire commute avec le moment angulaire.

Un raisonnement analogue permet d'établir les relations de commutation de $\vec{J}$ avec $\vec{R}$ ou $\vec{P}$, et plus généralement avec tous les *opérateurs vectoriels*. Par définition, un opérateur vectoriel $\vec{V}$ est un opérateur dont la valeur moyenne se transforme par rotation suivant la loi (8.24). Nous devons donc avoir

$$\langle \varphi_{\mathcal{R}} | V_i | \varphi_{\mathcal{R}} \rangle = \langle \varphi | U^\dagger(\mathcal{R}) V_i U(\mathcal{R}) | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^3 \mathcal{R}_{ij} \langle \varphi | V_j | \varphi \rangle$$

et par conséquent pour une rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$

$$\exp\left(i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) V_i \exp\left(-i\theta \frac{\vec{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) = \sum_{j=1}^3 [\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)]_{ij} V_j \quad (8.33)$$

Prenons $\hat{n} = \hat{x}$ et θ infinitésimal ; d'après (8.25) $\vec{V}'$ a pour composantes

$$(V_x, V_y - \theta V_z, V_z + \theta V_y)$$

et nous avons donc, par exemple pour la composante $i = y$ de (8.33)

$$\left(I + \frac{i}{\hbar} \theta J_x\right) V_y \left(I - \frac{i}{\hbar} \theta J_x\right) = V_y - \theta V_z$$

soit $i[J_x, V_y] = -\hbar V_z$ et en examinant les autres composantes

$$[J_x, V_x] = 0 \quad [J_x, V_y] = i\hbar V_z \quad [J_x, V_z] = -i\hbar V_y$$

ou sous forme générale

$$[J_i, V_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} V_k \quad (8.34)$$

Ces relations sont valables en particulier pour l'opérateur position $\vec{R}$ et l'opérateur impulsion $\vec{P}$, qui sont des opérateurs vectoriels.

Le lecteur attentif aura remarqué que les relations de commutation (3.53) du spin $1/2$, $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ sont identiques à (8.31), et que le spin $1/2$ est donc un moment angulaire. Donnons quelques indications permettant de comprendre cette identification, sans toutefois entrer dans des détails mathématiques qui nous entraîneraient trop loin. L'algèbre de Lie (3.52) des matrices de Pauli est celle du groupe $SU(2)$ des matrices 2×2 unitaires et de déterminant $+1$ (exercice 8.5.2). L'algèbre de Lie de $SU(2)$ et celle de $SO(3)$ sont identiques : les deux groupes coïncident dans le voisinage de l'identité. Cependant les deux groupes ne sont pas *globalement* identiques : on le voit en considérant une rotation de 2π autour d'un axe $\hat{n}$. Compte tenu de (exercice 3.3.6)

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right) = \cos\frac{\theta}{2} I - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin\frac{\theta}{2} \quad (8.35)$$

on voit que

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right) = -I \quad \text{pour } \theta = 2\pi$$

On retrouve l'identité seulement pour $\theta = 4\pi$! À la rotation identité de $SO(3)$ correspondent donc deux éléments de $SU(2)$, $+I$ et $-I$. La correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$ est un homomorphisme, qui à deux éléments de $SU(2)$ fait correspondre un élément de $SO(3)$, et on a donc pour un spin $1/2$ une représentation projective (8.13) du groupe des rotations. Cette propriété découle de ce que le groupe $SO(3)$ est connexe mais non simplement connexe¹⁰ : une courbe continue fermée dans l'espace des paramètres du groupe ne peut pas toujours être déformée continûment en un point. Cette propriété est visible dans les rotations de l'espace ordinaire¹¹ ; elle n'est pas propre à la mécanique quantique comme on a parfois tendance à l'affirmer¹² : la véritable rotation identité pour un objet *en relation avec son environnement* n'est pas la rotation de 2π mais la rotation de 4π !

8.3 Relations de commutation canoniques

8.3.1 Cas de la dimension $d = 1$

Plaçons-nous d'abord à une dimension, sur l'axe des x , et soit X l'opérateur position. Considérons une particule dans un état $|\varphi\rangle$ où cette particule est localisée au voisinage d'une position moyenne x_0 , avec une dispersion Δx

$$\langle\varphi|X|\varphi\rangle = \langle X\rangle = x_0 \quad \langle\varphi|(X - x_0)^2|\varphi\rangle = (\Delta x)^2 \quad (8.36)$$

10. Un disque dans le plan est simplement connexe. Perçons un trou dans ce disque : alors la région du plan ainsi obtenue n'est plus simplement connexe, car une courbe encerclant le trou ne peut plus être déformée en un point.

11. cf. Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 3.D ; l'argument est dû à Dirac.

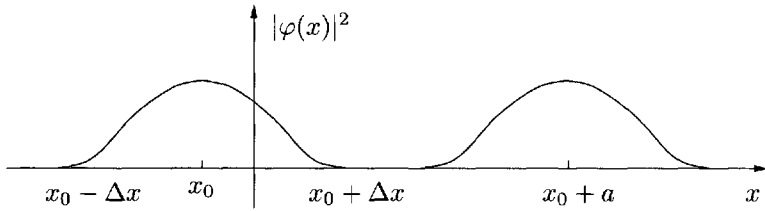
12. Un mot sur les conditions où les représentations projectives sont nécessaires. Deux cas peuvent se présenter. (i) Comme pour la correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$, la nécessité d'une représentation projective vient de propriétés topologiques globales. Le facteur de phase dans (8.11) prend alors des valeurs discrètes, comme dans (8.13). (ii) Si

$$[T_i, T_j] = i \sum_k C_{ijk} T_k$$

est l'algèbre de Lie du groupe (dont (8.28) pour $SO(3)$ est un exemple, voir aussi l'exercice 8.5.4), il se peut que l'on puisse construire une autre algèbre de Lie dont le second membre diffère par un multiple de l'identité :

$$[T'_i, T'_j] = i \sum_k C_{ijk} T'_k + i D_{ij} I \quad D_{ij} = -D_{ji}$$

C'est ce que l'on appelle une extension centrale de l'algèbre de Lie initiale. Si le terme $D_{ij} I$ peut être éliminé par une redéfinition des générateurs infinitésimaux T'_i , alors il n'existe que des représentations vectorielles (avec éventuellement des facteurs de phase discrets dus aux propriétés topologiques globales comme dans (i)). Dans le cas contraire, par exemple celui du groupe de Galilée (exercice 8.5.7), il existe des représentations projectives où le facteur de phase varie de façon continue : cf. par exemple Weinberg [1995], chapitre 2.

FIG. 8.5 – Particule localisée au voisinage de $x = x_0$.

Elle est par exemple localisée dans l'intervalle $[x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x]$ (figure 8.5). Si nous appliquons à cet état une translation a

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi_a\rangle = \exp\left(-i \frac{Pa}{\hbar}\right)|\varphi\rangle = U(a)|\varphi\rangle$$

où P est l'opérateur impulsion et $U(a)$ l'opérateur de translation

$$\boxed{U(a) = \exp\left(-i \frac{Pa}{\hbar}\right) \quad U^{-1}(a) = U^\dagger(a) = \exp\left(i \frac{Pa}{\hbar}\right)} \quad (8.37)$$

alors la particule sera après translation localisée dans l'intervalle $[x_0 + a - \Delta x, x_0 + a + \Delta x]$

$$\langle X \rangle_a = \langle \varphi_a | X | \varphi_a \rangle = \langle \varphi | U^{-1}(a) X U(a) | \varphi \rangle = x_0 + a = \langle X \rangle + a$$

Comme l'état $|\varphi\rangle$ est arbitraire, l'égalité des valeurs moyennes entraîne celle des opérateurs

$$U^{-1}(a) X U(a) = X + aI \quad (8.38)$$

et en faisant tendre a vers zéro nous obtenons la *relation de commutation canonique* entre X et P

$$\boxed{[X, P] = i\hbar I} \quad (8.39)$$

Comme application, calculons le commutateur entre P et une fonction quelconque $f(X)$. Développons $f(X)$ en série de Taylor

$$f(X) = c_0 + c_1 X^2 + \dots + c_n X^n + \dots$$

D'après (8.38)

$$U^{-1}(a) X^2 U(a) = U^{-1}(a) X U(a) U^{-1}(a) X U(a) = (X + aI)^2$$

et ceci se généralise immédiatement à X^n

$$U^{-1}(a) X^n U(a) = (X + aI)^n$$

Nous obtenons donc

$$\boxed{U^{-1}(a)f(X)U(a) = f(X + aI)} \quad (8.40)$$

Selon une technique maintenant éprouvée nous faisons tendre a vers zéro

$$[P, f(X)] = -i\hbar \frac{\partial f(X)}{\partial X} \quad (8.41)$$

Comme cas particulier de (8.40) nous pouvons choisir $f(X) = \exp(i\beta X)$, β réel, et nous obtenons les relations de commutation canoniques sous la forme de Weyl

$$\exp\left(i\frac{Pa}{\hbar}\right) \exp(i\beta X) \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) = \exp(i\beta X) \exp(i\beta a) \quad (8.42)$$

La forme de Weyl est plus intéressante mathématiquement que (8.39), car les opérateurs unitaires qui interviennent dans (8.42) sont bornés (§ 7.2.1), contrairement aux opérateurs X et P .

On déduit immédiatement de (8.39) l'inégalité de Heisenberg sur les dispersions en position et impulsion ; en effet, d'après (4.10)

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\langle (X - x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (P - p)^2 \rangle} \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (8.43)$$

8.3.2 Réalisation explicite et commentaires

Une réalisation explicite, ou *représentation* des relations de commutation canoniques (8.39), peut être donnée dans l'espace $L^{(2)}(\mathbb{R})$ des fonctions $\varphi(x)$ différentiables de carré sommable sur la droite dans l'intervalle $[-\infty, +\infty]$. Cette représentation est

$$\boxed{(X\varphi)(x) = x\varphi(x) \quad (P\varphi)(x) = -i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}} \quad (8.44)$$

Dans ces équations, $(X\varphi)$ et $(P\varphi)$ sont des symboles de fonctions, par exemple $(X\varphi)(x) = g(x)$ et $(P\varphi)(x) = h(x)$. Vérifions (8.44)

$$([XP - PX]\varphi)(x) = -i\hbar x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi(x)) = i\hbar \varphi(x)$$

ou

$$([X, P]\varphi)(x) = i\hbar \varphi(x)$$

Il est légitime de se poser la question de l'unicité de la représentation (8.44) des relations de commutation canoniques : l'équation (8.44) est-elle une solution unique de (8.39) ? Évidemment deux représentations ne doivent pas être considérées comme distinctes si elles sont reliées par une transformation unitaire, qui est un simple changement de base orthonormée dans $\mathcal{H}$. Soit U

un opérateur unitaire. Les opérateurs P' et X' obtenus par transformation unitaire

$$P' = U^\dagger P U \quad X' = U^\dagger X U$$

obéissent aussi aux relations de commutation canoniques

$$[X', P'] = U^\dagger X U U^\dagger P U - U^\dagger P U U^\dagger X U = U^\dagger [X, P] U = i\hbar I$$

La représentation (X', P') des relations de commutation canoniques est dite unitairement équivalente à la représentation (X, P) . La grande importance de (8.44) vient du théorème suivant, que nous énonçons sans démonstration.

Théorème d'équivalence unitaire de von Neumann. Toutes les représentations des relations de commutation canoniques sous la forme de Weyl¹³ (8.42) sont unitairement équivalentes à la représentation (8.44) sur $L^{(2)}(\mathbb{R})$. De plus, cette représentation est irréductible, c'est-à-dire que tout opérateur sur $\mathcal{H}$ peut s'écrire comme une fonction de X et de P . Tout opérateur commutant avec X (resp. P) est une fonction de X (resp. P). Tout opérateur commutant avec X et P est multiple de l'identité I . ■

Ce théorème implique que nous n'avons pas à nous préoccuper du choix de la représentation de (8.39), puisque deux choix différents seront reliés par une transformation unitaire.

À trois dimensions, les opérateurs position $\vec{R}$ et impulsion $\vec{P}$ sont des opérateurs vectoriels de composantes X, Y, Z et P_x, P_y, P_z , que l'on note collectivement X_i et P_i , $i = x, y, z$. Les composantes différentes de $\vec{R}$ et $\vec{P}$ commutent, et seules les composantes identiques ont des relations de commutation non nulles

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} I \quad (8.45)$$

8.3.3 L'opération parité

L'opération parité consiste à renverser le signe des coordonnées : $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. On peut aussi la voir comme la combinaison d'une réflexion par rapport à un plan suivie d'une rotation de π autour d'un axe perpendiculaire à ce plan. Prenons par exemple le plan xOy et appelons M la réflexion par rapport à ce plan, $\mathcal{R}_z(\pi)$ la rotation autour de Oz

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \xrightarrow{M} \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{R}_z(\pi)} \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

Comme l'invariance par rotation est en général valable, on exprime de façon imagée l'invariance par parité en disant que *l'image dans un miroir d'une expérience de physique doit apparaître comme physiquement possible*.

13. Cette précision est importante : sinon les opérateurs A_C du § 7.2.2 permettraient de construire un contre-exemple au théorème !

L'opération parité agit différemment sur les vecteurs proprement dits, ou *vecteurs polaires* comme la position $\vec{r}$, l'impulsion $\vec{p}$ ou le champ électrique $\vec{E}$

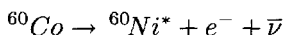
$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \quad \vec{p} \rightarrow -\vec{p} \quad \vec{E} \rightarrow -\vec{E} \quad (8.47)$$

et sur les *pseudovecteurs*, ou *vecteurs axiaux*, comme le moment angulaire $\vec{J}$ ou le champ magnétique $\vec{B}$, qui sont associés à un sens de rotation, et non à une direction

$$\vec{J} \rightarrow \vec{J} \quad \vec{B} \rightarrow \vec{B} \quad (8.48)$$

Rappelons que le produit vectoriel de deux vecteurs polaires est un vecteur axial¹⁴ : $\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p}$ est un vecteur axial.

Les interactions faibles (cf. § 1.1.4) ne respectent pas l'invariance par parité : ceci a été montré pour la première fois par C.S. Wu, en utilisant la désintégration β (1.4) de noyaux de cobalt⁶⁰ polarisés en un état excité du ^{60}Ni



La valeur moyenne du moment angulaire $\langle \vec{J} \rangle$ du ^{60}Co a une orientation fixe (figure 8.6). On constate que les électrons de la désintégration sont émis de façon préférentielle dans la direction opposée à celle du moment angulaire : si $\vec{P}$ est l'impulsion des électrons, $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle < 0$. Mais $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle$, valeur moyenne du produit scalaire d'un vecteur polaire et d'un vecteur axial, est un pseudoscalaire, qui change de signe dans une opération parité. L'image de l'expérience dans un miroir (figure 8.6) n'apparaît pas comme physiquement possible : dans le miroir, les sens de rotation sont inversés, et les électrons partent préférentiellement dans la direction de $\vec{J}$.

Le groupe $\mathcal{G}$ correspondant à l'opération parité est le groupe multiplicatif à deux éléments $\{+1, -1\}$, ou groupe Z_2 . Comme on ne peut pas relier continûment -1 à l'identité, il nous faut trouver un argument pour décider si l'opérateur Π qui représente l'opération parité dans l'espace des états est unitaire ou antiunitaire. Soit χ et φ deux vecteurs arbitraires et (χ, φ) leur produit scalaire (nous revenons provisoirement aux notations des mathématiciens). Si la parité est une symétrie

$$|(\Pi\chi, \Pi\varphi)| = |(\chi, \varphi)|$$

Comme dans l'opération parité les opérateurs position et impulsion doivent se transformer tous deux comme des vecteurs :

$$\vec{R} \rightarrow \Pi^{-1} \vec{R} \Pi = -\vec{R} \quad \vec{P} \rightarrow \Pi^{-1} \vec{P} \Pi = -\vec{P} \quad (8.49)$$

14. L'existence de vecteurs axiaux est une particularité de l'espace à trois dimensions, $d = 3$. Un vecteur axial est en fait un tenseur antisymétrique de rang 2, qui a $d(d-1)/2$ composantes en général. Pour $d = 3$, ce nombre de composantes est 3, ce qui permet de lui faire correspondre un (pseudo)vecteur. À 4 dimensions une telle identification n'est plus possible : un tenseur antisymétrique de rang 2 comme le champ électromagnétique a 6 composantes.

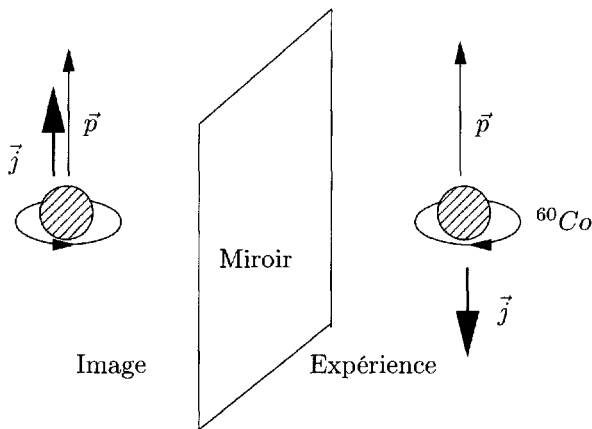


FIG. 8.6 – L'expérience de désintégration du cobalt polarisé.

leur commutateur est inchangé

$$\Pi[X_i, P_j]\Pi^{-1} = i\hbar\delta_{ij}I$$

Examinons l'élément de matrice

$$\begin{aligned} (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\varphi) &= (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\Pi^{-1}\Pi\varphi) \\ &= (\Pi\chi, i\hbar\delta_{ij}\Pi\varphi) = i\hbar\delta_{ij}(\Pi\chi, \Pi\varphi) \end{aligned} \quad (8.50)$$

Mais on a également

$$\begin{aligned} (\Pi\chi, \Pi[X_i, P_j]\varphi) &= (\Pi\chi, \Pi i\hbar\delta_{ij}\varphi) \\ &= i\hbar\delta_{ij}(\Pi\chi, \Pi\varphi) \end{aligned} \quad (8.51)$$

si l'on suppose que Π est unitaire. En effet, pour un opérateur unitaire

$$(U\chi, U i\varphi) = (\chi, i\varphi) = i(\chi, \varphi)$$

tandis que pour un opérateur antiunitaire

$$(U\chi, U i\varphi) = (i\varphi, \chi) = -i(\varphi, \chi)$$

Les équations (8.50) et (8.51) sont compatibles uniquement si Π est unitaire. En revanche, si au lieu de la parité Π on considère le renversement du sens du temps $\Theta : \vec{R} \rightarrow \vec{R}$ et $\vec{P} \rightarrow -\vec{P}$ (cf. annexe A.2), alors

$$\Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1} = -[X_i, P_j] = -i\hbar\delta_{ij}$$

et ce changement de signe entraîne que Θ est antiunitaire.

Si la parité est une symétrie, ce qui dans l'état actuel de nos connaissances est le cas pour les interactions fortes et les interactions électromagnétiques, alors Π doit commuter avec le hamiltonien : $[\Pi, H] = 0$. Comme $\Pi^2 = I$, puisque deux opérations parité successives ramènent le système d'axes à sa position initiale, les valeurs propres de Π sont ± 1 . Comme Π et H commutent, on peut trouver un système de vecteurs propres communs $|\varphi_{\pm}\rangle$ à H et à Π

$$H|\varphi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\varphi_{\pm}\rangle \quad \Pi|\varphi_{\pm}\rangle = \pm|\varphi_{\pm}\rangle \quad (8.52)$$

Les états $|\varphi_{+}\rangle$ sont dits de *parité paire* et les états $|\varphi_{-}\rangle$ de *parité impaire*.

8.4 Invariance galiléenne

8.4.1 Hamiltonien en dimension $d = 1$

Nous allons maintenant examiner les conséquences de la dernière invariance que nous n'avons pas encore exploitée, l'invariance par changement de référentiel d'inertie. Nous nous limitons d'abord à une dimension, une particule sur l'axe des x . Les équations de la physique non relativiste doivent garder la même forme dans la transformation de Galilée

$$x' = x - vt \quad (8.53)$$

qui fait passer d'un référentiel d'inertie à un autre référentiel d'inertie se déplaçant à la vitesse v par rapport au premier. La loi de transformation (8.53) correspond au point de vue passif du changement d'axes. Afin de garder la cohérence avec les sections précédentes, nous allons choisir le point de vue actif, qui consiste à modifier la vitesse de toutes les particules de v ; en bon français¹⁵, on « booste » toutes les particules de v . Si la position, la vitesse, l'impulsion p et l'énergie cinétique K initiales d'une particule classique de masse m sont

$$x, \quad \dot{x}, \quad p = m\dot{x}, \quad K = \frac{1}{2} m\dot{x}^2$$

ces mêmes variables deviendront après le « boost » v

$$x' = x + vt, \quad \dot{x}' = \dot{x} + v, \quad p' = m\dot{x}', \quad K' = \frac{1}{2} m(\dot{x}')^2 \quad (8.54)$$

Contrairement au cas des translations et des rotations, l'énergie n'est pas invariante dans une transformation de Galilée. On doit seulement exiger que la forme des équations de la physique reste invariante.

Venons-en maintenant au cas quantique, en nous plaçant au temps $t = 0$, ce qui correspond à une transformation de Galilée instantanée. La loi de

15. Il n'existe pas de bonne traduction de ce terme dont l'origine est le « booster » d'une fusée.

transformation des vecteurs d'état dans une transformation de Galilée sera une transformation unitaire $U(v)$

$$U(v) = \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) \quad (8.55)$$

où $G = G^\dagger$ est le générateur infinitésimal des transformations de Galilée. Les transformations de Galilée à une dimension forment un groupe additif, puisque la composition de deux transformations de vitesses v et v' est une transformation de vitesse $v'' = v + v'$. Une fois de plus, le théorème de Stone nous garantit l'existence d'un générateur infinitésimal hermitique G . Si $\langle A \rangle$ est la valeur moyenne d'une grandeur physique dans l'état $|\varphi\rangle$, sa valeur moyenne $\langle A \rangle_v$ dans l'état transformé $|\varphi_v\rangle = U(v)|\varphi\rangle$ sera

$$\langle \varphi_v | A | \varphi_v \rangle = \langle A \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) A U(v) | \varphi \rangle \quad (8.56)$$

Nous nous attendons d'après (8.54) (pour $t = 0$) à ce que les valeurs moyennes des opérateurs position X , impulsion P et vitesse $\dot{X}$ se transforment selon

$$\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) X U(v) | \varphi \rangle = \langle X \rangle \quad (8.57)$$

$$\langle \dot{X} \rangle \rightarrow \langle \dot{X} \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) \dot{X} U(v) | \varphi \rangle = \langle \dot{X} \rangle + v \quad (8.58)$$

$$\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle_v = \langle \varphi | U^{-1}(v) P U(v) | \varphi \rangle = \langle P \rangle + mv \quad (8.59)$$

L'hypothèse forte¹⁶, même si elle semble naturelle, est en fait (8.58), car $\dot{X}$ est défini comme $(i/\hbar)[H, X]$, et (8.58) conduit à restreindre les hamiltoniens possibles. Comme (8.59) est valable quel que soit $|\varphi\rangle$, on déduit

$$\exp\left(i \frac{vG}{\hbar}\right) P \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) = P + mvI \quad (8.60)$$

et en faisant tendre v vers zéro

$$[G, P] = -i\hbar mI$$

Il est donc possible de choisir $G = -mX$. D'après le théorème de von Neumann, tout autre choix serait unitairement équivalent.

Considérons maintenant l'opérateur $\dot{X}$ décrivant la vitesse, qui, suivant (8.18) pour $A = X$, est défini par

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] \quad (8.61)$$

D'après (8.58)

$$\exp\left(i \frac{vG}{\hbar}\right) \dot{X} \exp\left(-i \frac{vG}{\hbar}\right) = \dot{X} + vI \quad (8.62)$$

16. Voir H. Brown et P. Holland, *Am. Journ. Phys.* **67**, 204 (1999) pour une évaluation critique de cette hypothèse.

et en retranchant (8.60) (divisé par m) de (8.62)

$$\exp\left(i\frac{vG}{\hbar}\right)\left[\dot{X} - \frac{1}{m}P\right]\exp\left(-i\frac{vG}{\hbar}\right) = \dot{X} - \frac{1}{m}P \quad (8.63)$$

ce qui implique que l'opérateur $[\dot{X} - P/m]$ commute avec G , et donc avec X . Toujours d'après le théorème de von Neumann, $[\dot{X} - P/m]$ doit être une fonction de X

$$\dot{X} - P/m = \frac{1}{m}f(X) \quad (8.64)$$

Dans le cas à une dimension, et en général seulement dans ce cas, on peut éliminer la fonction f par une transformation unitaire. En effet, soit $F(x)$ une primitive de $f(x)$, $F'(x) = f(x)$; considérons la transformation unitaire, qui est en fait une transformation de jauge locale (§ 11.4.1)

$$S = \exp\left(\frac{i}{\hbar}F(X)\right) \quad (8.65)$$

Dans la transformation unitaire $X' = S^{-1}XS$, X reste évidemment inchangé : $X' = X$. Calculons P' . En utilisant (8.41)

$$[P, S] = -i\hbar\frac{\partial S}{\partial X} = (-i\hbar)\left(\frac{i}{\hbar}\right)f(X)S = f(X)S$$

d'où l'on déduit

$$S^{-1}PS - P = S^{-1}(PS - SP) = S^{-1}[P, S] = S^{-1}f(X)S = f(X)$$

d'où $P' = S^{-1}PS = P + f(X)$ et d'après (8.64)

$$\dot{X} = \frac{1}{m}P'$$

On peut donc toujours choisir comme opérateur impulsion $P = m\dot{X}$: ce choix est unitairement équivalent à tous les autres. Nous allons utiliser ces résultats pour déterminer la forme la plus générale du hamiltonien compatible avec les lois de transformation galiléennes. Définissons l'opérateur K , qui sera bien sûr la version quantique de l'énergie cinétique, par

$$K = \frac{1}{2}m\dot{X}^2 = \frac{P^2}{2m} \quad (8.66)$$

et calculons son commutateur avec X

$$[K, X] = \frac{1}{2m}[P^2, X] = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial P^2}{\partial P} = -i\hbar\frac{P}{m} \quad (8.67)$$

En effet (8.41) implique, en échangeant les rôles de P et de X

$$[X, f(P)] = i\hbar\frac{\partial f(P)}{\partial P}$$

Mais

$$\frac{1}{m} P = \dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X]$$

et en retranchant cette équation de (8.67) on obtient

$$[H - K, X] = 0$$

L'opérateur $(H - K)$ est une fonction de X uniquement, que nous désignerons par $V(X)$, ce qui donne pour la forme la plus générale du hamiltonien compatible avec l'invariance galiléenne

$$H = K + V(X) = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (8.68)$$

On justifie ainsi ce que l'on aurait obtenu par le principe de correspondance à partir de l'analogie classique de l'énergie, somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle

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

L'invariance galiléenne est assurée par le fait que le hamiltonien garde la même *forme* après transformation. Si le hamiltonien initial est une fonction de X et P , le hamiltonien transformé est la même fonction de $X_v = X$ et $P_v = P + mv$.

- État initial :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

- État transformé :

$$H_v = \frac{P_v^2}{2m} + V(X_v) = H + Pv + \frac{1}{2}mv^2 + V(X) \quad (8.69)$$

8.4.2 Hamiltonien en dimension $d = 3$

En répétant l'argument de la sous-section précédente dans le cas de trois dimensions d'espace, on arrive sans difficulté à la généralisation de (8.64)

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{P} - \frac{1}{m} \vec{f}(\vec{R}) \quad (8.70)$$

mais on ne peut pas en général éliminer $f(\vec{R})$. En effet il faudrait trouver une transformation unitaire

$$S = \exp\left(\frac{i}{\hbar} F(\vec{R})\right)$$

telle que

$$\vec{f}(\vec{R}) = \vec{\nabla} F(\vec{R})$$

ce qui n'est possible que si $\vec{\nabla} \times \vec{f} = 0$ ¹⁷. L'équation (8.70) implique la relation de commutation

$$[\dot{X}_i, X_j] = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{ij} \quad (8.71)$$

L'énergie cinétique K est définie par

$$K = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2m} (\vec{P} - \vec{f}(\vec{R}))^2 \quad (8.72)$$

On calcule aisément le commutateur de K et de X_i . En effet

$$[K, X_i] = \frac{1}{2} m \sum_j [\dot{X}_j^2, X_i] = \frac{1}{2} m \sum_j (\dot{X}_j [\dot{X}_j, X_i] + [\dot{X}_j, X_i] \dot{X}_j) = -i\hbar \dot{X}_i$$

En comparant les commutateurs

$$[K, X_i] = -i\hbar \dot{X}_i \quad \text{et} \quad [H, X_i] = -i\hbar \dot{X}_i$$

on déduit

$$[H - K, X_i] = 0$$

$(H - K)$ est donc une fonction de $\vec{R}$ uniquement : $H = K + V(\vec{R})$. Le hamiltonien le plus général compatible avec l'invariance galiléenne est donc de la forme

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{P} - \vec{f}(\vec{R}))^2 + V(\vec{R}) \quad (8.73)$$

Il est important de souligner la différence entre $\vec{P}/m$ et $d\vec{R}/dt$: c'est cette dernière quantité qui donne l'énergie cinétique K

$$K = \frac{1}{2m} \left(\frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 \neq \frac{\vec{P}^2}{2m}$$

On peut maintenant faire le lien avec la physique classique. En mécanique classique, le hamiltonien d'une particule de charge q dans un champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r})$ et dans un champ électrique $\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})$ qui peuvent dépendre du temps, est¹⁸

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi(\vec{r}) \quad (8.74)$$

On obtient donc (8.73) en utilisant le principe de correspondance et en identifiant $q\vec{A} = \vec{f}$ et $q\varphi = V$. La signification de ce hamiltonien sera examinée de façon plus approfondie au § 11.4.1, quand nous discuterons l'invariance de jauge locale : la transformation (8.65) et sa généralisation à trois dimensions sont des transformations de jauge locales. Si $\vec{f}(\vec{R})$ peut être éliminé par une telle transformation, cela implique que $\vec{B} = 0$.

17. Cette condition est nécessaire mais non suffisante dans un domaine non connexe.

18. cf. Jackson[2001], chapitre 12.

8.5 Exercices

8.5.1 Rotations

1. Soit $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ la matrice 3×3 représentant une rotation d'angle θ autour de $\hat{n}$. Montrer que $\text{Tr } \mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta) = 1 + 2 \cos \theta$. Suggestion : utiliser (8.29).

2. Écrire explicitement la matrice $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ à partir de (8.23) en fonction des composantes de $\hat{n}$

$$\hat{n} = (\alpha, \beta, \gamma) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$$

3. Vérifier explicitement la relation de commutation $[T_x, T_y] = i T_z$ en utilisant les formes matricielles (8.26).

4. Vérifier que

$$(\vec{T} \cdot \hat{n})^3 = \vec{T} \cdot \hat{n}$$

et en déduire

$$e^{-i\theta(\vec{T} \cdot \hat{n})} = I - i \sin \theta (\vec{T} \cdot \hat{n}) - (1 - \cos \theta) (\vec{T} \cdot \hat{n})^2$$

Comparer avec (8.23).

8.5.2 Rotations et $SU(2)$

Le groupe $SU(2)$ est le groupe des matrices 2×2 unitaires et de déterminant un.

1. Montrer que si $U \in SU(2)$, alors U est de la forme

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

2. Montrer qu'au voisinage de l'identité on peut écrire

$$U = I - i\tau \quad \text{avec} \quad \tau = \tau^\dagger$$

et que τ s'exprime en fonction des matrices de Pauli

$$\tau = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \theta_i \sigma_i \quad \theta_i \rightarrow 0$$

3. On pose $\theta = (\sum_i \theta_i^2)^{1/2}$ et $\theta_i = \theta \hat{n}_i$, où $\hat{n}$ est un vecteur unitaire. Supposant maintenant les θ_i finis, on définit $U_{\hat{n}}(\theta)$ par

$$U_{\hat{n}}(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[U_{\hat{n}} \left(\frac{\theta}{N} \right) \right]^N$$

Montrer que

$$U_{\hat{n}}(\theta) = e^{-i\theta \vec{\sigma} \cdot \hat{n}/2}$$

Inversement toute matrice de $SU(2)$ est de cette forme (exercice 3.3.6).

4. Soit $\vec{V}$ un vecteur de $\mathbb{R}^3$ et $\mathcal{V}$ la matrice hermitienne de trace nulle

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} V_z & V_x - iV_y \\ V_x + iV_y & -V_z \end{pmatrix} = \vec{\sigma} \cdot \vec{V}$$

Quel est le déterminant de $\mathcal{V}$? Soit $\mathcal{W}$ la matrice

$$\mathcal{W} = U\mathcal{V}U^{-1}$$

Montrer que $\mathcal{W}$ est de la forme $\vec{\sigma} \cdot \vec{W}$ et que $\vec{W}$ se déduit de $\vec{V}$ par une rotation. A-t-on entièrement prouvé cette propriété à ce stade ?

5. On définit $\vec{V}(\theta)$ par

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta) = U_{\hat{n}}(\theta) [\vec{\sigma} \cdot \vec{V}] U_{\hat{n}}^{-1}(\theta) \quad \vec{V}(\theta = 0) = \vec{V}$$

Montrer que

$$\frac{d\vec{V}(\theta)}{d\theta} = \hat{n} \times \vec{V}(\theta)$$

En déduire que $\vec{V}(\theta)$ s'obtient à partir de $\vec{V}$ par une rotation d'angle θ autour de $\hat{n}$. Ce résultat établit une correspondance entre les matrices $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ de $SO(3)$ et les matrices $U_{\hat{n}}(\theta)$ de $SU(2)$. Cette correspondance est-elle biunivoque ?

8.5.3 Relations de commutation entre l'impulsion et le moment angulaire

Cet exercice donne une autre démonstration des relations de commutation (8.34) entre l'impulsion et le moment angulaire, si l'on choisit l'opérateur vectoriel $\vec{V} = \vec{P}$. Soit $\mathcal{T}_y(a)$ une translation de a parallèle à Oy

$$\mathcal{T}_y(a)\vec{r} = \vec{r} + a\hat{y}$$

Si $\mathcal{R}_x(\theta)$ est une rotation d'angle θ autour de Oy , montrer que

$$\mathcal{R}_x(\theta) \mathcal{T}_y(a) \mathcal{R}_x(-\theta)$$

est une translation le long d'un axe que l'on déterminera. En déduire la relation de commutation

$$[J_x, P_y] = i\hbar P_z$$

8.5.4 Algèbre de Lie d'un groupe continu

On considère un groupe $\mathcal{G}$ dont les éléments g sont paramétrés par N coordonnées θ_a , $a = 1, \dots, N$, $g(\theta_a = 0)$ étant l'élément neutre du groupe. Les variables θ_a sont notées collectivement $\theta : \theta = \{\theta_a\}$. La loi de composition est donnée par une fonction f indéfiniment différentiable

$$g(\bar{\theta})g(\theta) = g(f(\bar{\theta}, \theta))$$

À nouveau f est une notation collective pour l'ensemble de N fonctions $f : f(\bar{\theta}, \theta) = \{f_a(\bar{\theta}_b, \theta_c)\}$. Soit un ensemble de matrices unitaires $U(\theta_a)$ dont la loi de multiplication est

$$U(\bar{\theta})U(\theta) = U(f(\bar{\theta}, \theta))$$

Les matrices $U(\theta)$ forment donc une représentation du groupe $\mathcal{G}$: voir (8.12).

1. Montrer que $f_a(\bar{\theta}, \theta = 0) = \bar{\theta}_a$ et que $f_a(\bar{\theta} = 0, \theta) = \theta_a$. Montrer que pour $\bar{\theta}, \theta \rightarrow 0$ $f_a(\bar{\theta}, \theta)$ est de la forme

$$f_a(\bar{\theta}, \theta) = \theta_a + \bar{\theta}_a + f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c + O(\theta^3, \theta^2\bar{\theta}, \theta\bar{\theta}^2, \bar{\theta}^3)$$

où nous avons utilisé la convention de sommation sur les indices répétés

$$f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c = \sum_{b,c} f_{abc}\bar{\theta}_b\theta_c$$

2. Dans le voisinage de $U(\theta) = I$ on écrit un développement de $U(\theta)$ pour $\theta \rightarrow 0$

$$U(\theta) = I - i\theta_a T_a - \frac{1}{2}\theta_b\theta_c T_{bc} + O(\theta)^3$$

3. Effectuer le produit $U(\bar{\theta})U(\theta)$ à l'ordre $(\bar{\theta}^2, \theta^2)$ et montrer que l'égalité

$$U(\bar{\theta})U(\theta) = U(f(\bar{\theta}, \theta))$$

pour les termes en $\bar{\theta}_a\theta_b$ implique que

$$T_{bc} = T_c T_b - i f_{abc} T_c$$

Utilisant la symétrie de T_{bc} , en déduire

$$[T_b, T_c] = i C_{abc} T_c$$

avec $C_{abc} = -C_{acb}$. Exprimer C_{abc} en fonction de f_{abc} . Les relations de commutation précédentes constituent l'algèbre de Lie du groupe défini par la loi de composition $f(\bar{\theta}, \theta)$.

8.5.5 Règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn

Soit une particule de masse m dans un potentiel $V(\vec{r})$. Le hamiltonien est

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Soit $|\varphi_n\rangle$ un ensemble complet de vecteurs propres de H

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$$

et $|\varphi_0\rangle$ un état lié, donc normalisable, d'énergie E_0 . On pose

$$\langle\varphi_n|X|\varphi_0\rangle = X_{n0}$$

1. Démontrer la relation de commutation

$$[[H, X], X] = -\frac{\hbar^2}{m}$$

2. En déduire

$$\sum_n \frac{2m|X_{n0}|^2}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1$$

8.5.6 Centre de masse et masse réduite

Soit deux particules de masses m_1 et m_2 se déplaçant sur une droite. On note X_1 et X_2 leurs opérateurs position, P_1 et P_2 leurs opérateurs impulsion. Les opérateurs impulsion et position de deux particules différentes commutent. On définit les opérateurs X et P

$$X = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2} \quad P = P_1 + P_2$$

et $\tilde{X}$ et $\tilde{P}$

$$\tilde{X} = X_1 - X_2 \quad \tilde{P} = \frac{m_2 P_1 - m_1 P_2}{m_1 + m_2}$$

1. Calculer les commutateurs $[X, P]$ et $[\tilde{X}, \tilde{P}]$ et montrer que

$$[X, \tilde{P}] = [\tilde{X}, P] = 0$$

2. Écrire le hamiltonien

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(X_1 - X_2)$$

en fonction des opérateurs $X, P, \tilde{X}, \tilde{P}$. En conclure que, comme en mécanique classique, on peut séparer le mouvement du centre de masse et de la particule

relative de masse réduite $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Généraliser à trois dimensions.

3. L'exemple suivant d'état intriqué a été utilisé dans l'article original d'Einstein, Podolsky et Rosen (§ 6.2.1). La fonction d'onde de deux particules est écrite

$$\psi(x_1, x_2; p_1, p_2) = \delta(x_1 - x_2 - L) \delta(p_1 + p_2)$$

où L est une longueur constante. Pourquoi est-il possible d'écrire une telle fonction d'onde ? Quelle est son interprétation physique ? La mesure de x_1 détermine x_2 , celle de p_1 détermine p_2 . Développer l'analogie avec l'exemple du § 6.2.1.

8.5.7 Transformation de Galilée

1. Soit $W(a, v)$ le produit d'une transformation de Galilée et d'une translation à une dimension

$$W(a, v) = \exp\left(-i \frac{Pa}{\hbar}\right) \exp\left(i \frac{mvX}{\hbar}\right)$$

Montrer que

$$W(a_1, v_1)W(a_2, v_2) = \exp\left(-i \frac{mv_1 a_2}{\hbar}\right) W(a_1 + a_2, v_1 + v_2)$$

2. Calculer

$$W(a, v)W(-a, -v)$$

et en déduire que l'on doit utiliser des représentations projectives pour le groupe de Galilée.

8.6 Bibliographie

On trouvera des compléments utiles sur les symétries en physique quantique dans Jauch [1968], chapitres 9 et 10 et dans Merzbacher [1970], chapitre 16. Le chapitre 2 de Weinberg [1995] contient également un excellent résumé de toutes les notions de base. Les relations de commutation canoniques et l'invariance galiléenne sont exposées dans Jauch [1968], chapitres 12 et 13. Il existe de nombreux livres consacrés à l'utilisation de la théorie des groupes en mécanique quantique, parmi lesquels on peut citer M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, Mc Graw Hill, New-York (1964).

Chapitre 9

Mécanique ondulatoire

DANS CE CHAPITRE, nous allons étudier une réalisation particulière de la mécanique quantique d'une grande importance pratique : il s'agit de la *mécanique ondulatoire*, qui est adaptée à la description du mouvement d'une¹ particule quantique dans l'espace à trois dimensions $\mathbb{R}^3$. C'est cette réalisation qui sert d'introduction aux fondements de la mécanique quantique dans la plupart des manuels. Elle consiste à prendre comme base de $\mathcal{H}$ les « vecteurs propres² » $|\vec{r}\rangle$ de l'opérateur position $\vec{R}$: en d'autres termes, on choisit une base où l'opérateur position est diagonal. En mécanique ondulatoire, un vecteur d'état peut être identifié à un élément $\varphi(\vec{r})$ de l'espace de Hilbert $L^2_{\vec{r}}(\mathbb{R}^3)$ des fonctions de carré sommable sur l'espace à trois dimensions $\mathbb{R}^3$. Ce vecteur d'état est appelé *fonction d'onde*, et nous verrons que cette fonction d'onde s'identifie à l'amplitude de probabilité $\langle \vec{r} | \varphi \rangle$ de trouver la particule dans l'état $|\varphi\rangle$ localisée à la position $\vec{r}$. Cette fonction d'onde est normalisée par la condition de sommabilité (7.10)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (9.1)$$

Étant donné le rôle symétrique joué par les opérateurs position et impulsion, on pourrait aussi bien utiliser les vecteurs propres de $\vec{P}$ et les « fonctions d'onde de l'espace des impulsions » $\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \varphi \rangle$, dont nous verrons que ce sont les transformées de Fourier des $\varphi(\vec{r})$. Après avoir examiné les principales propriétés des fonctions d'onde, nous étudierons plusieurs applications : états liés, diffusion, effet tunnel, potentiel périodique. Ces applications seront d'abord traitées dans le cas plus simple à une dimension. La généralisation à trois dimensions nous permettra de discuter la notion importante de densité d'états et son utilisation dans la « règle d'or de Fermi ».

1. Ou de plusieurs particules : voir la généralisation au § 9.9.3 et au chapitre 13.

2. Ainsi que nous l'avons vu au § 7.3.1, ces objets ne sont pas des vecteurs de l'espace de Hilbert, ce que nous avons souligné par des guillemets. Cependant, comme nous allons faire par la suite un usage intensif de ces « vecteurs », nous supprimerons ces guillemets afin d'alléger l'écriture.

9.1 Diagonalisation de X et de P ; fonctions d'onde

9.1.1 Diagonalisation de X

Nous nous proposons d'étudier le mouvement d'une particule quantique en nous restreignant pour le moment au mouvement sur la droite réelle $\mathbb{R}$: la particule se déplace sur cette droite entre $-\infty$ et $+\infty$. Les grandeurs physiques pertinentes sont *a priori* la position et l'impulsion de cette particule, représentées mathématiquement par des opérateurs X et P dont nous avons établi les propriétés dans la section 8.3. Nous allons d'abord examiner les vecteurs propres de X en partant de la relation de commutation canonique entre X et P sous la forme (8.40)

$$\exp\left(i\frac{Pa}{\hbar}\right) X \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right) = X + aI \quad (9.2)$$

Montrons d'abord que le spectre de X est continu : soit $|x\rangle$ un vecteur propre de X

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad (9.3)$$

et examinons l'action de X sur le vecteur $\exp(-iPa/\hbar)|x\rangle$

$$\begin{aligned} X\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle\right] &= \exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)(X + aI)|x\rangle \\ &= (x + a)\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle\right] \end{aligned} \quad (9.4)$$

Nous avons utilisé la relation de commutation (9.2) et la définition (9.3) du vecteur propre $|x\rangle$. Le vecteur $\exp(-iPa/\hbar)|x\rangle$ est vecteur propre de X avec la valeur propre $(x + a)$, et comme a est arbitraire, cela montre que toutes les valeurs réelles de x entre $-\infty$ et $+\infty$ sont valeurs propres de X . On prouve ainsi que le spectre de x est continu, et que par conséquent la normalisation doit s'écrire suivant (7.34) avec des fonctions delta de Dirac

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x') \quad (9.5)$$

Compte tenu de la discussion du § 8.3.1, le résultat (9.4) qui peut s'écrire

$$\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|x\rangle = |x + a\rangle$$

ne doit pas surprendre, car $\exp(-iPa/\hbar)$ est l'opérateur de translation de a qui transforme l'état localisé en x , $|x\rangle$, en l'état $|x + a\rangle$ localisé en $(x + a)$. Le vecteur $|x + a\rangle$ vérifie une condition de normalisation analogue à (9.5) étant donné que l'opérateur $\exp(-iPa/\hbar)$ est unitaire. On peut, si on le souhaite, fixer la phase des vecteurs de base $|x\rangle$ par la condition

$$|x\rangle = \exp\left(-i\frac{Px}{\hbar}\right)|x = 0\rangle \quad (9.6)$$

Revenons sur l'interprétation physique : que représente exactement le vecteur $|x\rangle$? D'après les postulats du chapitre 4, $|x\rangle$ représente un état où la position de la particule est connue avec une précision absolue : la particule est localisée *exactement* au point x sur la droite réelle. Mais en mécanique quantique un tel état est impossible à réaliser physiquement : comme nous allons bientôt le voir, un tel état a toutes les impulsions possibles avec la même probabilité entre $p = -\infty$ et $p = +\infty$. À la propriété mathématique : « $|x\rangle$ n'est pas un élément de l'espace de Hilbert » correspond la propriété physique : « $|x\rangle$ n'est pas un état physiquement réalisable ». Les états physiquement réalisables sont toujours représentés par des « vrais » vecteurs de $\mathcal{H}$, c'est-à-dire des vecteurs normalisables.

Nous avons admis implicitement que les valeurs propres x de X étaient non dégénérées. Bien sûr ce n'est pas nécessairement le cas : par exemple la particule pourrait avoir un spin $1/2$, auquel cas il faudrait préciser si la particule se trouve dans un état de spin up $|+\rangle$ ou de spin down $|-\rangle$: chaque valeur propre de X serait alors doublement dégénérée. Dans ces conditions, l'espace de Hilbert des états serait le produit tensoriel $L_x^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{H}_2$ de l'espace des états de position $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ et de l'espace à deux dimensions des états de spin $\mathcal{H}_2$: une base de cet espace serait par exemple formée des états $|x \otimes +\rangle$ et $|x \otimes -\rangle$ avec

$$(X \otimes S_z)|x \otimes \pm\rangle = \pm x|x \otimes \pm\rangle$$

Bien que l'utilisation de vecteurs propres qui ne soient pas des véritables éléments de $\mathcal{H}$ soit mathématiquement contestable, elle est extrêmement commode et nous nous servirons par la suite de ces vecteurs sans précautions particulières. Nous généraliserons aussi la notion d'élément de matrice : comme l'opérateur X est diagonal dans la base $|x\rangle$, nous pourrions écrire les « éléments de matrice » de X

$$\langle x'|X|x\rangle = x\langle x'|x\rangle = x\delta(x-x') \quad (9.7)$$

et plus généralement ceux d'une fonction $F(X)$

$$\langle x'|F(X)|x\rangle = F(x)\langle x'|x\rangle = F(x)\delta(x-x') \quad (9.8)$$

La relation de fermeture (7.37) s'écrit

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x| = I \quad (9.9)$$

Le projecteur $\mathcal{P}[a, b]$ sur le sous-espace des valeurs propres de X dans l'intervalle $[a, b]$ s'obtient en restreignant l'intégration sur x à cet intervalle

$$\mathcal{P}[a, b] = \int_a^b |x\rangle dx \langle x| \quad (9.10)$$

Cette expression généralise celle que l'on écrirait dans un espace de dimension finie : si Δ est le sous-espace d'un ensemble de valeurs propres d'un opérateur hermitique A , le projecteur $\mathcal{P}(\Delta)$ sur ce sous-espace est

$$\mathcal{P}(\Delta) = \sum_{n \in \Delta} |n\rangle\langle n|$$

9.1.2 Réalisation dans $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$

Nous allons maintenant faire le lien entre le formalisme de Dirac que nous venons d'expliciter dans la base où X est diagonal et la réalisation donnée au § 8.3.2 des opérateurs X et P comme opérateurs agissant dans l'espace $L^{(2)}(\mathbb{R})$ des fonctions de carré sommable sur $\mathbb{R}$. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur unitaire de $\mathcal{H}$ représentant un état physique. En utilisant la relation de fermeture (9.9), nous pouvons décomposer $|\varphi\rangle$ dans la base $|x\rangle$

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x|\varphi\rangle \quad (9.11)$$

où $\langle x|\varphi\rangle$ est donc une composante de $|\varphi\rangle$ dans la base $|x\rangle$, ou en termes physiques, l'amplitude de probabilité de trouver la particule localisée au point x . Examinons les éléments de matrice des opérateurs X et $\exp(-iPa/\hbar)$

$$\langle x|[X|\varphi]\rangle = \langle Xx|\varphi\rangle = x \langle x|\varphi\rangle = x \varphi(x) \quad (9.12)$$

$$\langle x|\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)|\varphi\right]\rangle = \langle x-a|\varphi\rangle = \varphi(x-a) \quad (9.13)$$

Ces équations montrent que $\langle x|\varphi\rangle$ peut être identifié à une fonction $\varphi(x)$ de $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ telle que l'action des opérateurs X et P soit donnée par (8.44). En effet l'équation (9.12) est

$$\boxed{[X\varphi](x) = x\varphi(x)} \quad (9.14)$$

tandis que (9.13) s'écrit

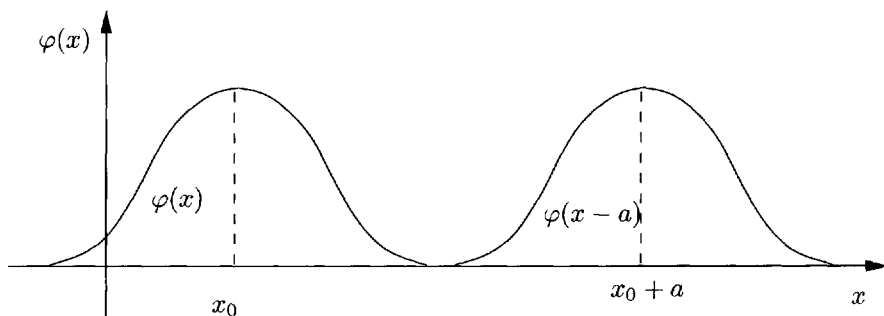
$$\left[\exp\left(-i\frac{Pa}{\hbar}\right)\varphi\right](x) = \varphi(x-a) \quad (9.15)$$

et en développant au premier ordre en a

$$\boxed{[P\varphi](x) = -i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial x}} \quad (9.16)$$

Nous retrouvons l'action des opérateurs X et P telle qu'elle avait été définie au § 8.3.2. Vérifions que le produit scalaire est correctement donné par (7.11) en utilisant la relation de fermeture (9.9)

$$\langle \chi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \chi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi^*(x)\varphi(x) \quad (9.17)$$

FIG. 9.1 – Translation de a d'une particule localisée en x_0 .

La fonction $\varphi(x-a)$ dans (9.15) est bien la fonction $\varphi(x)$ translatée de $+a$, et non de $-a$! Si par exemple $\varphi(x)$ a un maximum à $x = x_0$, $\varphi(x-a)$ a un maximum à $x-a = x_0$ c'est-à-dire à $x = x_0 + a$ (figure 9.1). Soulignons que le choix $\varphi_a(x) = \varphi(x-a)$ pour la fonction d'onde translatée n'est bien sûr pas unique. La fonction

$$\varphi'_a(x) = e^{i\theta(x)}\varphi(x-a)$$

est tout aussi valable que $\varphi_a(x)$. Le choix $\varphi(x-a)$ est lié à celui du générateur infinitésimal des translations, et le changement de phase $\varphi_a(x) \rightarrow \varphi'_a(x)$ serait obtenu en utilisant un générateur infinitésimal déduit de (9.16) par la transformation de jauge locale (8.65)

$$P' = e^{+i\theta(x)} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-i\theta(x)}$$

En résumé, l'état physique d'une particule se déplaçant sur l'axe des x est décrit par une fonction d'onde normalisée $\varphi(x)$ appartenant à $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1 \quad (9.18)$$

qui s'interprète physiquement comme l'amplitude de probabilité $\langle x|\varphi \rangle$ de trouver la particule localisée au point x . L'action des opérateurs position X et impulsion P sur $\varphi(x)$ est donnée par (9.14) et (9.16). Le module carré

$$|\varphi(x)|^2 = |\langle x|\varphi \rangle|^2$$

est appelé *probabilité de présence* de la particule au point x : en fait il s'agit d'une *densité de probabilité*, dans ce cas une probabilité par unité de longueur. La probabilité $p([a, b])$ de trouver la particule localisée dans l'intervalle $[a, b]$ est d'après (9.10)

$$p([a, b]) = \langle \varphi | \mathcal{P}[a, b] | \varphi \rangle = \int_a^b dx |\varphi(x)|^2 \quad (9.19)$$

Cette probabilité est normalisée à un par construction, puisque $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$, ce que l'on vérifie également sur (9.18). Si l'on considère un intervalle $[x, x + dx]$ infinitésimal, $|\varphi(x)|^2 dx$ est la probabilité de trouver la particule dans cet intervalle.

Lorsque la particule possède des degrés de liberté supplémentaires, par exemple un spin $1/2$, on pourra décrire son état quantique en utilisant les fonctions d'onde $\varphi_{\pm}(x)$

$$\varphi_+(x) = \langle x \otimes + | \varphi \rangle \quad \varphi_-(x) = \langle x \otimes - | \varphi \rangle$$

Nous venons de définir ce que l'on appelle habituellement « la mécanique ondulatoire en représentation x » : nous avons choisi de partir de la base $|x\rangle$ où l'opérateur position est diagonal. Étant donné le rôle symétrique de X et P , nous aurions aussi bien pu partir d'une base où P est diagonal, c'est-à-dire définir « la mécanique ondulatoire en représentation p ». La sous-section suivante est consacrée à cette représentation et à son lien avec la représentation x .

9.1.3 Réalisation dans $L_p^{(2)}(\mathbb{R})$

Soit $|p\rangle$ un vecteur propre de P

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad (9.20)$$

Nous allons d'abord déterminer les fonctions d'onde correspondantes

$$\chi_p(x) = \langle x | p \rangle \quad (9.21)$$

en représentation x

$$\begin{aligned} \langle x | [P | p \rangle] &= p \langle x | p \rangle = p \chi_p(x) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_p(x) \end{aligned}$$

Nous avons utilisé (9.16) pour obtenir la seconde ligne de l'équation précédente. Quel que soit p dans l'intervalle $[-\infty, +\infty]$, l'équation différentielle

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_p(x) = p \chi_p(x)$$

a pour solution

$$\chi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (9.22)$$

ce qui montre que le spectre de P est continu, tout comme celui de x . Le facteur de normalisation $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ dans (9.22) a été choisi de telle sorte que $\chi_p(x)$ soit normalisé par un delta de Dirac

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_{p'}^*(x) \chi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[i \frac{(p - p')x}{\hbar} \right] = \delta(p - p') \quad (9.23)$$

tandis que la relation de fermeture s'écrit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \chi_p(x) \chi_p^*(x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left[i \frac{p(x-x')}{\hbar} \right] = \delta(x-x') \quad (9.24)$$

On aurait également pu partir de la relation de fermeture sous la forme

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle dp \langle p| = I \quad (9.25)$$

pour écrire

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x'|p\rangle dp \langle p|x\rangle = \langle x'|I|x\rangle = \delta(x-x')$$

et démontrer ainsi (9.24).

Si $|\varphi\rangle$ est le vecteur d'état d'une particule, la « fonction d'onde en représentation p » sera $\tilde{\varphi}(p) = \langle p|\varphi\rangle$. Cette fonction d'onde en représentation p n'est autre que la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$ en représentation x . En effet, en utilisant la relation de fermeture (9.9) et la définition (9.22), nous obtenons

$$\tilde{\varphi}(p) = \langle p|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle dx \langle x|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \varphi(x) \quad (9.26)$$

et inversement

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx/\hbar} \tilde{\varphi}(p) \quad (9.27)$$

L'action des opérateurs X et P en représentation p s'obtient sans difficulté

$$[X\tilde{\varphi}](p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\varphi}(p) \quad (9.28)$$

$$[P\tilde{\varphi}](p) = p \tilde{\varphi}(p) \quad (9.29)$$

Une formule analogue à (9.19) est valable dans l'espace des impulsions : la probabilité $p([k, q])$ pour que la particule ait son impulsion dans l'intervalle $[k, q]$ est

$$p([k, q]) = \int_k^q dp |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.30)$$

$|\tilde{\varphi}(p)|^2$ est une densité de probabilité dans l'espace des impulsions.

9.1.4 Évolution du paquet d'ondes libre

Partons de la représentation de Fourier (9.27) de la fonction d'onde $\varphi(x)$ d'un état physique. La transformée de Fourier $\tilde{\varphi}(p)$ vérifie, tout comme $\varphi(x)$, la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |\tilde{\varphi}(p)|^2 = 1 \quad (9.31)$$

On appelle souvent un tel état physique un *paquet d'ondes*, car c'est d'après (9.27) une superposition d'ondes planes. La position moyenne $\langle X \rangle$ et l'impulsion moyenne $\langle P \rangle$ se calculent en introduisant deux fois les relations de fermeture (9.9) et (9.25)³

$$\begin{aligned}\langle X \rangle &= \langle \varphi | X | \varphi \rangle = \int dx dx' \langle \varphi | x \rangle \langle x | X | x' \rangle \langle x' | \varphi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\varphi(x)|^2\end{aligned}\quad (9.32)$$

$$\langle P \rangle = \langle \varphi | P | \varphi \rangle = \int dp dp' \langle \varphi | p \rangle \langle p | P | p' \rangle \langle p' | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp p |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.33)$$

Nous avons aussi utilisé (9.7) et une équation analogue dans l'espace des impulsions. Les dispersions ΔX et ΔP sont données par un calcul similaire

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi | (X - \langle X \rangle)^2 | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle X \rangle)^2 |\varphi(x)|^2 \quad (9.34)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi | (P - \langle P \rangle)^2 | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp (p - \langle P \rangle)^2 |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad (9.35)$$

D'après la démonstration générale du § 4.1.3. ces dispersions vérifient l'inégalité de Heisenberg

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar} \quad (9.36)$$

où nous avons utilisé la notation usuelle $\Delta x \Delta p$ au lieu de $\Delta X \Delta P$. Une démonstration directe de (9.36) est proposée à l'exercice 9.7.1.

Introduisons la dépendance du vecteur d'état par rapport au temps : le vecteur d'état est $|\varphi(0)\rangle \equiv |\varphi\rangle$ au temps $t = 0$ et $|\varphi(t)\rangle$ au temps t . La fonction d'onde $\varphi(x, t)$ au temps t est donc $\varphi(x, t) = \langle x | \varphi(t) \rangle$. Pour obtenir $|\varphi(t)\rangle$ en fonction de $|\varphi(0)\rangle$, nous avons besoin de l'équation d'évolution (4.11) et donc du hamiltonien H . Nous allons nous restreindre pour l'instant au cas où l'énergie potentielle est nulle, et où le hamiltonien se réduit à sa partie énergie cinétique K (8.66)

$$H = K = \frac{P^2}{2m} \quad (9.37)$$

Comme K et P commutent, les états propres de H peuvent être choisis parmi ceux de P

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad H|p\rangle = \frac{P^2}{2m}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle = E(p)|p\rangle \quad (9.38)$$

et par conséquent

$$\exp\left[-i\frac{Ht}{\hbar}\right]|p\rangle = \exp\left[-i\frac{E(p)t}{\hbar}\right]|p\rangle \quad (9.39)$$

3. Les notations explicites seraient $\langle X \rangle_\varphi$ et $\langle P \rangle_\varphi$; nous avons supprimé l'indice φ pour alléger l'écriture.

Il est donc naturel d'exprimer $\langle x|\varphi(t)\rangle$ en fonction des composantes de $|\varphi(t)\rangle$ dans la base $|p\rangle$

$$\begin{aligned}\langle x|\varphi(t)\rangle &= \langle x|\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)|\varphi(0)\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right)|\varphi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(i\frac{px}{\hbar} - i\frac{E(p)t}{\hbar}\right) \tilde{\varphi}(p)\end{aligned}\quad (9.40)$$

Afin d'éliminer les facteurs $\hbar$ on introduit le vecteur d'onde $k = p/\hbar$ et la fréquence $\omega(k)$

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \omega(k) = \frac{E(\hbar k)}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad A(k) = \sqrt{\hbar} \tilde{\varphi}(\hbar k)$$

pour écrire $\varphi(x, t)$ sous la forme

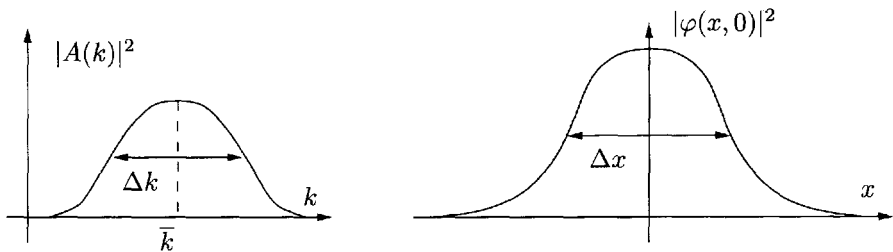


FIG. 9.2 – Dispersion du paquet d'ondes en k et en x .

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left(ikx - i\omega(k)t\right) \quad (9.41)$$

L'allure qualitative de $|A(k)|^2$ et celle de $|\varphi(x, 0)|^2$ sont représentées sur la figure 9.2. La fonction $|A(k)|^2$ est centrée à $k \simeq \bar{k}$ avec une largeur Δk . L'inégalité de Heisenberg (9.36) se traduit par

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (9.42)$$

Les cas limites sont :

- Particule de vecteur d'onde (ou d'impulsion) parfaitement défini = onde plane

$$A(k) = \delta(k - \bar{k}) \quad \varphi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\bar{k}x} \quad (9.43)$$

- Particule localisée en $x = x_0$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \quad \varphi(x, 0) = \delta(x - x_0) \quad (9.44)$$

Rappelons que ni l'onde plane (9.43) ni l'état parfaitement localisé (9.44) ne correspondent à des états physiquement réalisables. Dans le cas (9.44) de la particule localisée, $|A(k)|^2$, qui est la probabilité d'observer une impulsion $\hbar k$, est indépendant de k , ce qui fait que la distribution de probabilité ne peut pas être normalisée. De même dans le cas (9.43) de l'impulsion fixée, $|\varphi(x)|^2 = \text{cste}$ et la probabilité de présence est uniforme sur l'axe des x : à nouveau la distribution de probabilité ne peut pas être normalisée. Pour un état physiquement réalisable, on doit avoir d'après (9.31)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |A(k)|^2 < \infty$$

Examinons maintenant l'évolution du paquet d'ondes au cours du temps. Pour évaluer (9.41), nous utilisons l'approximation de la phase stationnaire. Définissant $A(k) = |A(k)| \exp(i\phi(k))$, la phase $\theta(k)$ de l'exponentielle dans (9.41) vaut

$$\theta(k) = kx - \omega(k)t + \phi(k)$$

Nous obtiendrons la contribution principale à l'intégrale (9.41) si la phase $\theta(k)$ est stationnaire dans la région $k \simeq \bar{k}$ où $|A(k)|$ est maximum : en effet, si $\theta(k)$ n'est pas stationnaire, l'exponentielle oscille rapidement et la contribution moyenne à l'intégrale (9.41) est nulle. Nous devons donc avoir

$$\left. \frac{d\theta}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = x - t \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} + \left. \frac{d\phi}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = 0$$

Le centre du paquet d'ondes va se déplacer selon la loi

$$x = v_g(t - \tau) \quad (9.45)$$

où v_g est la vitesse de groupe, qui n'est autre que la vitesse moyenne $\bar{v}$ de la particule

$$v_g = \bar{v} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = \frac{d}{dk} \frac{\hbar k^2}{2m} \Big|_{k=\bar{k}} = \frac{\hbar \bar{k}}{m} = \frac{\bar{p}}{m} \quad (9.46)$$

Le temps τ qui détermine la position initiale $x_0 = -v_g \tau$ du centre du paquet d'ondes est

$$\tau = \frac{1}{v_g} \left. \frac{d\phi}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = \hbar \left. \frac{d\phi}{dE} \right|_{k=\bar{k}} \quad (9.47)$$

Pour obtenir un résultat plus précis, nous pouvons réécrire la phase en développant $\omega(k)$ au voisinage de $k = \bar{k}$

$$\begin{aligned} \theta(k) &= kx - \omega(\bar{k})t - (k - \bar{k})v_g t - \frac{1}{2}(k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t + \phi(k) \\ &= \omega(\bar{k})t + k(x - v_g t) - \frac{1}{2}(k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t + \phi(k) \end{aligned}$$

On obtient une forme très simple pour $\varphi(x, t)$ s'il est possible de négliger le terme quadratique en $(k - \bar{k})^2$

$$\begin{aligned}\varphi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[i\omega(\bar{k})t] \int dk A(k) \exp[ik(x - v_g t)] \\ &= \exp[i\omega(\bar{k})t] \varphi(x - v_g t, 0)\end{aligned}\quad (9.48)$$

Cette équation montre que, mis à part le facteur de phase $\exp[i\omega(\bar{k})t]$, la fonction d'onde au temps t se déduit de celle au temps $t = 0$ par la substitution $x \rightarrow x - v_g t$, c'est-à-dire que le paquet d'ondes se propage sans déformation dans la direction des x positifs — si $v_g > 0$ — à la vitesse v_g . Cependant ce résultat est seulement approximatif puisque nous avons négligé le terme quadratique en $(k - \bar{k})^2$. Ce terme donne une contribution à la phase

$$-\frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} t$$

qui doit rester $\ll 1$ dans le domaine où $|A(k)|$ est appréciable, si l'on veut se contenter de l'approximation linéaire. La contribution de ce terme pourra être négligée si

$$\frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar t}{m} \ll 1$$

dans une région d'extension Δk autour de $\bar{k}$; pour que la déformation du paquet d'ondes soit faible, on doit avoir

$$t \ll \frac{2m}{\hbar(\Delta k)^2} = \frac{2m\hbar}{(\Delta p)^2}\quad (9.49)$$

Si cette condition n'est pas satisfaite, le paquet d'ondes se déforme en s'élargissant, tandis que son centre continue à se déplacer à la vitesse v_g : c'est le phénomène *d'étalement du paquet d'ondes*.

Pour conclure cette sous-section, montrons l'intérêt de l'inégalité de Heisenberg (9.36) utilisée comme outil heuristique en estimant l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène (voir § 1.5.2). Si l'électron décrit une orbite circulaire de rayon r avec une impulsion $p = mv$, son énergie classique est

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}\quad (9.50)$$

En physique classique, le rayon de l'orbite de l'électron tend vers zéro (« l'électron tombe sur le noyau »), ce phénomène étant accompagné de l'émission de rayonnement électromagnétique : en effet, en physique classique, l'énergie de l'orbite circulaire $E = -e^2/(2r)$ n'est pas bornée inférieurement et rien ne s'oppose à ce que le rayon de l'orbite devienne arbitrairement petit. La décroissance de l'énergie de l'orbite est compensée par l'émission dans l'espace d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique, ce qui assure la conservation de l'énergie. Mais sur une orbite de rayon r , la dispersion

Δx de la position suivant l'axe des x est de l'ordre de r , ce qui fait que la dispersion sur l'impulsion est au moins de $\sim \hbar/\Delta x = \hbar/r$. Nous pouvons en déduire $rp \sim \hbar$ et l'expression de l'énergie (9.50) devient

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

Cherchons le minimum de E

$$\frac{dE}{dr} \sim -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0$$

ce qui donne un minimum pour

$$r = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (9.51)$$

soit précisément le rayon de Bohr (1.34) de l'atome d'hydrogène ! Naturellement, le fait que l'on obtienne exactement a_0 dans ce calcul d'ordre de grandeur est un hasard heureux, qui nous permet de retrouver l'énergie de l'état fondamental (1.35)

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (9.52)$$

S'il est bien entendu que ce calcul ne peut donner qu'un ordre de grandeur, la physique sous-jacente explique la raison profonde de la stabilité de l'atome : en raison des inégalités de Heisenberg, l'électron ne peut pas se trouver sur une orbite de rayon trop petit, sous peine d'acquérir une impulsion importante, qui fait croître son énergie cinétique. L'énergie de l'état fondamental est obtenue en recherchant le meilleur compromis possible entre énergie cinétique et énergie potentielle, de façon à obtenir le minimum de l'énergie totale.

9.2 Équation de Schrödinger

9.2.1 Hamiltonien de l'équation de Schrödinger

Nous avons vu au § 8.4.1 que le hamiltonien indépendant du temps le plus général compatible avec l'invariance galiléenne en dimension $d = 1$ était donné par (8.68)

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (9.53)$$

où $K = P^2/(2m)$ est l'opérateur énergie cinétique et $V(X)$ l'opérateur énergie potentielle, ou plus brièvement le *potentiel*. Rappelons aussi l'équation d'évolution (4.11)

$$i\hbar \frac{d|\varphi(t)\rangle}{dt} = H|\varphi(t)\rangle \quad (9.54)$$

Multiplions à gauche les deux membres de cette équation par le bra $\langle x|$ en utilisant (9.53) comme hamiltonien

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle x|\varphi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) \\ \langle x|P^2|\varphi(t) \rangle &= (P^2\varphi)(x, t) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \varphi(x, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} \\ \langle x|V(X)|\varphi(t) \rangle &= V(x)\varphi(x, t) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé (9.8) et (9.16). Nous obtenons donc l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x, t)} \quad (9.55)$$

L'équation de Schrödinger est une équation d'onde pour la fonction d'onde $\varphi(x, t)$.

Comme le potentiel $V(X)$ est indépendant du temps, nous savons qu'il existe des solutions stationnaires de (9.54)

$$|\varphi(t)\rangle = \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) |\varphi(0)\rangle \quad H|\varphi(0)\rangle = E|\varphi(0)\rangle \quad (9.56)$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle x|$, l'équation $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ devient l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \varphi(x) = E\varphi(x)} \quad (9.57)$$

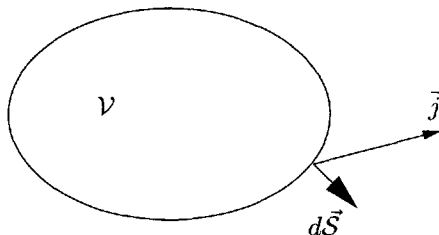
On peut généraliser (9.55) dans deux directions. Tout en restant compatible avec l'invariance galiléenne, il est possible de rajouter une dépendance temporelle au potentiel : $V(x) \rightarrow V(x, t)$. On peut aussi utiliser des potentiels dépendant de la vitesse, par exemple comme approximation d'effets relativistes. Dans ce cas l'invariance galiléenne est perdue, et de plus il peut s'introduire des ambiguïtés lorsque l'on doit faire un choix pour l'ordre d'un produit d'opérateurs position et impulsion.

9.2.2 Probabilité de présence et vecteur courant

À la probabilité de présence $|\varphi(x, t)|^2$ on peut associer un vecteur courant $j(x, t)$, par analogie avec l'hydrodynamique ou l'électrodynamique. Rappelons l'exemple de l'hydrodynamique pour fixer les idées : soit⁴ $\rho(\vec{r}, t)$ la masse volumique d'un fluide compressible de masse totale M s'écoulant avec une vitesse locale $\vec{v}(\vec{r}, t)$; le courant $\vec{j}(\vec{r}, t)$ est défini par

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) \quad (9.58)$$

4. Nous nous plaçons provisoirement en dimension $d = 3$.

FIG. 9.3 – Courant et flux sortant d'un volume $\mathcal{V}$.

Considérons une surface $\mathcal{S}$ limitant un volume $\mathcal{V}$, qui contient une masse $M(\mathcal{V})$ de fluide (figure 9.3). La masse $dM(\mathcal{V})/dt$ de fluide s'écoulant par unité de temps hors de $\mathcal{V}$ est égale au flux du courant à travers $\mathcal{S}$

$$\frac{dM(\mathcal{V})}{dt} = \int_{\mathcal{S}} \vec{j} \cdot d\vec{S} = \int_{\mathcal{V}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}) d^3x$$

où nous avons utilisé le théorème de la divergence. Cette masse de fluide est aussi égale à moins la dérivée par rapport au temps de l'intégrale de la densité sur $\mathcal{V}$

$$\frac{dM(\mathcal{V})}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} d^3r \rho(\vec{r}, t) = -\int_{\mathcal{V}} d^3r \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Les deux expressions de $dM(\mathcal{V})/dt$ doivent être égales quel que soit le volume $\mathcal{V}$, ce qui implique que les intégrands doivent être égaux, d'où l'équation de continuité

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad (9.59)$$

et en revenant à la dimension $d = 1$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (9.60)$$

En électrodynamique, ρ est la densité de charge et $\vec{j}$ la densité de courant, qui vérifient aussi une équation de continuité du type (9.59) traduisant la conservation locale de la charge électrique.

En mécanique quantique, on s'attend à trouver une équation de continuité du type (9.59), ou (9.60) à une dimension. En effet, si

$$\int_a^b dx |\varphi(x, t)|^2$$

est la probabilité de trouver la particule au temps t dans l'intervalle $[a, b]$, cette probabilité va en général dépendre du temps. Si par exemple cette probabilité diminue, cela veut dire que la probabilité de trouver la particule

dans l'ensemble des deux intervalles complémentaires $[-\infty, a]$ et $[b, +\infty]$ doit augmenter, car quel que soit t l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x, t)|^2$$

est constante et égale à un. De la même façon, l'intégrale sur tout l'espace de la densité de fluide reste constante et égale à la masse totale M , ou, en électrodynamique, l'intégrale sur tout l'espace de la densité de charge reste constante et égale à la charge totale Q . L'analogue de la densité en mécanique quantique est $\rho(x, t) = |\varphi(x, t)|^2$; cependant il s'agit d'une densité de probabilité, et non d'une véritable densité. Nous recherchons un courant $j(x, t)$ vérifiant (9.60), qui sera aussi un courant de probabilité et non un courant véritable. La forme de ce courant est suggérée par le raisonnement suivant : en hydrodynamique, la vitesse moyenne $\langle v(t) \rangle$ du fluide (ou vitesse du centre de masse) est donnée par

$$\langle v(t) \rangle = \frac{1}{M} \int \rho(x, t) v(x, t) dx = \frac{1}{M} \int j(x, t) dx \quad (9.61)$$

En mécanique quantique, l'opérateur vitesse est d'après (8.61)

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] = \frac{P}{m}$$

et sa valeur moyenne est

$$\langle \dot{X} \rangle(t) = \langle \varphi(t) | \frac{P}{m} | \varphi(t) \rangle = \int dx \varphi^*(x, t) \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x}$$

où nous avons utilisé (9.9) et (9.16). L'intégrand dans cette équation est en général complexe et ne convient pas pour le courant. Une intégration par parties permet de construire un courant réel

$$\langle \dot{X} \rangle(t) = \frac{\hbar}{2im} \int dx \left(\varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} - \varphi(x, t) \frac{\partial \varphi^*(x, t)}{\partial x} \right) \quad (9.62)$$

La comparaison de (9.61) pour $M = 1$ avec (9.62) suggère la forme suivante pour le courant $j(x, t)$

$$\boxed{j = \frac{\hbar}{2im} \left(\varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} - \varphi(x, t) \frac{\partial \varphi^*(x, t)}{\partial x} \right)} \\ = \text{Re} \left(\frac{\hbar}{im} \varphi^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} \right) \quad (9.63)$$

Afin de nous familiariser avec cette expression peu intuitive, examinons le cas d'une onde plane

$$\varphi(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

La densité est $\rho(x) = |A|^2$. Le courant vaut

$$j(x) = \text{Re} \left(\frac{\hbar}{im} A^* e^{-ipx/\hbar} \left[\frac{ip}{\hbar} \right] A e^{ipx/\hbar} \right) = |A|^2 \frac{p}{m} \quad (9.64)$$

et s'interprète donc comme : courant = densité $\times$ vitesse. Le courant est dirigé vers la droite si $p > 0$ et vers la gauche si $p < 0$. Lorsque la fonction d'onde est indépendante du temps, comme dans le cas de l'onde plane, le courant est nécessairement indépendant de x puisque $\partial\rho/\partial t = 0 \Rightarrow \partial j/\partial x = 0$. Il reste à s'assurer que le courant (9.63) est bien le courant qui vérifie l'équation de continuité (9.60). D'une part

$$\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\hbar}{2im} \left[\varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \varphi \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial x^2} \right] = \frac{i}{\hbar} [\varphi^* (H\varphi) - \varphi (H\varphi)^*]$$

où nous avons utilisé

$$\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} [(H - V)\varphi]$$

et le fait que V est une fonction réelle de x et t . D'autre part

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(x, t)|^2 = \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\varphi^* (H\varphi) - (H\varphi)\varphi^*]$$

ce qui montre que

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(x, t)|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (9.65)$$

9.3 Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

9.3.1 Généralités

Nous nous proposons de chercher les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.57), c'est-à-dire déterminer les valeurs propres E et les fonctions propres correspondantes $\varphi(x)$. Commençons par le cas le plus simple où le potentiel $V(x) = 0$. L'équation (9.57) devient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0 \quad (9.66)$$

La solution générale de cette équation est bien sûr une combinaison d'ondes planes, avec $p = \sqrt{2mE} > 0$

$$\varphi(x) = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar} \quad (9.67)$$

orientées dans la direction des x positifs avec une amplitude A et des x négatifs avec une amplitude B . Bien que la solution (9.67) soit indépendante du

temps, elle génère un courant stationnaire⁵ composé d'après (9.64) d'un terme $|A|^2 p/m$ dirigé vers les x positifs et d'un terme $-|B|^2 p/m$ dirigé vers les x négatifs. Aux solutions indépendantes du temps $\exp(\pm ipx/\hbar)$ correspondent des solutions de (9.55) dépendant du temps $\exp[i(\pm px - E(p)t)/\hbar]$ qui sont des ondes progressives se propageant dans les directions des x positifs ou des x négatifs. Avec les ondes progressives $\exp[i(+px - E(p)t)/\hbar]$, on forme des paquets d'ondes se propageant dans la direction des x positifs : on dira que ces paquets d'ondes proviennent d'une *source* de particules à $x = -\infty$. Avec les ondes progressives $\exp[i(-px - E(p)t)/\hbar]$, on forme des paquets d'ondes se propageant dans la direction des x négatifs : on dira qu'il y a une source de particules à $x = +\infty$.

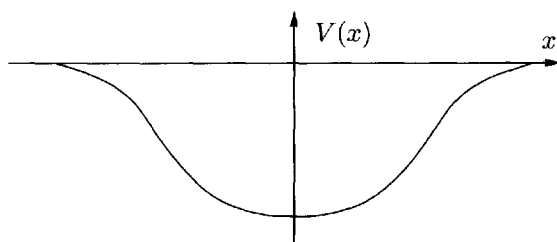


FIG. 9.4 – Cuvette de potentiel.

Passons au cas où $V(x) \neq 0$ et, pour fixer les idées, supposons que $V(x)$ a la forme de la figure 9.4 : $V(x)$ est une « cuvette de potentiel » et $V(x) \rightarrow 0$ si $x \rightarrow \pm\infty$. En mécanique classique, suivant la discussion du § 1.5.1, ce potentiel a des états liés si $E < 0$ et des états de diffusion si $E > 0$. Pour $E < 0$ la particule classique reste confinée sur un intervalle fini de l'axe des x , pour $E > 0$ elle part à l'infini. La région de l'axe des x qui est permise à la particule classique est celle où $E > V(x)$, et où son impulsion $p(x)$ est réelle

$$p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (9.68)$$

tandis que la région $E < V(x)$, où son impulsion est imaginaire

$$p(x) = \pm i \sqrt{2m(V(x) - E)} \quad (9.69)$$

lui est interdite. Nous allons voir que ce comportement classique se reflète dans le comportement quantique : la forme des solutions de (9.57) sera différente selon que $p(x)$ est réel ou imaginaire. Cependant la région $V_0 < E < V(x)$, où V_0 est la valeur minimale du potentiel, ne sera pas strictement interdite à la particule quantique. Pour que $\varphi(x)$ soit une solution acceptable, il ne suffit pas que $\varphi(x)$ vérifie formellement (9.57), il faut aussi que $\varphi(x)$ soit normalisable

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 < \infty$$

5. Un exemple de courant stationnaire est le courant continu en électricité.

C'est cette condition que nous allons utiliser pour obtenir les états liés. Pour les états de diffusion, cette condition est trop forte : nous avons vu que pour $V(x) = 0$ les solutions de (9.57) sont des ondes planes, non normalisables. Pour $x \rightarrow \pm\infty$, nous nous attendons à un comportement d'onde plane pour les solutions de (9.57), puisque le potentiel s'annule à l'infini. Pour les états de diffusion $E > 0$ du potentiel de la figure 9.4, nous nous contenterons d'exiger un comportement d'onde plane à l'infini : il ne faut pas exiger davantage de la solution en présence de potentiel que de la solution en l'absence de potentiel !

9.3.2 Réflexion et transmission par une marche de potentiel

Dans la suite de cette section, nous allons nous intéresser au cas où le potentiel est constant par morceaux : $V(x)$ est constant dans un intervalle et saute brusquement à une autre constante en certains points (figure 9.5). Ce type de potentiel représente une bonne approximation d'un potentiel réaliste dans certains cas, et il peut être utilisé pour approcher un potentiel variant continûment dans d'autres cas (figure 9.6). Comme le potentiel présente des discontinuités, il est nécessaire d'examiner le comportement de la fonction d'onde au voisinage d'une telle discontinuité. Montrons que la fonction d'onde $\varphi(x)$ et sa dérivée $\varphi'(x)$ sont continues si le potentiel présente une discontinuité finie V_0 au point $x = x_0$ (figure 9.7). Comme $|\varphi(x)|^2$ doit être intégrable en x_0 , $|\varphi(x)|$ l'est également. Il sera commode de réécrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.57) sous la forme

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \right) \varphi(x) = 0 \quad (9.70)$$

Au voisinage de la discontinuité, nous pouvons déduire le comportement de $\varphi'(x)$ grâce à

$$\varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon) = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} dx = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \left[\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \right] \varphi(x) dx$$

La seconde intégrale est bien définie car $\varphi(x)$ est intégrable ; cette intégrale doit donc tendre vers zéro avec ε , ce qui montre que $\varphi'(x)$ et *a fortiori* $\varphi(x)$ sont continues tant que la discontinuité V_0 reste finie.

Au lieu d'écrire les conditions de continuité de $\varphi(x)$ et de $\varphi'(x)$, il est souvent commode d'écrire celles de $\varphi(x)$ et de sa dérivée logarithmique $\varphi'(x)/\varphi(x)$. Une conséquence immédiate de ces conditions est que le courant $j(x)$ est égal à la même constante de part et d'autre de x_0 . Comme application de ces conditions de continuité, prenons le cas d'une « marche de potentiel » (figure 9.8)

région I	$V(x) = 0$	pour $x < 0$
région II	$V(x) = V_0$	pour $x > 0$

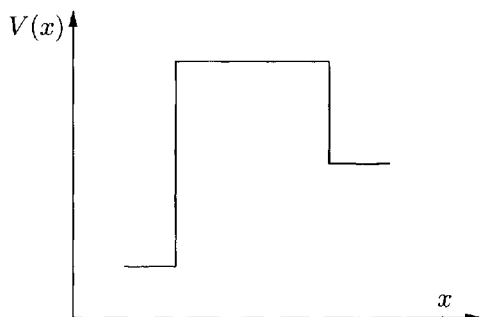


FIG. 9.5 – Potentiel constant par morceaux.

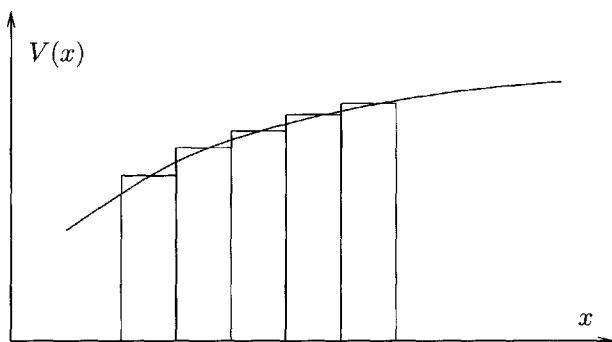


FIG. 9.6 – Approximation d'un potentiel par une suite créneaux.

Pour fixer les idées, on choisit $0 < E < V_0$. Si l'on définit k et κ par

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (9.71)$$

les solutions de (9.70) s'écrivent dans les régions I et II

$$\text{I} \quad \varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (9.72)$$

$$\text{II} \quad \varphi(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} \quad (9.73)$$

Si $V(x)$ reste égal à V_0 pour tout $x > 0$, le comportement (9.73) de la fonction d'onde reste valable quel que soit $x > 0$. Il est alors nécessaire que $D = 0$, car dans le cas contraire la fonction $|\varphi(x)|^2$ se comporterait comme $\exp(2\kappa x)$ pour $x \rightarrow \infty$: un comportement constant en module comme celui d'une onde plane est acceptable, mais pas un comportement aussi divergent. Dans ces conditions, la continuité à $x = 0$ de φ et celle de sa dérivée logarithmique s'écrivent

$$\varphi : C = A + B \quad \frac{\varphi'}{\varphi} : -\kappa = \frac{ik(A - B)}{A + B}$$

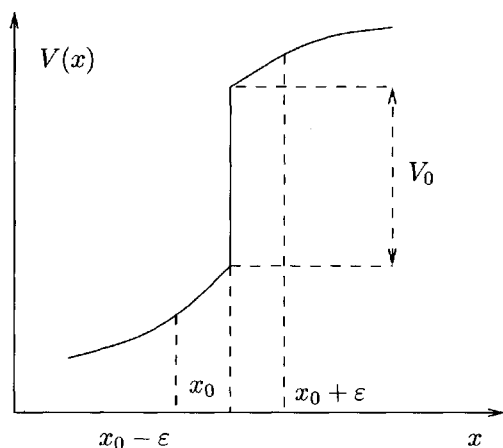


FIG. 9.7 – Discontinuité de potentiel.

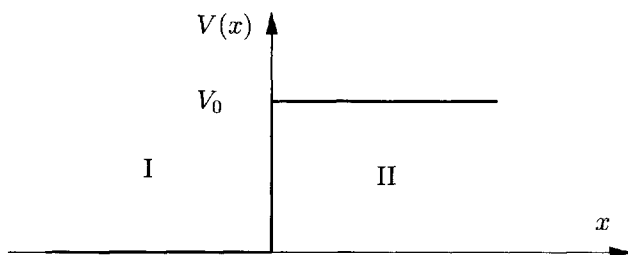


FIG. 9.8 – Marche de potentiel.

Les coefficients A et B sont *a priori* définis à une constante multiplicative près puisque l'on n'a fait aucune hypothèse sur la région $x > 0$. On peut fixer arbitrairement $A = 1$, et la solution pour les deux autres coefficients est alors

$$B = -\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \quad C = -\frac{2ik}{\kappa - ik} \quad (9.74)$$

Nous pouvons déduire de ces expressions le cas limite où $V_0 \rightarrow \infty$, qui correspond à une barrière infranchissable par une particule classique quelle que soit son énergie, ou barrière de potentiel infinie. L'équation (9.71) montre alors que $\kappa \rightarrow \infty$, et (9.74) que $B \rightarrow -1$ et $C \rightarrow 0$. La fonction d'onde s'annule dans la région II, en restant continue au point $x = 0$. En revanche sa dérivée $\varphi'(x)$ est discontinue en ce point.

Passons à l'interprétation physique de ces résultats. Nous supposons qu'il existe à $x = -\infty$ une source de particules d'amplitude unité : $A = 1$. L'onde incidente correspondante sera en partie réfléchie et en partie transmise par la marche de potentiel. Si nous reprenons le cas ci-dessus : $0 < E < V_0$,

nous nous attendons à ce que la particule quantique soit réfléchiée avec une probabilité de 100 %, puisque la particule classique correspondante ne peut pas franchir la marche de potentiel. Au contraire, dans le cas $E > V_0$, nous allons montrer que la solution du problème quantique correspond à une réflexion et une transmission partielles, alors qu'une particule classique est transmise à 100 %. Examinons successivement ces deux cas.

Marche de potentiel : réflexion totale. Nous sommes dans le cas $E < V_0$. Les fonctions d'onde sont dans les régions I et II

$$\begin{aligned} \text{I} \quad \varphi(x) &= e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \text{II} \quad \varphi(x) &= C e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Les valeurs de B et C sont données par (9.74). On remarque que $|B| = 1$, et que B est donc un facteur de phase : $B = \exp(-i\phi)$. Ceci montre que l'onde réfléchiée

$$B e^{-ikx} = e^{-ikx - i\phi}$$

a une intensité égale à celle de l'onde incidente : il y a donc réflexion totale sur la discontinuité de potentiel. Une particule classique arrivant sur la discontinuité de potentiel serait aussi réfléchiée. Cependant le mouvement quantique présente deux différences importantes par rapport au mouvement classique.

- La probabilité de présence n'est pas nulle dans la région II, qui est strictement inaccessible à la particule classique : la profondeur de pénétration dans la région interdite classiquement est $\ell = 1/\kappa$. Ce phénomène a la même origine ondulatoire que celui d'onde évanescence en optique.
- Si l'on construit un paquet d'ondes incident, la particule sera réfléchiée avec un retard τ donné par (9.47)

$$\tau = -\hbar \frac{d\phi}{dE}$$

tandis que la réflexion de la particule classique est instantanée.

Marche de potentiel : réflexion et transmission. Passons au cas $E > V_0$, en supposant comme précédemment que les particules sont envoyées de la gauche et arrivent sur la marche de potentiel : dans la région II, on trouve uniquement des particules se propageant vers la droite⁶. Définissons

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

6. Ainsi que nous l'avons déjà souligné, il faudrait en toute rigueur construire des paquets d'ondes avec des superpositions d'ondes planes pour avoir un véritable problème dépendant du temps, décrivant le mouvement d'une particule quantique.

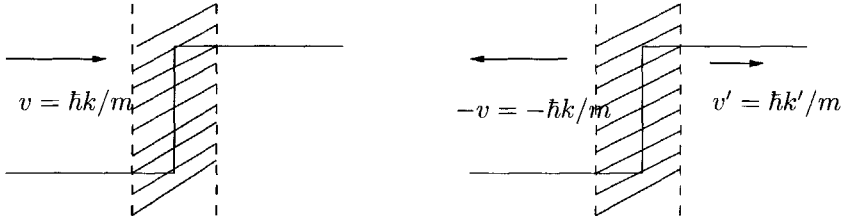


FIG. 9.9 – Conservation du courant à la traversée d'une marche de potentiel.

Les fonctions d'onde sont maintenant dans les régions I et II

$$\text{I} \quad \varphi(x) = e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{II} \quad \varphi(x) = C e^{ik'x}$$

Les conditions de continuité sont

$$1 + B = C \quad ik' = \frac{ik(1 - B)}{1 + B}$$

avec comme résultat

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} \quad C = \frac{2k}{k + k'} \quad (9.75)$$

Une particule classique franchirait automatiquement la marche de potentiel en perdant de l'énergie cinétique. Ce n'est pas le cas en mécanique quantique : il existe une probabilité $|B|^2 \neq 0$ de réflexion, $|B|^2 = R$ est le coefficient de réflexion et $T = 1 - R$ le coefficient de transmission

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad T = 1 - R = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (9.76)$$

Il est important de remarquer que $T \neq |C|^2$! En effet, ce n'est pas la probabilité de présence qui doit se conserver, mais le *courant* (ou le flux) de particules : dans la figure 9.9, le flux de particules entrant dans la zone hachurée doit être égal au flux sortant, soit

$$\frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2 + \frac{\hbar k'}{m} |C|^2 \quad (9.77)$$

ce que l'on vérifie en reportant les valeurs (9.75) de B et C . Le coefficient de transmission n'est pas $|C|^2$, mais

$$T = \frac{k'}{k} |C|^2$$

Il faut tenir compte de la variation de vitesse au passage de la marche de potentiel : $v'/v = k'/k$.

9.3.3 États liés du puits carré

Comme premier exemple d'états liés, étudions ceux du puits carré infini (figure 9.10)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & 0 \leq x \leq a \\ V(x) &= +\infty & x < 0 \text{ ou } x > a \end{aligned}$$

Les barrières de potentiel en $x = 0$ et $x = a$ sont infinies : une particule classique est enfermée dans la région $0 \leq x \leq a$ quelle que soit son énergie. D'après la discussion précédente, la fonction d'onde de la particule quantique s'annule en dehors de l'intervalle $[0, a]$ et une particule quantique est également strictement confinée dans $[0, a]$: sa probabilité de présence est nulle en dehors de l'intervalle $[0, a]$. En raison de l'annulation de la fonction d'onde à $x = 0$ les solutions de (9.70) sont de la forme

$$\varphi(x) = A \sin(kx) \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

et comme $\varphi(x)$ doit aussi s'annuler à $x = a$, les valeurs de k sont de la forme

$$k = k_n = \frac{\pi(n+1)}{a} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.78)$$

Nous voyons que l'énergie prend des valeurs discrètes étiquetées par un nombre entier positif⁷ n

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 (n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.79)$$

En d'autres termes, nous venons de montrer que les niveaux d'énergie du puits infini sont *quantifiés*, et c'est le premier exemple où nous démontrons explicitement cette quantification. La fonction d'onde correctement normalisée correspondant au niveau E_n est

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} \quad (9.80)$$

Il est facile de vérifier que deux fonctions d'onde $\varphi_n(x)$ et $\varphi_m(x)$ sont orthogonales pour $n \neq m$. Les valeurs k_n et $-k_n$ correspondent au même état physique car la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ conduit à un simple changement de signe de la fonction d'onde, qui est un facteur de phase : c'est pourquoi nous n'avons pas pris en compte les valeurs négatives de n dans (9.78). Remarquons

7. Notre convention (qui n'est pas la convention habituelle dans ce cas précis) est choisie de telle sorte $n = 0$ corresponde à l'état fondamental, ce qui permet de se conformer à une convention usuelle : en général l'énergie de l'état fondamental est notée E_0 .

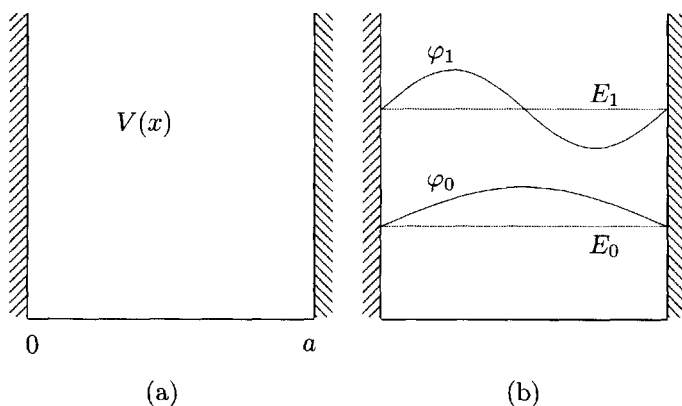


FIG. 9.10 – Puits carré infini et fonctions d'onde de ses deux premiers niveaux.

également que la fonction d'onde $\varphi_n(x)$ s'annule n fois dans l'intervalle $[0, a]$: on dit que la fonction d'onde a n *nœuds* dans cet intervalle. Le nombre de nœuds donne une classification des niveaux par valeurs croissantes de l'énergie : plus l'énergie est grande et plus la fonction d'onde a de nœuds. Ceci est un résultat général lorsque le potentiel $V(x)$ est suffisamment régulier, ce que nous supposerons toujours : si E_n est l'énergie du niveau n , la fonction d'onde correspondante aura n nœuds. La fonction d'onde de l'état fondamental E_0 ne s'annule pas. Une autre remarque est que l'inégalité de Heisenberg permet de trouver l'ordre de grandeur de l'énergie de l'état fondamental. En effet $p \sim \hbar/x \sim \hbar/L$, ce qui donne

$$E = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

en accord avec (9.79) pour $n = 0$ à un facteur π^2 près. Contrairement au cas de l'atome d'hydrogène, le résultat heuristique diffère du résultat exact par un facteur ~ 10 : ceci provient de la variation brutale du potentiel à $x = 0$ et $x = a$ qui oblige la fonction d'onde à s'annuler de façon brusque, avec comme conséquence une énergie cinétique importante. En effet, l'énergie cinétique moyenne $\langle K \rangle_\varphi$ dans l'état φ est

$$\langle K \rangle_\varphi = \langle \varphi | K | \varphi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \varphi^*(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2}$$

et elle est d'autant plus importante que la dérivée seconde de $\varphi(x)$ est grande.

Déterminons maintenant les niveaux d'énergie du puits carré fini (figure 9.11)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & |x| > a/2 \\ V(x) &= -V_0 & |x| < a/2 \end{aligned}$$

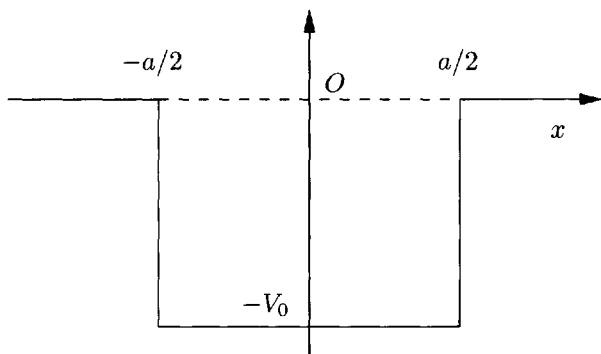


FIG. 9.11 – Puits carré fini.

On cherche les états liés, et on doit donc choisir l'énergie dans l'intervalle $[-V_0, 0]$. Définissons k et κ par

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad 0 \leq \kappa^2 \leq \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (9.81)$$

Le potentiel $V(x)$ est invariant dans l'opération parité $\Pi : x \rightarrow -x$. En effet $V(-x) = V(x)$, ce qui entraîne l'invariance du hamiltonien dans cette opération : $H(-x) = H(x)$. D'après la discussion du § 8.3.3, on peut chercher les vecteurs propres $|\varphi_{\pm}\rangle$ de H qui sont pairs ou impairs dans l'opération parité

$$\Pi|\varphi_{\pm}\rangle = \pm|\varphi_{\pm}\rangle$$

En termes de fonction d'onde, si $\langle x|\varphi_{\pm}\rangle = \varphi_{\pm}(x)$

$$\varphi_{+}(-x) = \varphi_{+}(x) \quad \varphi_{-}(-x) = -\varphi_{-}(x)$$

En effet, compte tenu de $\Pi|x\rangle = |-x\rangle$

$$\begin{aligned} \langle x|\Pi|\varphi_{\pm}\rangle &= \langle -x|\varphi_{\pm}\rangle = \varphi_{\pm}(-x) \\ &= \pm\langle x|\varphi_{\pm}\rangle = \pm\varphi_{\pm}(x) \end{aligned}$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger (9.7) se divisent donc en solutions paires et impaires. Écrivons les fonctions d'ondes paires et impaires dans les régions I : $x < -a/2$, II : $|x| < a/2$ et III : $x > a/2$; la colonne du milieu du tableau ci-dessous donne les fonctions d'onde paires, la colonne de droite les fonctions d'onde impaires :

I	$A e^{-\kappa x }$	$-A' e^{-\kappa x }$
II	$B \cos(kx)$	$B' \sin(kx)$
III	$A e^{-\kappa x}$	$A' e^{-\kappa x}$

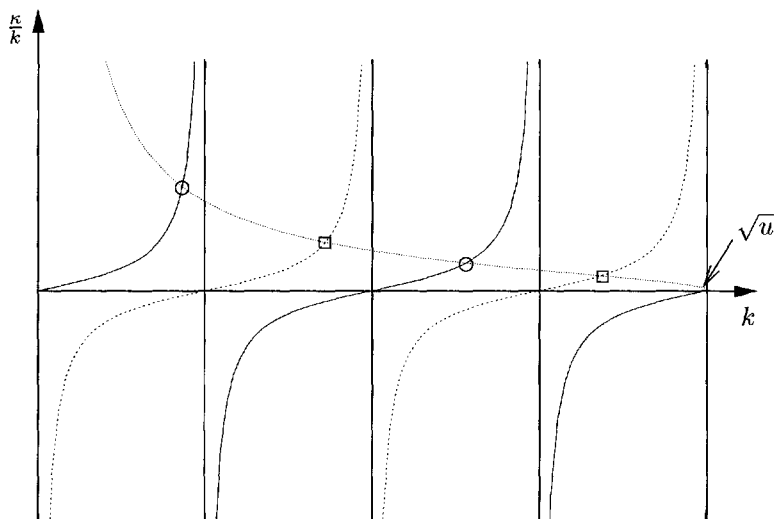


FIG. 9.12 – Détermination graphique des états liés du puits carré fini par intersection des courbes $\tan ka/2$ et $\cot ka/2$ avec $\sqrt{U - k^2}/k$, où $U = 2mV_0/\hbar^2$.

Les conditions de continuité de φ'/φ au point $x = a/2$ donnent

$$\text{Solutions paires} \quad \kappa = k \tan(ka/2) \quad (9.82)$$

$$\text{Solutions impaires} \quad \kappa = -k \cot(ka/2) \quad (9.83)$$

La solution graphique de ces équations est représentée sur la figure 9.12. On voit qu'il existe un nombre fini d'états liés, et qu'il existe toujours au moins un état lié.

9.4 Diffusion par un potentiel

9.4.1 Matrice de passage

Après l'étude des états liés, nous passons à celle des états de diffusion. Nous nous proposons d'étudier le comportement d'une particule quand elle traverse un puits carré (figure 9.11) ou une barrière carrée (figure 9.13) de potentiel, en utilisant les formules explicites reposant sur la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée à la discontinuité du potentiel. Nous en profiterons pour établir des résultats généraux importants, car *indépendants de la forme du potentiel*. Commençons par le puits carré de la figure 9.11 : au § 9.3.3, nous avons déterminé ses états liés $E < 0$, et nous nous intéressons

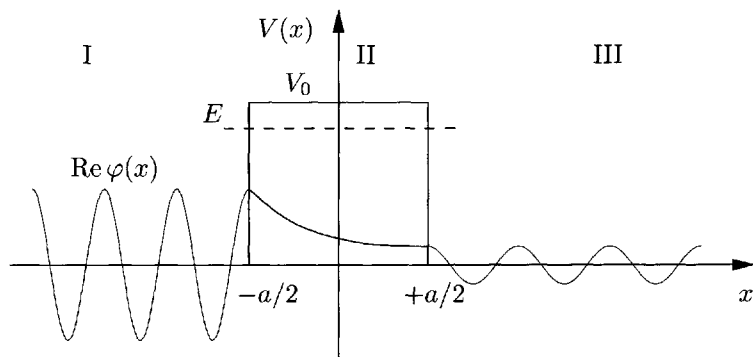


FIG. 9.13 – Comportement de la fonction en présence de l'effet tunnel.

maintenant aux états de diffusion $E > 0$. Définissant

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad (9.84)$$

les fonctions d'onde dans les trois régions sont

$$\text{I} : x < -\frac{a}{2} \quad \varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (9.85)$$

$$\text{II} : -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \quad \varphi(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \quad (9.86)$$

$$\text{III} : x > \frac{a}{2} \quad \varphi(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \quad (9.87)$$

Nous examinons d'abord le passage de la région I à la région II, c'est-à-dire le point $x = -a/2$. Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, A et B sont reliés linéairement à C et D , ce que l'on peut écrire sous forme matricielle⁸

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (9.88)$$

où R est une matrice 2×2 . Il est possible de déterminer des propriétés de R sans écrire explicitement les conditions de continuité. Une première observation est que si $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (9.70), alors son complexe conjugué $\varphi^*(x)$ est également solution de cette équation parce que le potentiel $V(x)$ est réel. Cette propriété est liée à l'invariance par renversement du sens du temps : cf. § 9.4.3 et l'appendice A. La fonction $\varphi^*(x)$ dans les régions I et II est

$$\text{I} \quad \varphi^*(x) = A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} \quad (9.89)$$

$$\text{II} \quad \varphi^*(x) = C^* e^{-ik'x} + D^* e^{ik'x} \quad (9.90)$$

8. On peut aussi remarquer que les conditions de continuité relient linéairement (A, B) à (C, D) .

Comparant les coefficients de $\exp(\pm ikx)$ et $\exp(\pm ik'x)$ avec ceux de (9.85) et (9.86), on déduit de (9.88)

$$\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix}$$

soit

$$R_{11}^* = R_{22} \quad R_{12}^* = R_{21}$$

On peut donc écrire la matrice R en fonction de deux nombres complexes α et β

$$R = \sqrt{\frac{k'}{k}} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (9.91)$$

La raison pour l'introduction du facteur *a priori* arbitraire $\sqrt{k'/k}$ va apparaître dans un instant. La conservation du courant dans les régions I et II se traduit par la relation (cf. (9.77))

$$k(|A|^2 - |B|^2) = k'(|C|^2 - |D|^2)$$

Calculons le courant dans la région I en exprimant A et B fonction de C et D

$$\begin{aligned} k(|A|^2 - |B|^2) &= k \frac{k'}{k} (|\alpha C + \beta D|^2 - |\beta^* C + \alpha^* D|^2) \\ &= k' (|\alpha|^2 - |\beta|^2) (|C|^2 - |D|^2) \end{aligned}$$

ce qui implique $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$: la matrice $\sqrt{k/k'} R$ est de déterminant un. On voit l'intérêt du coefficient $\sqrt{k'/k}$ dans (9.91) : en raison de la variation de la vitesse entre les régions I et II, c'est la matrice $\sqrt{k/k'} R$ qui a les propriétés les plus simples.

Revenons au calcul explicite des conditions de continuité, afin de déterminer explicitement les paramètres α et β de la matrice R . Il est commode de choisir $C = 1$ et $D = 0$, ce qui correspond à une situation où il n'y a pas de source de particules à $x = -\infty$ (voir la note 6). Les conditions de continuité sont alors :

$$\begin{aligned} e^{-ik'a/2} &= A e^{-ika/2} + B e^{ika/2} \\ k' e^{-ik'a/2} &= k A e^{-ika/2} - k B e^{ika/2} \end{aligned}$$

On en déduit immédiatement A et B en multipliant la première équation par k' puis en additionnant et en soustrayant les deux équations

$$\alpha = \sqrt{\frac{k}{k'}} A = \frac{k + k'}{2\sqrt{kk'}} e^{i(k-k')a/2} \quad (9.92)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{k}{k'}} B^* = \frac{k - k'}{2\sqrt{kk'}} e^{i(k+k')a/2} \quad (9.93)$$

Ces valeurs de α et β vérifient bien $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$. Les conditions de continuité à $x = a/2$ s'obtiennent par la substitution $a \rightarrow -a$ et $k \leftrightarrow k'$. La matrice $\tilde{R}$ telle que

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \tilde{R} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

s'écrit

$$\tilde{R} = \sqrt{\frac{k}{k'}} \begin{pmatrix} \tilde{\alpha} & \tilde{\beta} \\ \tilde{\beta}^* & \tilde{\alpha}^* \end{pmatrix}$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &= \frac{k + k'}{2\sqrt{kk'}} e^{i(k-k')a/2} = \alpha \\ \tilde{\beta} &= -\frac{k - k'}{2\sqrt{kk'}} e^{-i(k+k')a/2} = -\beta^* \end{aligned}$$

La matrice de passage M entre les régions I et III relie les coefficients A et B aux coefficients F et G

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = R\tilde{R} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (9.94)$$

et l'on a donc $M = R\tilde{R}$. Les raisonnements utilisés précédemment donnent immédiatement deux propriétés de M .

- (i) Comme $\varphi^*(x)$ est solution de (9.57) (invariance par renversement du sens du temps), on obtient des relations identiques à celles trouvées pour R

$$M_{11} = M_{22}^* \quad M_{12} = M_{21}^*$$

- (ii) La conservation du courant implique $\det M = 1$: il n'y a pas de facteur $\sqrt{k'/k}$ car la vitesse est la même dans les régions I et III.

La forme générale de M est par conséquent

$$M = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \quad |\gamma|^2 - |\delta|^2 = 1 \quad (9.95)$$

Cette expression de M est indépendante de la forme du potentiel, pourvu que celui-ci s'annule suffisamment rapidement pour $x \rightarrow \pm\infty$: la forme (9.95) est valable par exemple dans le cas du potentiel de la figure 9.4. Calculons explicitement M dans le cas du puits de potentiel de la figure 9.11, en utilisant les résultats obtenus pour les matrices R et $\tilde{R}$

$$\begin{aligned} M_{11} = \gamma = \alpha^2 - \beta^2 &= \frac{e^{ika}}{4kk'} \left[(k + k')^2 e^{-ik'a} - (k - k')^2 e^{ik'a} \right] \\ &= e^{ika} \left[\cos k'a - i \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin k'a \right] \end{aligned} \quad (9.96)$$

$$M_{12} = \delta = -\alpha\beta^* + \alpha^*\beta = i \frac{k'^2 - k^2}{2kk'} \sin k'a \quad (9.97)$$

Il est instructif de s'assurer que, suivant (9.95), les expressions (9.96) et (9.97) vérifient $|\gamma|^2 - |\delta|^2 = 1$.

Il reste une propriété générale de M que nous n'avons pas encore exploitée : lorsque le potentiel est invariant par parité, $V(x) = V(-x)$, l'opération parité $x \rightarrow -x$ échange les régions I et III. Si $\varphi(x)$ est la solution initiale et $\chi(x) = \varphi(-x)$, nous avons

$$\begin{array}{ll} \text{région I} & \chi(x) = F e^{-ikx} + G e^{ikx} \\ \text{région III} & \chi(x) = A e^{-ikx} + B e^{ikx} \end{array}$$

et la relation entre les différents coefficients est maintenant

$$\begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}$$

ou encore

$$\begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22} & -M_{12} \\ -M_{21} & M_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}$$

Nous avons utilisé $\det M = 1$. Comparant avec (9.94), nous en déduisons que M est une matrice antisymétrique : $M_{12} = -M_{21}$, ce qui joint à $M_{12}^* = M_{21}$ implique que δ est imaginaire pur, $\delta = i\eta$, η réel. Cette propriété est vérifiée par (9.97). La forme générale de M pour un potentiel pair ($V(x) = V(-x)$) est finalement

$$M = \begin{pmatrix} \gamma & i\eta \\ -i\eta & \gamma^* \end{pmatrix} \quad |\gamma|^2 - \eta^2 = 1 \quad (9.98)$$

avec γ complexe et η réel.

Tous ces résultats peuvent être exploités pour calculer les coefficients de réflexion et de transmission par le puits de potentiel de la figure 9.11 et en discuter le comportement. Nous renvoyons cette discussion à l'exercice 9.7.8, car nous allons passer immédiatement au cas de la barrière de potentiel, ce qui nous conduira à l'effet tunnel.

9.4.2 Effet tunnel

Nous nous plaçons dans le cas de la barrière de potentiel de la figure 9.13

$$\begin{array}{ll} V(x) = V_0 & |x| \leq \frac{a}{2} \\ V(x) = 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{array} \quad (9.99)$$

et pour une valeur de l'énergie $E < V_0$ (le cas $E > V_0$ se déduit immédiatement des résultats de la sous-section précédente). La quantité k' est alors imaginaire pure

$$k' = i\kappa \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (9.100)$$

et la fonction d'onde dans la région II : $|x| \leq a/2$

$$\varphi(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} \quad (9.101)$$

L'élément M_{11} de la matrice de passage s'obtient sans calcul en remplaçant dans (9.96) k' par $i\kappa$, avec par exemple

$$\sin k'a = \frac{1}{2i} (e^{ik'a} - e^{-ik'a}) \rightarrow \frac{1}{2i} (e^{-\kappa a} - e^{\kappa a}) = i \operatorname{sh} \kappa a$$

et de même $\cos k'a \rightarrow \operatorname{ch} \kappa a$; le résultat pour M_{11} est

$$M_{11} = e^{ika} \left[\operatorname{ch} \kappa a + i \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \operatorname{sh} \kappa a \right] \quad (9.102)$$

On suppose que la source de particules est située à $x = -\infty$ et que $A = 1$ par convention. Comme il n'y a pas de source de particules à $x = +\infty$, on doit avoir $G = 0$, d'où

$$\begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}F \\ M_{21}F \end{pmatrix}$$

soit $F = 1/M_{11}$

$$F = \frac{e^{-ika}}{\operatorname{ch} \kappa a + i \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \operatorname{sh} \kappa a} \quad (9.103)$$

Nous obtenons finalement le résultat physique important, à savoir le coefficient de transmission $T = |F|^2$ qui vaut

$$T = |F|^2 = \frac{1}{1 + \frac{q^4}{4k^2\kappa^2} \operatorname{sh}^2 \kappa a} \quad (9.104)$$

en définissant $q^2 = k^2 + \kappa^2 = 2mV_0/\hbar^2$. Le point essentiel est que $T \neq 0$. Bien que la région III soit inaccessible à une particule classique partant de $x = -\infty$ avec une énergie $E < V_0$, une particule quantique possède une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est ce que l'on appelle *l'effet tunnel*. L'origine de cet effet est facile à comprendre : la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région $|x| \leq a/2$ et peut se raccorder à une onde plane dans la région $x > a/2$ (figure 9.13).

On peut obtenir une expression approchée de T dans le cas fréquent où $\kappa a \gg 1$

$$T \simeq \frac{16k^2\kappa^2}{q^4} e^{-2\kappa a} \quad (9.105)$$

Le facteur dominant dans cette équation est l'exponentielle $\exp(-2\kappa a)$. On en déduit de façon heuristique une formule approchée souvent utilisée pour

une barrière de potentiel de forme quelconque, lorsque que $E < \text{Max } V(x)$: décomposant la barrière en créneaux de longueur Δx comme dans la figure 9.6, on calcule le facteur de transmission dans l'intervalle $[x_i, x_i + \Delta x]$

$$T(x_i) \simeq e^{-2\kappa(x_i)\Delta x} \quad \kappa(x_i) = \sqrt{\frac{2m(V(x_i) - E)}{\hbar^2}}$$

et le facteur de transmission total

$$T \simeq \prod_i e^{-2\kappa(x_i)\Delta x} = \exp\left(-2\Delta x \sum_i \kappa(x_i)\right)$$

On reconnaît une somme de Riemann et à la limite $\Delta x \rightarrow 0$

$$T \simeq \exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}} dx\right) \quad (9.106)$$

Les points x_1 et x_2 sont définis par $V(x_1) = V(x_2) = E$. La démonstration que nous venons d'esquisser n'est pas rigoureuse, car le traitement des points de rebroussement x_1 et x_2 est délicat. Une observation importante est que la dépendance exponentielle dans (9.106) rend le coefficient de transmission T extrêmement sensible à la hauteur de la barrière et à la valeur de l'énergie.

L'effet tunnel a de nombreuses applications en physique quantique. Nous nous contenterons d'en examiner deux : la radioactivité α et le microscope à effet tunnel. La radioactivité α est la désintégration d'un noyau avec émission d'une particule α , c'est-à-dire un noyau d' ${}^4\text{He}$. En appelant Z et N les nombres de protons et de neutrons dans le noyau initial ($A = Z + N$) (en général $Z \gtrsim 80$), la réaction nucléaire de désintégration α s'écrit

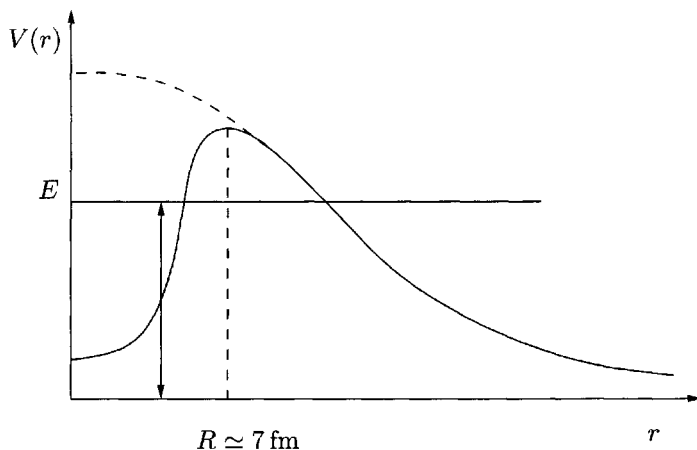
$$(Z, N) \rightarrow (Z - 2, N - 2) + {}^4\text{He} \quad (9.107)$$

Un exemple est la désintégration du polonium en plomb

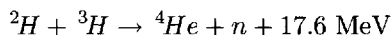
$${}^{214}\text{Po}_{84} \rightarrow {}^{208}\text{Pb}_{82} + {}^4\text{He}_2 + 7.8 \text{ MeV} \quad (9.108)$$

Dans une théorie approchée de la radioactivité α , on admet que la particule α préexiste dans le noyau initial et on se ramène pour simplifier au cas à une dimension. Si $R \simeq 1.2 \times A^{1/3} \simeq 7 \text{ fm}$ est le rayon du noyau, la particule α sera soumise au potentiel nucléaire et au potentiel coulombien répulsif entre le noyau d' ${}^4\text{He}$ de charge 2 (en unités de la charge du proton) et le noyau final de charge $(Z - 2)$ en supposant la distribution de charge à symétrie sphérique. Si r est la distance entre le noyau d'hélium et le noyau final, nous aurons pour $r > R$

$$V_{\text{Cb}}(r) = \frac{2(Z - 2)e^2}{r^2}$$

FIG. 9.14 – Barrière de potentiel de la radioactivité α .

Lorsque $r < R$, les forces nucléaires attractives l'emportent largement sur les forces coulombiennes que l'on peut alors négliger. On aboutit ainsi à un potentiel représenté schématiquement sur la figure 9.14. Il existe donc une barrière de potentiel qui empêcherait la particule α de sortir du noyau si son mouvement était régi par la physique classique. C'est l'effet tunnel qui permet à la particule α de sortir du noyau. Le raisonnement précédent permet en théorie d'estimer la vie moyenne du noyau initial, mais les approximations que nous avons faites sont très grossières et l'effet tunnel très sensible aux détails : bien que la physique sous-jacente soit indubitablement correcte, il ne faut pas s'attendre à des résultats en accord quantitatif avec l'expérience. Le phénomène inverse de la désintégration radioactive intervient dans les réactions de fusion, par exemple la réaction déjà mentionnée au § 1.1.2



qui fait également appel à l'effet tunnel et est examinée à l'exercice 12.5.1.

Une application très importante de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel. Dans un microscope à effet tunnel, on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur (figure 9.15). Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon, ce qui produit un courant *macroscopique*, dépendant de façon très sensible de la distance entre la pointe et l'échantillon, en raison de la dépendance exponentielle (9.105) par rapport à la distance. Cela permet de réaliser une cartographie très précise de la surface de l'échantillon, avec une résolution de $\simeq 0.01 \text{ nm}$. Une extension de cette technique permet de manipuler des atomes et des molécules déposés sur un substrat (figure 9.16).

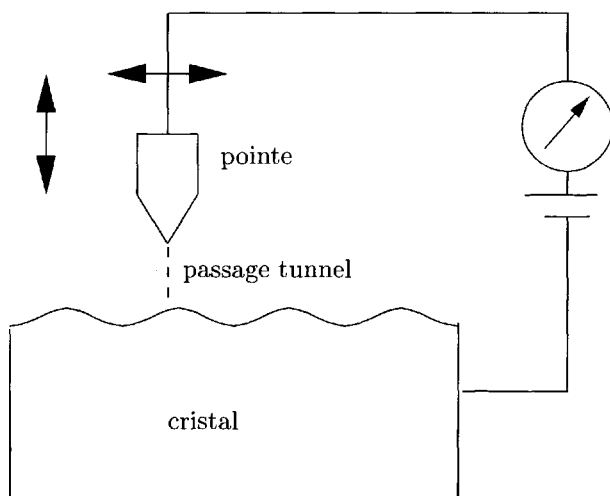


FIG. 9.15 – Principe du microscope à effet tunnel. On déplace une pointe au voisinage de la surface d'un cristal et on ajuste la distance de façon que le courant soit constant. Ceci donne une cartographie de la distribution électronique sur la surface.

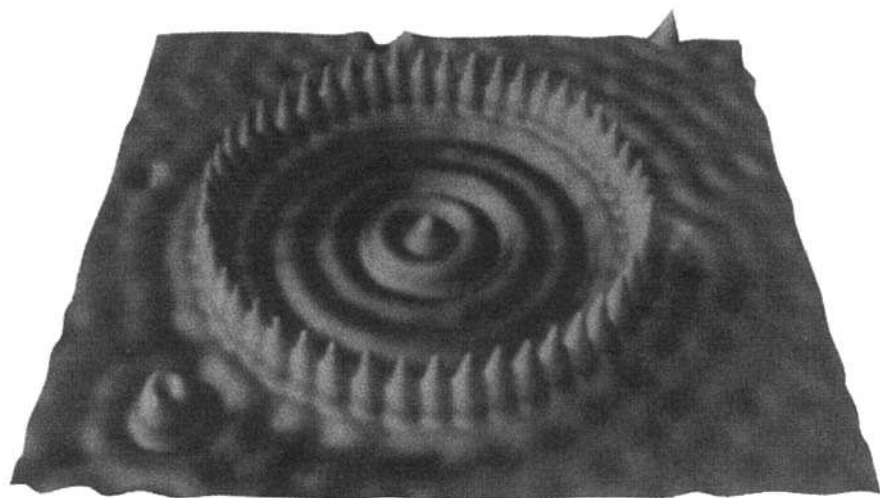


FIG. 9.16 – Dépôt d'atomes par microscope à effet tunnel. Des atomes de fer (les pics) sont disposés en cercle sur un substrat de cuivre et forment des états résonants électroniques (les vagues) sur la surface du cuivre. D'après un cliché IBM (droits réservés).

9.4.3 Matrice S

Au chapitre 12, nous étudierons la théorie de la diffusion dans l'espace à trois dimensions. Nous verrons qu'un outil important de cette théorie est la matrice S , que nous allons introduire dans le cas plus simple à une dimension. Nous supposons le potentiel de forme quelconque s'annulant⁹ dans la région $|x| > L$. Des sources de particules à $x = -\infty$ et $x = +\infty$ génèrent des ondes planes $\exp(ikx)$ et $\exp(-ikx)$ dans les régions $x < -L$ et $x > L$ respectivement : nous appellerons ces ondes les *ondes entrantes*. Ces ondes entrantes peuvent être réfléchies ou transmises et donner des ondes sortantes $\exp(-ikx)$ dans la région $x < -L$ et $\exp(ikx)$ dans la région $x > L$. Par définition, la matrice S relie les coefficients B et F des ondes sortantes aux coefficients A et G des ondes entrantes (cf. (9.85) et (9.87))

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad (9.109)$$

La matrice S peut bien sûr s'exprimer en fonction de M . Cependant, avant d'établir les formules de passage de M à S , il est instructif de répéter les raisonnements qui nous ont donné les propriétés générales de M .

(i) Conservation du courant

$$|A|^2 - |B|^2 = |F|^2 - |G|^2 \implies |A|^2 + |G|^2 = |B|^2 + |F|^2$$

Cette équation montre que S conserve la norme, et S est donc unitaire¹⁰.

(ii) $\varphi^*(x)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$\begin{pmatrix} A^* \\ G^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B^* \\ F^* \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = (S^*)^{-1} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}$$

d'où

$$S = (S^*)^{-1} = (S^{-1})^* = (S^\dagger)^* = S^T$$

La matrice S est symétrique : $S_{12} = S_{21}$. L'opération de conjugaison complexe échange les ondes entrantes et les ondes sortantes, ce qui correspond à renverser le sens du temps : la propriété de symétrie $S_{12} = S_{21}$ est donc liée à l'invariance par renversement du sens du temps.

Relions maintenant S et M sous la forme (9.95) en calculant le coefficient B

$$\begin{aligned} B &= S_{11}A + S_{12}G = S_{11}(\gamma F + \delta G) + S_{12}G \\ &= S_{11}\gamma F + (S_{11}\delta + S_{12})G \end{aligned}$$

9. On peut généraliser au cas d'un potentiel s'annulant suffisamment vite pour $x \rightarrow \pm\infty$.

10. Le raisonnement ne vaut que pour la dimension finie : nous avons seulement prouvé que S est une isométrie, ce qui suffit à en faire un opérateur unitaire en dimension finie. Il se trouve que S est unitaire même en dimension infinie, mais il faut un argument supplémentaire pour le prouver.

Par identification

(a)

$$S_{11}\gamma = \delta^* \quad S_{11} = \frac{\delta^*}{\gamma}$$

(b)

$$S_{12} + S_{11}\delta = \gamma^* \quad S_{12} = \gamma^* - S_{11}\delta = \frac{1}{\gamma}$$

soit

$$S = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} \delta^* & 1 \\ 1 & -\delta \end{pmatrix} \quad (9.110)$$

Si le potentiel est pair : $V(x) = V(-x)$, $\delta = i\eta$ avec η réel, et S devient

$$S = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} -i\eta & 1 \\ 1 & -i\eta \end{pmatrix} \quad (9.111)$$

Afin d'écrire S sous la forme la plus transparente possible, posons

$$\gamma = |\gamma|e^{-i\phi} \quad \frac{\eta}{|\gamma|} = \cos \theta \quad \frac{1}{|\gamma|} = \sin \theta$$

La matrice S prend la forme

$$S = -ie^{i\phi} \begin{pmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (9.112)$$

On ne peut cependant pas avoir $\theta = 0$, ce qui correspondrait à $|\gamma| \rightarrow \infty$. En revanche, il est possible d'avoir $\theta = \pm\pi/2$ si $\eta = 0$.

Un aspect intéressant de la matrice S est qu'elle permet de relier la diffusion aux états liés, et plus généralement aux résonances (exercice 12.5.4). Prenant un puits de potentiel de forme quelconque (mais tel que $V(x) = 0$ en dehors d'un intervalle fini pour simplifier la discussion), nous choisissons $E < 0$ avec $\kappa = -ik$ donné par (9.81). Les fonctions d'onde dans les régions I et III sont

$$\begin{array}{ll} \text{Région I} & \varphi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \\ \text{Région III} & \varphi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x} \end{array}$$

On doit avoir $A = G = 0$ pour que $\varphi(x)$ soit normalisable. Compte tenu de la relation (9.109), si l'on veut avoir $(B, F) \neq 0$, il faut que S ait un pôle¹¹ à $k = i\kappa$. Cette propriété est générale et on la vérifie sur le puits carré de la figure 9.11. D'après (9.96)

$$\gamma(i\kappa) = e^{-\kappa a} \left[\cos k'a - \frac{k'^2 - \kappa^2}{2\kappa k'} \sin k'a \right]$$

11. Ou plus généralement une singularité, mais on peut montrer qu'états liés et résonances correspondent à des pôles.

Comme S contient un facteur global $1/\gamma$ (cf. (9.111)), il faut que γ s'annule pour un état lié. Posant $v = \tan(k'a/2)$, l'équation $\gamma = 0$ est équivalente à

$$\kappa k' v^2 + v(k'^2 - \kappa^2) - \kappa k' = 0$$

dont les solutions sont $v = \kappa/k'$ et $v = -k'/\kappa$, c'est-à-dire précisément les relations (9.82) et (9.83) trouvées directement pour le puits carré fini.

9.5 Potentiel périodique

9.5.1 Théorème de Bloch

Comme dernier exemple de l'équation de Schrödinger à une dimension, considérons le cas d'un potentiel périodique de période spatiale l

$$V(x) = V(x + l) \quad (9.113)$$

Les résultats que nous obtiendrons sont d'une importance capitale en physique du solide : en effet un électron dans un réseau cristallin est soumis à un potentiel périodique – à trois dimensions, mais les résultats obtenus ci-dessous à une dimension se généralisent à trois dimensions –, provenant des interactions de cet électron avec les ions du réseau cristallin. La périodicité du potentiel conduit à l'existence de bandes d'énergie qui, jointes au principe de Pauli, sont à la base de notre compréhension de la conductibilité électrique. Si le potentiel a la forme (9.113), le problème est invariant par toute translation $x \rightarrow x + l$, et d'après le théorème de Wigner il existe un opérateur unitaire T_l agissant dans l'espace de Hilbert des états, en l'occurrence l'espace des fonctions d'onde $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$ tel que

$$(T_l \varphi)(x) = \varphi(x - l) \quad T_l^\dagger = T_l^{-1} \quad (9.114)$$

Rappelons que la fonction obtenue à partir de $\varphi(x)$ par une translation de l est $\varphi(x - l)$. Comme l'opérateur T_l est unitaire, ses valeurs propres t_l sont de module un et on peut les écrire en fonction d'un paramètre q

$$t_l(q) = e^{-iql} \quad (9.115)$$

Le paramètre q n'est défini qu'à un multiple entier près de $2\pi/l$: en effet, si

$$q \rightarrow q' = q + \frac{2\pi p}{l} \quad p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9.116)$$

la valeur de t_l est inchangée. Comme T_l commute avec le hamiltonien en raison de la périodicité (9.113) du potentiel, il est possible de diagonaliser simultanément T_l et H . Soit $\varphi_q(x)$ les fonctions propres communes de T_l et de H

$$\begin{aligned} T_l \varphi_q(x) &= t_l(q) \varphi_q(x) = e^{-iql} \varphi_q(x) \\ H \varphi_q(x) &= E_q \varphi_q(x) \end{aligned} \quad (9.117)$$

La première de ces équations montre que

$$\varphi_q(x-l) = e^{-iql} \varphi_q(x)$$

et nous en déduisons le *théorème de Bloch*¹² : les états stationnaires dans un potentiel périodique (9.113) sont de la forme

$$\varphi_q(x) = e^{iqx} u_{sq}(x) \quad u_{sq}(x) = u_{sq}(x+l) \quad (9.118)$$

où $u_{sq}(x)$ est une fonction périodique de période l . L'indice s est nécessaire, car à une valeur de q correspondent plusieurs solutions possibles : nous verrons que s indice les bandes d'énergie. Il est facile d'écrire l'équation différentielle que vérifie $u_{sq}(x)$: comme $P = -i\hbar d/dx$

$$\begin{aligned} P e^{iqx} &= \hbar q e^{iqx} \\ P \varphi_q(x) &= e^{iqx} (P + \hbar q) u_{sq}(x) \\ P^2 \varphi_q(x) &= e^{iqx} (P + \hbar q)^2 u_{sq}(x) \end{aligned}$$

d'où

$$H \varphi_q(x) = e^{iqx} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{\hbar^2 q}{m} \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + V(x) \right] u_{sq}(x) = E_{sq} e^{iqx} u_{sq}(x)$$

soit, en divisant par $\exp(iqx)$

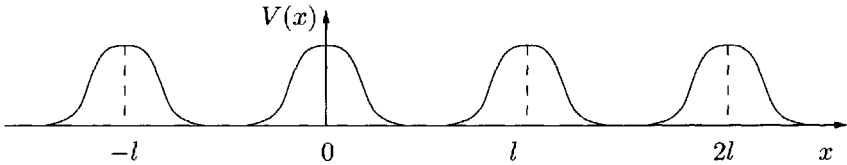
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{\hbar^2 q}{m} \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + V(x) \right] u_{sq}(x) = E_{sq} u_{sq}(x) \quad (9.119)$$

La fonction d'onde dans un potentiel périodique s'obtient en résolvant (9.119) par exemple dans l'intervalle $[0, l]$ avec la condition aux limites $u_{sq}(0) = u_{sq}(l)$. La quantité $\hbar q$ a les dimensions d'une impulsion et présente effectivement certaines analogies avec une impulsion. Cependant il ne s'agit pas d'une impulsion véritable, ne serait-ce que parce que suivant (9.116) q n'est pas unique : on appelle $\hbar q$ une *quasi-impulsion*. On remarque enfin que si le potentiel est pair, $V(x) = V(-x)$, l'équation (9.119) est inchangée dans les transformations simultanées $x \rightarrow -x$, $q \rightarrow -q$; $u_{s,-q}(x)$ est donc solution de (9.119) avec la même valeur de l'énergie, $E_{sq} = E_{s,-q}$, et tous les niveaux sont doublement dégénérés.

9.5.2 Bandes d'énergie

Examinons maintenant les propriétés des solutions de l'équation de Schrödinger (9.119) dans le potentiel périodique de la figure 9.17 : $V(x)$ est

12. Ce théorème est aussi connu sous le nom de théorème de Floquet quand on traite d'une périodicité temporelle.

FIG. 9.17 – Potentiel périodique de période l à une dimension.

une suite de crêneaux, et $V(x)$ est non nul dans des intervalles centrés autour de $x = pl$, $p = \dots, -2, -1, 0, 1, 2 \dots$ et s'annule dans les intervalles¹³

$$\left(p - \frac{1}{2}\right)l - \Delta x \leq x \leq \left(p - \frac{1}{2}\right)l + \Delta x \quad (9.120)$$

Dans les intervalles (9.120) où $V(x)$ s'annule, une solution $\varphi(x)$ de l'équation de Schrödinger est une superposition d'ondes planes de vecteur d'onde $\pm k$, $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$. À gauche du crêneau n et dans l'intervalle (9.120) pour $p = n$, $\varphi(x)$ s'écrit

$$\varphi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$$

et à droite de ce crêneau, dans l'intervalle (9.120) avec $p = n + 1$

$$\varphi(x) = A_{n+1} e^{ikx} + B_{n+1} e^{-ikx}$$

Les coefficients (A_n, B_n) sont reliés aux coefficients (A_{n+1}, B_{n+1}) suivant (9.94) par la matrice de passage M (9.95) correspondant au crêneau $V(x)$

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (9.121)$$

D'autre part, compte tenu du théorème de Bloch (9.118)

$$\varphi(x + l) = e^{iq l} \varphi(x)$$

et nous avons

$$A_{n+1} e^{ikl} e^{ikx} + B_{n+1} e^{-ikl} e^{-ikx} = e^{iq l} (A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx})$$

soit

$$e^{iq l} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikl} A_{n+1} \\ e^{-ikl} B_{n+1} \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = D M^{-1} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (9.122)$$

13. En fait, il n'est pas nécessaire de supposer cette annulation pour obtenir les résultats qui vont suivre, mais cette supposition simplifie l'argument.

D est la matrice diagonale d'éléments $D_{11} = \exp(ikl)$, $D_{22} = \exp(-ikl)$ et

$$DM^{-1} = \begin{pmatrix} \gamma^* e^{ikl} & -\delta e^{ikl} \\ -\delta^* e^{-ikl} & \gamma e^{-ikl} \end{pmatrix} \quad (9.123)$$

L'équation (9.122) implique que (A_n, B_n) est vecteur propre de la matrice $\tilde{M} = DM^{-1}$ avec la valeur propre $\exp(ikl)$, qui est de module un. L'équation aux valeurs propres λ pour la matrice $\tilde{M}$ est ($\det \tilde{M} = 1$)

$$\lambda^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(\gamma^* e^{ikl}) + 1 = 0$$

et posant $x = \operatorname{Re}(\gamma^* \exp(ikl))$, les valeurs propres $\lambda_{\pm}$ sont données par

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= x \pm \sqrt{x^2 - 1} & |x| > 1 \\ \lambda_{\pm} &= x \pm i\sqrt{1 - x^2} & |x| \leq 1 \end{aligned}$$

Le cas $|x| > 1$ est exclu car les racines ne peuvent pas être de module un : leur produit est égal à un et elles sont réelles. En revanche, les deux racines complexes sont bien de module un pour $|x| \leq 1$; elles sont non dégénérées si $|x| < 1$ et dégénérées si $|x| = 1$.

Pour étudier les valeurs propres de l'énergie, nous pourrions prendre comme exemple la barrière carrée $V(x)$ (9.99) de la figure 9.13. Afin de simplifier au maximum les calculs, nous allons examiner un cas limite de (9.99), le créneau en fonction delta. Les résultats que nous obtiendrons se généralisent qualitativement à tout potentiel périodique. Le potentiel périodique (9.113) est donc

$$V(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x - lp) \quad (9.124)$$

Un potentiel en fonction delta est obtenu en prenant la limite $a \rightarrow 0$ de la barrière carrée (9.99) en maintenant constant le produit $V_0 a$

$$V_0 a = \frac{\hbar^2 g}{2m}$$

Le facteur arbitraire $\hbar^2/2m$ est choisi de façon à simplifier les formules ultérieures. Compte tenu de $V_0 \gg E$, κ (9.100) prend la valeur limite

$$\kappa \rightarrow \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{g}{a}}$$

ce qui donne

$$\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \rightarrow \frac{\kappa}{2k} = \frac{\sqrt{g/a}}{2k}$$

tandis que $\gamma = M_{11}$ dans (9.102) devient (cf. également l'exercice 9.7.7)

$$\gamma \rightarrow 1 + i \frac{\sqrt{g/a}}{2k} \sqrt{ga} = 1 + i \frac{g}{2k} \quad (9.125)$$

On en déduit

$$x = \operatorname{Re}(\gamma^* e^{ikl}) = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

et l'équation aux valeurs propres s'écrit

$$x = \cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl \quad (9.126)$$

Notons que q n'est pas fixé de façon unique par (9.126) : $q' = q + 2\pi p/l$ avec p entier vérifie aussi (9.126). Cette équation montre que certains intervalles en k , et donc certaines zones d'énergie puisque $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, sont exclus parce que le membre de droite de (9.126) peut être plus grand que un en module : ces zones sont appelées *bandes interdites*. Montrons-le explicitement dans la région $k \simeq 0$. Posons $y = kl$ et

$$f(y) = \cos y + \frac{gl}{2y} \sin y$$

Comme $f(0) = 1 + gl/2$, on voit qu'un intervalle $0 \leq y < y_0$ ou $0 \leq k < k_0$ est interdit. Supposant $gl \ll 1$ pour une estimation analytique, on trouve

$$y_0 \simeq \sqrt{gl} \quad \text{ou} \quad k_0 \simeq \sqrt{g/l}$$

Il existe d'autres zones interdites : en effet si

$$y = n\pi + \varepsilon \quad |\varepsilon| \ll 1$$

alors

$$|f(y)| \simeq 1 + \frac{gl}{2y} \varepsilon$$

et on met en évidence une région interdite où $|f(y)| > 1$ pour $0 < \varepsilon \ll 1$. Ces remarques permettent de tracer qualitativement la courbe $f(y)$ sur la figure 9.18. On porte conventionnellement E en fonction de q (rappelons que $\hbar q$ est la quasi-impulsion), ce qui donne la figure 9.19 où l'on distingue les bandes permises indicées par s . Compte tenu de (9.116), on peut restreindre q à l'intervalle $[0, 2\pi/l]$, ou de façon équivalente à l'intervalle $[-\pi/l, \pi/l]$, qui est appelé *première zone de Brillouin*. Dans certaines régions on peut exprimer simplement E en fonction de q . Examinons par exemple la région $k \simeq k_0$. Comme $\cos ql = 1$ pour $k = k_0$, (9.126) devient, compte tenu de $f(k_0 l) = 1$

$$-\frac{1}{2} q^2 l^2 \simeq (k - k_0) l f'(k_0 l)$$

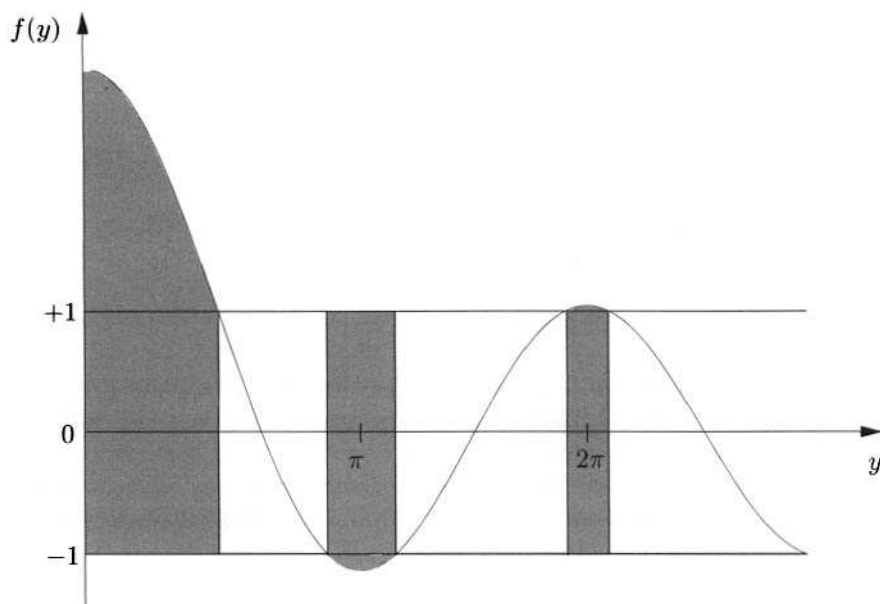
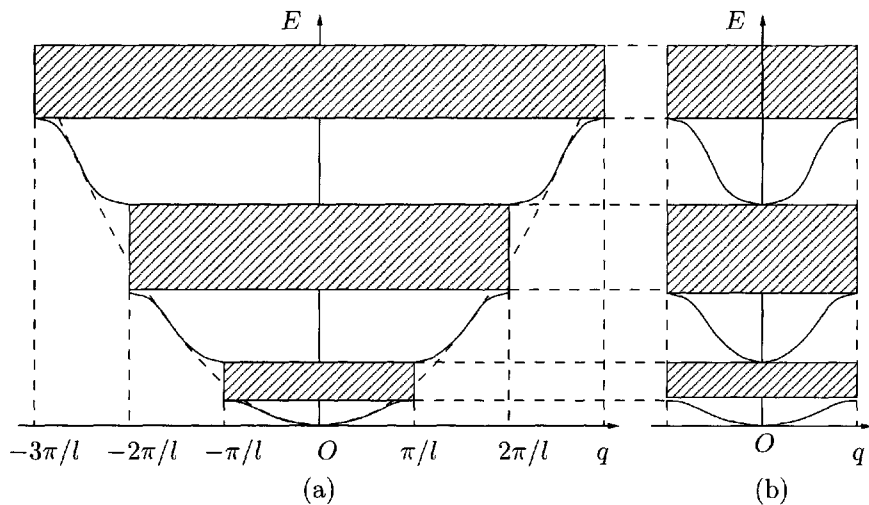


FIG. 9.18 – Solutions de (9.126).

FIG. 9.19 – Bandes d'énergie : (a) q varie sans restrictions (b) q est limité à la première zone de Brillouin.

Ceci permet d'estimer $(E - E_0)$

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_0^2) \simeq \frac{\hbar^2 k_0 (k - k_0)}{m}$$

soit

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 l k_0}{2m|f'(k_0 l)|} q^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} q^2 \quad (9.127)$$

Au voisinage de $k = k_0$, le comportement de l'énergie est celui d'une particule de masse effective m^*

$$m^* = \frac{m|f'(k_0 l)|}{l k_0} \quad (9.128)$$

Cette masse effective joue un grand rôle dans la théorie de la conductibilité électrique : en première approximation, l'effet du réseau cristallin se traduit par un simple changement de la masse.

9.6 Mécanique ondulatoire en dimension $d = 3$

9.6.1 Généralités

Soit $\vec{R}$ et $\vec{P}$ les opérateurs position et impulsion dans l'espace à trois dimensions, de composantes¹⁴ X_j et P_j , $j = x, y, z$. Rappelons les relations de commutation canoniques (8.45)

$$[X_j, P_k] = i\hbar \delta_{jk} I \quad (9.129)$$

Les composantes de $\vec{R}$ et de $\vec{P}$ commutent si $j \neq k$. On peut donc construire l'espace des états comme produit tensoriel des espaces $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$, $L_y^{(2)}(\mathbb{R})$ et $L_z^{(2)}(\mathbb{R})$

$$L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3) = L_x^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes L_y^{(2)}(\mathbb{R}) \otimes L_z^{(2)}(\mathbb{R}) \quad (9.130)$$

Dans cet espace la composante X de $\vec{R}$ sera l'opérateur

$$X \otimes I_y \otimes I_z$$

Si $\varphi_n(x)$ est une base orthonormée de $L_x^{(2)}(\mathbb{R})$, on construit une base $\varphi_{nlm}(x, y, z)$ de $L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$ en prenant les produits¹⁵

$$\varphi_{nlm}(x, y, z) = \varphi_n(x) \varphi_m(y) \varphi_l(z) \quad (9.131)$$

La construction de l'espace des états et des bases orthonormées est strictement parallèle à celle de l'espace des états de deux spins 1/2. Nous avons observé au § 6.1.2 que le vecteur d'état le plus général de l'espace des états de deux spins 1/2 n'est pas en général le produit tensoriel $|\varphi_1 \otimes \varphi_2\rangle$ de deux vecteurs d'état de spins individuels. De la même façon, une fonction $\psi(x, y, z)$ de

14. Les composantes de $\vec{R}$ seront aussi notées (X, Y, Z) et celles de $\vec{r}$ (x, y, z) .

15. Pour la simplicité de l'écriture nous avons pris les mêmes fonctions de base dans les espaces (x, y, z) , mais nous aurions bien sûr pu choisir trois bases différentes.

$L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$ n'est pas en général un produit $\varphi(x)\chi(y)\eta(z)$, mais $\psi(x, y, z)$ peut se décomposer sur la base (9.131)

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n, m, l} c_{nlm} \varphi_n(x) \varphi_m(y) \varphi_l(z) \quad (9.132)$$

$$c_{nlm} = \int d^3r \varphi_n^*(x) \varphi_m^*(y) \varphi_l^*(z) \psi(x, y, z) \quad (9.133)$$

Il est immédiat d'écrire la généralisation à trois dimensions des formules de la section 9.1. Nous nous contentons de donner quelques exemples, en laissant au lecteur le soin d'établir les autres formules.

- États propres $|\vec{r}\rangle$ de $\vec{R}$

$$\vec{R} |\vec{r}\rangle = \vec{r} |\vec{r}\rangle \quad (9.134)$$

- Relation de fermeture (cf. (9.9))

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = I \quad (9.135)$$

- Amplitude de probabilité $\varphi(\vec{r})$ pour trouver une particule dans l'état $|\varphi\rangle$ au point $\vec{r}$, ou fonction d'onde de la particule

$$\varphi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi \rangle \quad (9.136)$$

- Densité de probabilité de présence : $|\varphi(\vec{r})|^2 d^3r$ est la probabilité de trouver la particule dans le volume d^3r autour du point $\vec{r}$.
- Action des opérateurs $\vec{R}$ et $\vec{P}$ sur $\varphi(\vec{r})$ (cf. (9.14) et (9.16))

$$\boxed{\left(\vec{R}\varphi \right)(\vec{r}) = \vec{r}\varphi(\vec{r}) \quad \left(\vec{P}\varphi \right)(\vec{r}) = -i\hbar \vec{\nabla}\varphi(\vec{r})} \quad (9.137)$$

- Transformée de Fourier

$$\boxed{\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}} \quad (9.138)$$

On notera le facteur $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ pour chaque dimension d'espace.

Nous avons établi au § 8.4.2 la forme générale du hamiltonien en dimension $d = 3$. Dans la suite de cette section, nous supposons que $\vec{A}$ est un gradient : $\vec{A} = \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r})$. Physiquement cela veut dire qu'il n'y a pas de champ magnétique ; le cas d'un champ magnétique non nul sera étudié dans la section 11.3. Le hamiltonien (8.74) est simplement

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (9.139)$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps¹⁶ qui généralise (9.57) à trois dimensions est

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{R}) \right) \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (9.140)$$

La généralisation du courant (9.63) est

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\frac{\hbar}{im} \varphi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, t) \right] \quad (9.141)$$

qui vérifie l'équation de continuité (exercice 9.7.10)

$$\frac{\partial |\varphi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (9.142)$$

9.6.2 Espace de phase et densité de niveaux

Dans de nombreux problèmes, il est nécessaire de savoir compter le nombre de niveaux d'énergie dans une certaine région de l'espace $(\vec{r}, \vec{p})$: cet espace est appelé *espace de phase*. Revenons au puits infini du § 9.3.3 en appelant L_x la largeur du puits. Les niveaux d'énergie sont étiquetés par un entier positif n , et nous allons nous intéresser au cas où $n \gg 1$ et où L_x est grand : les niveaux d'énergie (9.79) sont alors très resserrés et on pourra remplacer les sommes sur n par des intégrales. Soit un vecteur d'onde (9.78) $k_n = \pi(n+1)/L_x$. Calculons le nombre de niveaux d'énergie dans l'intervalle en k : $[k_n, k_n + \Delta k]$. D'après (9.78) avec $a \rightarrow L_x$, le nombre de niveaux Δn ($1 \ll \Delta n \ll n$) dans l'intervalle $[k, k + \Delta k]$ est

$$\Delta n = \frac{L_x}{\pi} \Delta k \quad (9.143)$$

Au lieu des conditions d'annulation de la fonction d'onde aux points $x = 0$ et $x = L_x$, il est souvent plus commode de choisir des *conditions aux limites périodiques* : $\varphi(0) = \varphi(L_x)$, soit pour les fonctions d'onde¹⁷

$$\varphi_n(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_n x} \quad k_n = \frac{2\pi n}{L_x} \quad n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (9.144)$$

et par conséquent

$$\Delta n = \frac{L_x}{2\pi} \Delta k \quad (9.145)$$

16. Nous laissons au lecteur le soin d'écrire l'équation de Schrödinger dépendant du temps qui généralise (9.55) à trois dimensions.

17. Ce choix de fonction d'onde est parfois appelé « quantification dans une boîte ». Il évite de travailler avec les ondes planes du spectre continu, puisque les « ondes planes » (9.144) sont normalisables. Cependant les intégrales de Fourier sont alors remplacées par des sommes de Fourier, ce qui alourdit les calculs.

À première vue (9.145) diffère¹⁸ de (9.143) par un facteur $1/2$. Cependant nous avons déjà observé qu'avec les fonctions d'onde (9.78), les valeurs k_n et $-k_n$ correspondent au même état physique car la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ conduit à un simple changement de signe de la fonction d'onde. En revanche, la substitution $k_n \rightarrow -k_n$ dans (9.144) conduit à un état physique différent : la division par deux dans (9.145) est compensée par le doublement du nombre de valeurs possibles de k_n . Pour compter les niveaux d'énergie, il est équivalent de choisir les conditions aux limites périodiques ou les conditions d'annulation (voir aussi la note 19).

Passons au puits carré infini en dimension $d = 3$: les fonctions d'onde s'annulent en dehors des intervalles où $V(\vec{x}) = 0$

$$0 \leq x \leq L_x \quad 0 \leq y \leq L_y \quad 0 \leq z \leq L_z \quad (9.146)$$

Ces fonctions d'onde sont de la forme

$$\begin{aligned} \varphi_{[n_x, n_y, n_z]}(x, y, z) = & \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi(n_x + 1)x}{L_x}\right) \\ & \times \sin\left(\frac{\pi(n_y + 1)y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_z + 1)z}{L_z}\right) \end{aligned} \quad (9.147)$$

avec $(n_x, n_y, n_z) = 0, 1, 2, \dots$. Les valeurs correspondantes de l'énergie sont

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{(n_x + 1)^2}{L_x^2} + \frac{(n_y + 1)^2}{L_y^2} + \frac{(n_z + 1)^2}{L_z^2} \right) \quad (9.148)$$

Lorsque $L_x = L_y = L_z = L$, ces valeurs propres sont en général dégénérées (exercice 9.7.9).

Effectuons le décompte des niveaux à trois dimensions. Il sera commode d'utiliser des conditions aux limites périodiques

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x + L_x, y + L_y, z + L_z) \quad (9.149)$$

Soit $\Delta\mathcal{K}$ l'élément de volume $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ de l'espace des $\vec{k}$, tel que l'extrémité du vecteur d'onde $\vec{k}$ se trouve dans $\Delta\mathcal{K}$: les composantes (x, y, z) de ce vecteur sont comprises dans les intervalles

$$[k_x, k_x + \Delta k_x], [k_y, k_y + \Delta k_y], [k_z, k_z + \Delta k_z]$$

Le nombre de niveaux d'énergie dans $\Delta\mathcal{K}$ s'obtient en généralisant (9.145)

$$\Delta n = \left(\frac{L_x}{2\pi}\right) \Delta k_x \left(\frac{L_y}{2\pi}\right) \Delta k_y \left(\frac{L_z}{2\pi}\right) \Delta k_z = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \Delta\mathcal{K} \quad (9.150)$$

18. Comme $n \gg 1$, on fait pas de différence entre n et $(n + 1)$.

Prenant $\Delta\mathcal{K}$ infinitésimal, $\Delta\mathcal{K} = d^3k$, on définit la *densité de niveaux* (ou *densité d'états*) $\mathcal{D}(\vec{k})$ dans l'espace des $\vec{k}$ comme suit : $\mathcal{D}(\vec{k})d^3k$ est le nombre de niveaux dans le volume d^3k centré en $\vec{k}$. D'après (9.150)

$$\mathcal{D}(\vec{k})d^3k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d^3k \quad (9.151)$$

où $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$ est le volume de la boîte de côtés $(L_x, L_y, L_z)^{19}$. Compte tenu de $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, la densité de niveaux²⁰ dans l'espace des $\vec{p}$ est

$$\mathcal{D}(\vec{p}) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\mathcal{V}}{h^3} \quad (9.152)$$

Ce résultat est fondamental. On en déduit la densité de niveaux par unité d'énergie²¹ ; comme $\mathcal{D}(\vec{p})$ dépend seulement de $p = |\vec{p}|$

$$\mathcal{D}(p) = \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar^3)^3} p^2 = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} p^2 \quad (9.153)$$

La densité de niveaux par unité d'énergie $\mathcal{D}(E)$ est

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} p^2 \frac{dp}{dE} = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2\hbar^3} mp$$

ou

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}m}{2\pi^2\hbar^3} (2mE)^{1/2} \quad (9.154)$$

Le nombre de niveaux dans $[E, E + dE]$ est $\mathcal{D}(E)dE$. On peut également calculer $\mathcal{D}(E)$ à partir de $\Phi(E)$, qui est le nombre de niveaux d'énergie inférieure à E : $\mathcal{D}(E) = \Phi'(E)$ (exercice 9.7.11). La quantité $\mathcal{D}/\mathcal{V}$ est la densité de niveaux par unité de volume, qui est indépendante du volume.

En remarquant que $\mathcal{V} = \int_V d^3r$, on déduit de (9.152) que le nombre de niveaux dans $d^3r d^3p$ est

$$dN = \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d^3r d^3p}{h^3} \quad (9.155)$$

19. Le résultat est aussi valable pour une boîte qui n'est pas un parallélépipède. Les termes correctifs sont en puissance de $(kL)^{-1}$, où L est une dimension caractéristique de la boîte. Le premier terme correctif représente un terme de surface. La différence entre conditions aux limites périodiques et conditions d'annulation, qui est un effet de surface, se traduit aussi par ce type de correction. Ces corrections sont négligeables dans une boîte suffisamment grande.

20. En toute rigueur nous devrions utiliser une notation différente pour les différentes densités de niveaux ; nous avons utilisé la même lettre $\mathcal{D}$ dans tous les cas afin de ne pas multiplier à l'excès les notations.

21. Avec des conditions d'annulation de la fonction d'onde, il s'introduirait un facteur $1/8$ dans (9.151) pour tenir compte du fait que les composantes de $\vec{k}$ sont positives. Le résultat final serait toutefois identique, à cause du facteur $1/2$ de différence entre (9.143) et (9.145) : $(1/2)^3 = 1/8$.

$d^3r d^3p$ est un volume infinitésimal de l'espace de phase $(\vec{r}, \vec{p})$. On peut interpréter (9.155) de la façon suivante : *le volume élémentaire de l'espace de phase est h^3 , dans le sens où l'on peut placer un niveau d'énergie par volume élémentaire.* L'inégalité de Heisenberg permet de le comprendre : si une particule est confinée dans un intervalle Δx , son impulsion $p \sim h/\Delta x$. Ce résultat s'exprime sous forme imagée : alors qu'une particule classique dont l'état est défini par sa position $\vec{r}$ et son impulsion $\vec{p}$ occupe un point $(\vec{r}, \vec{p})$ dans l'espace de phase, une particule quantique doit occuper au minimum un volume $\sim h^3$.

Les résultats (9.153) ou (9.154) sont d'une importance capitale en mécanique statistique quantique : la probabilité qu'un système à l'équilibre thermique ait une énergie E (voir (1.12) et la note 16 du chapitre 1) est

$$p(E) = \mathcal{N} \mathcal{D}(E) e^{-\beta E}$$

où $\mathcal{N}$ est une constante de normalisation fixée par

$$\int dE p(E) = 1$$

9.6.3 Règle d'or de Fermi

La notion de densité de niveaux va nous permettre de montrer une des formules les plus importantes de la physique quantique, la *règle d'or de Fermi*, qui permet de calculer les probabilités de transition vers les états de diffusion, aussi appelés états du continu car appartenant au spectre continu d'un hamiltonien, dans le cas présent le hamiltonien $H^{(0)}$ (9.156). Considérons un système physique régi par le hamiltonien $H(t)$ dépendant du temps

$$H(t) = H^{(0)} + W(t) \quad (9.156)$$

où $H^{(0)}$ est indépendant du temps et de spectre supposé connu : les valeurs propres de l'énergie sont E_n et les vecteurs propres $|n\rangle$

$$H^{(0)}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (9.157)$$

Nous nous proposons de résoudre le problème suivant : au temps $t = 0$, le système est dans l'état initial $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$, état propre de $H^{(0)}$ d'énergie E_i , et nous voulons calculer la probabilité $p_{i \rightarrow f}(t)$ de le trouver au temps t dans l'état propre $|f\rangle$ de $H^{(0)}$ d'énergie E_f . Pour ce faire, nous devons obtenir le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système au temps t , puisque

$$p_{i \rightarrow f}(t) = |\langle f|\psi(t)\rangle|^2 \quad \text{avec} \quad |\psi(t=0)\rangle = |i\rangle \quad (9.158)$$

Nous avons déjà rencontré ce problème dans un cas simple : nous avons calculé au chapitre 5 la probabilité de transition d'un niveau à l'autre de la molécule d'ammoniac plongée dans un champ électromagnétique oscillant.

Le hamiltonien (9.156) généralise (5.27), $H^{(0)}$ étant l'analogie de (5.18). Nous suivrons la méthode du § 5.2.2 en l'adaptant à un nombre de niveaux quelconque. Généralisant (5.28), nous décomposons le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ sur la base $|l\rangle$ d'états propres de $H^{(0)}$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_l c_l(t) |l\rangle \quad (9.159)$$

Multipliant à gauche l'équation (9.159) par le bra $\langle n|H^{(0)}$ conduit à

$$\begin{aligned} \langle n|H^{(0)}|\psi(t)\rangle &= \sum_l \langle n|H^{(0)}|l\rangle \langle l|\psi(t)\rangle = \sum_l H_{nl}^{(0)} c_l(t) \\ &= E_n \langle n|\psi(t)\rangle = c_n(t) E_n \end{aligned} \quad (9.160)$$

Le système d'équations différentielles auquel obéissent les coefficients $c_n(t)$ est d'après (4.13)

$$i\hbar \dot{c}_n(t) = \sum_l \left(H_{nl}^{(0)} + W_{nl}(t) \right) c_l(t) \quad (9.161)$$

Continuant à suivre la méthode du § 5.2.2, on élimine la dépendance triviale en t : $\exp(-iE_n t/\hbar)$ de $c_n(t)$ induite par l'évolution temporelle due à $H^{(0)}$ en posant

$$c_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \gamma_n(t) \quad (9.162)$$

ce qui transforme (9.161) en

$$i\hbar \dot{\gamma}_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} + E_n c_n(t) = \sum_l H_{nl}^{(0)} c_l(t) + \sum_l W_{nl}(t) \gamma_l(t) e^{-iE_l t/\hbar}$$

Compte tenu de (9.160), cette équation se simplifie en

$$i\hbar \dot{\gamma}_n(t) = \sum_l W_{nl} e^{i\omega_{nl} t} \gamma_l(t) \quad \omega_{nl} = \frac{E_n - E_l}{\hbar} \quad (9.163)$$

Le système d'équations différentielles (9.163) généralise (5.30) ; les équations sont exactes, mais ne sont pas solubles analytiquement, sauf cas particulier. Il faut avoir recours à des approximations : nous allons suivre une méthode appelée la *théorie des perturbations dépendant du temps*. Il est commode d'introduire un paramètre réel λ , $0 \leq \lambda \leq 1$, qui multiplie la perturbation W : $W \rightarrow \lambda W$, ce qui permet de faire varier artificiellement la perturbation²². La théorie des perturbations consiste à obtenir une solution approchée de l'équation de Schrödinger sous forme d'un développement en puissances de λ et on rétablit $\lambda = 1$ à la fin des calculs. Dans ce qui suit, nous allons nous

22. Si la perturbation est due à l'interaction avec un champ extérieur, on peut la faire varier en ajustant ce champ.

contenter du premier ordre²³ en λ . Au temps $t = 0$, le système est supposé dans l'état $|i\rangle$

$$\gamma_n(0) = \delta_{ni}$$

Écrivons

$$\gamma_n(t) = \delta_{ni} + \gamma_n^{(1)}(t)$$

Lorsque t est suffisamment petit, $|\gamma_n^{(1)}(t)| \ll 1$ car le système n'a pas eu le temps d'évoluer de façon appréciable. L'équation (9.163) devient en introduisant le paramètre λ

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\delta_{ni} + \gamma_n^{(1)}(t) \right) = \sum_l \lambda W_{nl}(t) \left[\delta_{li} + \gamma_l^{(1)}(t) \right] e^{i\omega_{nl}t}$$

On observe que $\gamma_l^{(1)}(t)$ est d'ordre λ , et que le terme $\sum_l \lambda W_{nl}(t) \gamma_l^{(1)}(t)$ sera donc d'ordre λ^2 . Ce terme est négligeable au premier ordre en λ , ce qui donne en rétablissant $\lambda = 1$

$$i\hbar \dot{\gamma}_n^{(1)}(t) \simeq W_{ni}(t) e^{i\omega_{ni}t} \quad (9.164)$$

Un cas particulier important est celui du potentiel oscillant

$$W(t) = A e^{-i\omega t} + A^\dagger e^{i\omega t} \quad (9.165)$$

où A est un opérateur. C'est par exemple ce type de potentiel qui décrit l'interaction d'un atome avec un champ électromagnétique oscillant

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} + \mathcal{E}_0^* e^{i\omega t}$$

Si nous nous intéressons comme au chapitre 5 à la transition $i \rightarrow f$ vers un niveau final $|f\rangle$ bien déterminé, l'amplitude de probabilité $\langle f|\psi(t)\rangle$ est donnée à un facteur de phase près par $\gamma_f(t) \simeq \gamma_f^{(1)}(t)$ qui est solution l'équation différentielle (9.164)

$$i\hbar \dot{\gamma}_f^{(1)}(t) = A_{fi} e^{-i(\omega - \omega_0)t} + A_{if}^* e^{i(\omega + \omega_0)t} \quad (9.166)$$

avec $\omega_0 = \omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$. Cette équation différentielle s'intègre immédiatement car les coefficients $A_{fi} = \langle f|A|i\rangle$ sont indépendants du temps

$$\gamma_f^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \left[A_{fi} \frac{e^{-i(\omega - \omega_0)t} - 1}{\omega - \omega_0} - A_{if}^* \frac{e^{i(\omega + \omega_0)t} - 1}{\omega + \omega_0} \right] \quad (9.167)$$

Cette amplitude de probabilité sera importante si $\omega \simeq \pm \omega_0$, c'est-à-dire, comme au chapitre 5, à la résonance. Dans le cas $\omega \simeq \omega_0$

$$E_f \simeq E_i + \hbar\omega$$

23. La complexité des formules augmente très rapidement avec la puissance de λ .

et le système absorbe une énergie $\hbar\omega$: s'il s'agit de l'interaction avec une onde électromagnétique, il absorbe un photon d'énergie $\hbar\omega$. Dans le cas $\omega \simeq -\omega_0$

$$E_f \simeq E_i - \hbar\omega$$

et le système fournit une énergie $\hbar\omega$, par exemple en émettant un photon d'énergie $\hbar\omega$. Pour fixer les idées, examinons le premier cas. La probabilité de transition $p_{i \rightarrow f}(t)$ vaut

$$p_{i \rightarrow f}(t) = |\gamma_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |A_{fi}|^2 t^2 f(\omega - \omega_0; t) \quad (9.168)$$

où la fonction f a été définie en (5.41)

$$f(\omega - \omega_0; t) = \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \simeq \frac{2\pi}{t} \delta(\omega - \omega_0) \quad (9.169)$$

On retrouve les résultats du § 5.2.4 dans un cas plus général. Compte tenu des approximations, une condition nécessaire pour la validité de (9.168) est que $p_{i \rightarrow f}(t) \ll 1$. En utilisant la forme approchée de f , on observe que la probabilité est proportionnelle à t , et que l'on peut donc définir une *probabilité de transition par unité de temps*

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{1}{t} p_{i \rightarrow f}(t)$$

Cependant, il est en général impossible d'isoler une transition vers un état f particulier, et on s'intéresse le plus souvent à une transition vers un ensemble d'états finaux d'énergie voisine

$$\Gamma = \sum_f \Gamma_{i \rightarrow f}$$

La sommation sur f est équivalente à une intégration sur l'énergie si on tient compte de la densité de niveaux $\mathcal{D}(E)$

$$\sum_f \rightarrow \int dE \mathcal{D}(E)$$

Par exemple, si l'état final correspond à celui d'une particule et si $|A_{fi}|^2$ est isotrope, la densité de niveaux sera donnée par (9.154). Si $|A_{fi}|^2$ n'est pas isotrope, et dépend par exemple de la direction de l'impulsion $\vec{p}$ de la particule finale, on utilisera

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}m}{2\pi^2\hbar^3} (2mE)^{1/2} \frac{d\Omega}{4\pi}$$

où Ω repère la direction de $\vec{p}$. Compte tenu de (9.168) et (9.169), l'expression de Γ est

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{1}{\hbar^2} \int dE |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E) t \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{[(\omega - \omega_0)t/2]^2} \\ &\simeq \frac{1}{\hbar} \int dE |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E) 2\pi \delta(E - (E_i + \hbar\omega)) \end{aligned}$$

En effectuant l'intégrale on obtient la règle d'or de Fermi

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E_f) \quad E_f = E_i + \hbar\omega \quad (9.170)$$

Cette équation est aussi valable dans le cas d'émission d'énergie, en prenant $E_f = E_i - \hbar\omega$, et aussi pour un potentiel $V(t)$ constant, avec $E_f = E_i$ (exercice 9.7.12).

Les conditions de validité du calcul sont les suivantes.

- Il est nécessaire que la probabilité de trouver le système dans l'état initial (i) soit proche de un, soit

$$\sum_{f \neq i} p_{i \rightarrow f}(t) \ll 1 \quad \text{ou, en termes de } \Gamma_{i \rightarrow f} : \left(\sum_{f \neq i} \Gamma_{i \rightarrow f} \right) t \ll 1$$

ce qui implique que t doit être suffisamment court : $t \ll \tau_2$.

- Dans l'intégrale sur l'énergie E , on doit pouvoir remplacer $f(\omega - (E - E_i)/\hbar; t)$ par une fonction delta

$$\int dE g(E) f\left(\omega - \frac{E - E_i}{\hbar}; t\right) \rightarrow \int d\omega g(E) \frac{2\pi}{t} \delta(E - \hbar\omega_0) = \frac{2\pi}{t} g(E_f)$$

Si ΔE est l'intervalle caractéristique de variation de $g(E) = |A_{fi}|^2 \mathcal{D}(E)$, le temps $\tau_1 = \hbar/\Delta E$ doit être petit par rapport à t : $t \gg \tau_1$.

En résumé, il faut que t vérifie l'encadrement $\tau_1 \ll t \ll \tau_2$. Lorsque la condition $t \ll \tau_2$ n'est pas satisfaite, on peut parfois utiliser l'approximation résonante en se ramenant à un problème à deux niveaux, pour lequel il existe une solution exacte (exercice 9.7.12).

Une application importante de la règle d'or de Fermi est la désintégration d'un état instable i (état excité d'un atome ou d'un noyau, particule instable...) vers un continuum d'états f . La perturbation est alors indépendante du temps et $E_f \simeq E_i$ dans (9.170). Pour des temps suffisamment courts, la probabilité de trouver le système dans l'état initial instable i est

$$p_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \simeq e^{-\Gamma t} \quad t \ll \tau_2 \quad (9.171)$$

et il est tentant d'identifier Γ à l'inverse de la vie moyenne τ : $\Gamma = \hbar/\tau$. Le calcul que nous venons d'effectuer ne nous permet pas cette identification, car il n'est pas *a priori* valable quel que soit t . On peut cependant généraliser la loi exponentielle (9.171) pour des temps longs, grâce à une méthode due à Wigner et Weisskopf décrite à l'appendice C. Cette méthode montre que la dispersion en énergie ΔE sur l'énergie E_f des états finaux est $\Delta E = \hbar\Gamma/2$, ce qui donne l'inégalité de Heisenberg temporelle (4.27) et son interprétation correcte dans ce cas

$$\tau \Delta E = \frac{\hbar}{2} \quad (9.172)$$

9.7 Exercices

9.7.1 Inégalités de Heisenberg

1. Soit $\varphi(x)$ une fonction de carré sommable normalisée à l'unité et $I(\alpha)$ la quantité positive ou nulle

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| x\varphi(x) + \alpha \frac{d\varphi}{dx} \right|^2 \geq 0$$

α étant un nombre réel. En intégrant par parties, montrer que

$$I(\alpha) = \langle X^2 \rangle - \alpha + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$$

où $K = -i\hbar/dx$ et

$$\langle X^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\varphi(x)|^2 \quad \langle K^2 \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2 \varphi}{dx^2}$$

En déduire

$$\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$$

2. Comment faut-il modifier le raisonnement de la question précédente pour obtenir l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}?$$

Montrer que $\Delta x \Delta k = 1/2$ implique que $\varphi(x)$ est une gaussienne

$$\varphi(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma^2 x^2\right).$$

9.7.2 Étalement du paquet d'ondes

1. Montrer que $[P^2, X] = -2i\hbar P$

2. Soit $\langle X^2 \rangle(t)$ la position quadratique moyenne dans l'état $|\varphi(t)\rangle$

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle \varphi(t) | X^2 | \varphi(t) \rangle$$

Montrer que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X^2 \rangle(t) &= \frac{1}{m} \langle PX + XP \rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left[\varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

Ces résultats sont-ils valables si le potentiel $V(x) \neq 0$?

3. Montrer que si la particule est libre ($V(x) = 0$)

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle X^2 \rangle(t) = \frac{2}{m^2} \langle P^2 \rangle = 2v_1^2 = \text{cste}$$

4. Dédurre de ces résultats

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle X^2 \rangle(t=0) + \xi_0 t + v_1^2 t^2 \quad \xi_0 = \left. \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} \right|_{t=0}$$

ainsi que l'expression de $(\Delta x(t))^2$

$$(\Delta x(t))^2 = (\Delta x(t=0))^2 + [\xi_0 - 2v_0 \langle X \rangle(t=0)]t + (v_1^2 - v_0^2)t^2$$

avec $v_0 = \langle P/m \rangle = \text{cste}$.

9.7.3 Paquet d'ondes gaussien

1. On suppose que la fonction $A(k)$ de (9.41) est une gaussienne

$$A(k) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(k - \bar{k})^2}{2\sigma^2} \right]$$

Montrer que

$$\int |A(k)|^2 dk = 1, \quad \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma$$

et que la fonction d'onde $\varphi(x, t=0)$ vaut

$$\varphi(x, t=0) = \frac{\sigma^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp \left[i\bar{k}x - \frac{1}{2} \sigma^2 x^2 \right]$$

Tracer la courbe représentative de $|\varphi(x, t=0)|^2$. Quelle est la largeur de cette courbe ? Identifier la dispersion Δx et vérifier que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

2. Calculer $\varphi(x, t)$. Montrer que si $\hbar\sigma^2 t/m \ll 1$, on a

$$\varphi(x, t) = \exp(i\bar{k}x - iv_g t) \varphi(x - v_g t, 0) \quad v_g = \frac{\hbar\bar{k}}{m}$$

3. Calculer exactement $\varphi(x, t)$

$$\varphi(x, t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \sigma' \exp \left[i\bar{k}x - i\omega(\bar{k})t - \frac{1}{2} \sigma'^2 (x - v_g t)^2 \right]$$

avec

$$\frac{1}{\sigma'^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{m}$$

et en déduire $|\varphi(x, t)|^2$. Montrer que

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\sigma^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 \sigma^4 t^2}{m^2} \right)$$

Donner l'interprétation physique du résultat.

4. Un neutron sort d'un réacteur nucléaire avec une longueur d'onde de 0.1 nm. On suppose que sa fonction d'onde à $t = 0$ est un paquet d'ondes gaussien de largeur $\Delta x = 1$ nm. Au bout de combien de temps la largeur du paquet d'ondes aura-t-elle doublé ? Quelle distance aura parcouru le neutron ?

9.7.4 Heuristique de l'inégalité de Heisenberg

1. Si l'électron émis dans la désintégration β du neutron

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

était initialement enfermé dans le neutron dont le rayon $\simeq 0.8$ fm, quelle serait son énergie cinétique ? Quelle conclusion peut-on en tirer ?

2. Une particule quantique de masse m se déplace sur l'axe des x dans le potentiel harmonique

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

Utiliser l'inégalité de Heisenberg pour estimer l'énergie de son état fondamental.

9.7.5 Potentiel de Lennard-Jones pour l'hélium

1. L'énergie potentielle de deux atomes séparés par une distance r est souvent bien représentée par le potentiel de Lennard-Jones

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

où ε et σ sont des paramètres ayant respectivement les dimensions d'une énergie et d'une longueur. Calculer la position r_0 du minimum du potentiel et tracer qualitativement $V(r)$. Montrer qu'au voisinage de $r = r_0$

$$V(r) \simeq -\varepsilon \left[1 - 36 \left(\frac{r - r_0}{r_0} \right)^2 \right] = \frac{1}{2} m \omega^2 (r - r_0)^2 + V_0$$

2. Dans le cas de l'hélium $\varepsilon \simeq 10^{-3}$ eV et $r_0 \simeq 0.3$ nm. Calculer la fréquence de vibration ω et l'énergie $\hbar\omega/2$ du niveau fondamental. Pourquoi l'hélium reste-t-il liquide même si la température $T \rightarrow 0$? Le raisonnement vaut-il pour les deux isotopes ^3He et ^4He ?

3. Pour l'hydrogène, $\varepsilon \simeq 4$ eV. Pourquoi l'hydrogène se solidifie-t-il à basse température ? Que pensez-vous des gaz rares : argon, néon, etc. ?

9.7.6 Retard à la réflexion

1. L'équation (9.74) donne le coefficient B de l'onde réfléchié quand une onde incidente $\exp(ikx)$ arrive sur une marche de potentiel avec une énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m) < V_0$, V_0 étant la hauteur de la marche de potentiel. Montrer que $|B| = 1$ et peut s'écrire $B = \exp(-i\phi)$. Déterminer ϕ et $d\phi/dE$.

2. On suppose que l'onde incidente est un paquet d'ondes du type (9.41)

$$\varphi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} A(k) \exp(ikx - i\omega(k)t)$$

Quel sera le paquet d'ondes réfléchi ? En déduire que la réflexion se fait avec un retard

$$\tau = -\hbar \frac{d\phi}{dE} > 0$$

9.7.7 Potentiel en fonction δ

On considère un potentiel à une dimension de la forme

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x)$$

m étant la masse de la particule soumise au potentiel. Ce potentiel donne parfois une approximation commode. Par exemple il peut représenter une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0 , dans la limite où $a \rightarrow 0$ et $V_0 \rightarrow \infty$, le produit $V_0 a$ restant constant et égal à $\hbar^2 g / (2m)$. Dans le cas d'une barrière (potentiel répulsif), $g > 0$, mais on peut aussi modéliser un puits (potentiel attractif), auquel cas $g < 0$.

1. Montrer que g a pour dimension l'inverse d'une longueur.

2. La fonction $\varphi(x)$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x) \right] \varphi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x)$$

Montrer que la dérivée de $\varphi(x)$ vérifie au voisinage de $x = 0$

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = g\varphi(0) \quad \varphi(0^\pm) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^\pm} \varphi(\varepsilon)$$

Supposant $g < 0$, montrer qu'il existe un état lié et un seul. Déterminer son énergie et la fonction d'onde correspondante. Montrer que l'on retrouve les résultats en prenant la limite du puits carré avec $V_0 a \rightarrow \hbar^2 |g| / (2m)$ et $a \rightarrow 0$.

3. *Modèle pour une molécule diatomique.* Supposant toujours $g < 0$, on modélise très grossièrement le potentiel auquel est soumis un électron d'une molécule diatomique par

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} [\delta(x+l) + \delta(x-l)]$$

La droite des noyaux est prise comme axe des x et les deux noyaux sont situés en $x = -l$ et $x = +l$. Montrer que l'on peut classer les solutions de l'équation de Schrödinger en solutions paires et impaires. Si la fonction d'onde est paire, montrer qu'il existe un seul état lié donné par

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 + e^{-2\kappa l}) \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Tracer qualitativement sa fonction d'onde.

Si la fonction d'onde est impaire, déterminer l'équation donnant l'énergie des états liés

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 - e^{-2\kappa l})$$

Existe-t-il toujours un état lié ? Sinon, quelle condition faut-il imposer ? Tracer qualitativement la fonction d'onde lorsqu'il y a un état lié.

4. Puits double et effet tunnel. On reprend la situation de la question 3 en supposant $\kappa l \gg 1$. Montrer que les deux états liés constituent un système à deux niveaux dont le hamiltonien est

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

et relier A à $\sqrt{T}$, où T est le coefficient de transmission par effet tunnel entre les deux puits.

5. Barrière de potentiel. On s'intéresse maintenant au cas $g > 0$, qui modélise une barrière de potentiel. Calculer directement la matrice de passage et montrer qu'elle est bien la limite de celle de la barrière carrée si $V_0 a \rightarrow g$ et $a \rightarrow 0$. Donner l'expression du coefficient de transmission.

6. Potentiel périodique. Un électron se déplaçant dans un cristal à une dimension est soumis à un potentiel périodique de période l que l'on modélise par

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x - nl)$$

Pour fixer les idées, on prendra $g > 0$. Montrer que la périodicité du potentiel entraîne que la fonction d'onde, étiquetée par q , est de la forme

$$\varphi_q(x - l) = e^{-iq l} \varphi_q(x)$$

Suggestion : examiner l'action de l'opérateur T_l qui effectue une translation de l . On peut donc se restreindre à l'étude de l'intervalle $[-l/2, l/2]$. En dehors du point $x = 0$, les fonctions d'onde sont des exponentielles complexes

$$\begin{aligned} -\frac{l}{2} \leq x < 0 & \quad \varphi_q(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ 0 < x \leq \frac{l}{2} & \quad \varphi_q(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \end{aligned}$$

Utiliser les conditions sur $\varphi'(x)$ pour obtenir

$$\cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

Montrer qu'il existe des régions interdites pour l'énergie. Tracer qualitativement l'énergie E_q en fonction de q .

9.7.8 Transmission par un puits

1. Montrer que le coefficient de transmission T par le puits carré de la figure 9.11 vaut

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{4kk'} \right)^2 \sin^2 k'a} \quad q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

Montrer que T passe par un maximum si la longueur d'onde de de Broglie dans le puits $\lambda' = 2\pi/k'$ est de la forme $2a/n$, n entier.

2. Tracer qualitativement les courbes donnant T et le coefficient de réflexion $1 - T$. Ce comportement explique, entre autres, l'effet Ramsauer-Townsend²⁴.

9.7.9 Niveaux d'énergie du puits cubique infini en dimension $d = 3$

Déterminer l'énergie des six premiers niveaux d'énergie du puits cubique infini en fonction du côté L du cube ainsi que leur dégénérescence.

9.7.10 Courant de probabilité à trois dimensions

Montrer l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad \rho = |\varphi(\vec{r}, t)|^2$$

pour le courant (9.141).

9.7.11 Densité de niveaux

1. Calculer la densité de niveaux d'énergie $\mathcal{D}(E)$ en dimension $d = 2$. Montrer qu'elle est indépendante de E .

2. Calculer directement le nombre de niveaux $\Phi(E)$ dont l'énergie est inférieure à E , en comptant le nombre de niveaux possibles dans une sphère

24. cf. Lévy-Leblond et Balibar [1984], page 314.

de rayon $|p| = \sqrt{2mE}$ dans l'espace des impulsions, et en prenant garde aux conditions et aux limites. Retrouver l'expression (9.154) de $\mathcal{D}(E)$ par

$$\mathcal{D}(E) = \frac{d\Phi(E)}{dE}$$

3. Calculer la densité de niveaux d'énergie $\mathcal{D}(E)$ pour une particule ultrarelativiste dont l'énergie est donnée par $E = cp$. Généraliser au cas $E = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$. Montrer que d^3p/E est un invariant de Lorentz. En raison de cette invariance, cette expression est souvent prise comme densité de niveaux.

9.7.12 Règle d'or de Fermi

1. Comparaison avec la formule de Rabi. Dans un système à deux niveaux, la formule de Rabi (5.37) donne exactement la probabilité de transition entre deux niveaux sous l'effet d'une perturbation harmonique, par exemple

$$p_{+ \rightarrow -}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad \Omega^2 = [(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2]^{1/2}$$

Montrer que la formule approchée (9.62) s'obtient comme la limite de la formule de Rabi si :

- $|\omega - \omega_0| \gg \omega_1$, c'est-à-dire loin de la résonance,
- ou si $\omega_1 t \ll 1$, c'est-à-dire pour des temps assez courts.

2. Potentiel constant. Donner l'expression de l'amplitude (9.167) $\gamma^{(1)}(t)$ et de la probabilité de transition par unité de temps Γ lorsque le potentiel $W(t)$ de (9.165) est indépendant du temps.

9.7.13 Étude de l'expérience de Stern-Gerlach

1. Étude classique. Les notations sont celles du § 3.2.2. La trajectoire des atomes d'argent (figure 3.7) est supposée contenue dans le plan de symétrie yOz et voisine de l'axe Oy . Montrer que $\partial B_z / \partial z|_{x=0} = 0$ et que $\partial B_z / \partial y = 0$ si l'on néglige les effets de bord. Montrer qu'une forme approchée du champ magnétique vérifiant les équations de Maxwell dans l'entrefer de l'aimant au voisinage de $x = 0$ et $z = 0$ est

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + b(z\hat{z} - x\hat{x})$$

où $b = \partial B_z / \partial z|_z = 0$. L'expression classique de la force est $\vec{F} = -\vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$. En déduire les composantes F_x , F_y et F_z . Montrer que sous l'effet de B_0 le moment magnétique $\vec{\mu}$ précesse autour de l'axe Oz avec une fréquence $\omega = |\gamma B_0|$, où γ est le facteur gyromagnétique, et que si $1/\omega$ est très petit par rapport au temps de transit de l'atome dans l'entrefer de l'aimant, alors

la composante μ_x donne une force moyenne nulle : tout se passe comme si le moment magnétique était soumis à une force effective $\vec{F} = b\mu_z \hat{z}$.

2. Données numériques. Les atomes d'argent de masse $m = 1.8 \times 10^{-27}$ kg sortent du four avec une vitesse $v \simeq 500 \text{ m.s}^{-1}$ et une dispersion des vitesses $\Delta v \sim 10 \text{ m.s}^{-1}$. Les fentes collimatrices ont une hauteur $\Delta z = 10^{-4} \text{ m}$, la longueur de l'entrefer est $L = 5 \times 10^{-2} \text{ m}$, le champ magnétique $B_0 = 1 \text{ T}$ et $b = 10^4 \text{ T.m}^{-1}$. Montrer que l'écart δ entre les deux trajectoires correspondant à $S_z = \hbar/2$ et $S_z = -\hbar/2$ à la sortie de l'entrefer vaut

$$\delta = \frac{\mu b}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2$$

Évaluer numériquement δ . Calculer le produit $\Delta z \Delta p_z$ et montrer que $\Delta z \Delta p_z \gg \hbar$. On peut donc traiter les trajectoires des atomes de façon classique.

3. Description quantique. Soit $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)$ la fonction d'onde d'un atome dont le spin est dans l'état $|\pm\rangle$. Montrer que $\varphi_{\pm}$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \mp \mu B \right) \varphi_{\pm}$$

On définit la position moyenne $\langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t)$ et l'impulsion moyenne $\langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t)$ des paquets $\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)$ d'ondes par

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t) &= \int d^3r \, \vec{r} |\varphi_{\pm}(\vec{r}, t)|^2 \\ \langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t) &= \int d^3r \, \varphi_{\pm}^*(\vec{r}, t) \left[-i\hbar \vec{\nabla} \varphi_{\pm}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned}$$

Écrire les équations d'évolution de ces valeurs moyennes en calculant $d\langle \vec{r}_{\pm} \rangle(t)/dt$ et $d\langle \vec{p}_{\pm} \rangle(t)/dt$ à l'aide du théorème d'Ehrenfest (4.26). Montrer que l'écart δ entre les centres des deux paquets d'ondes est le même que celui calculé à la question 2 pour les trajectoires classiques.

4. Invariance par parité. Dans une configuration expérimentale où l'on analyse un spin dirigé suivant Oz à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach tel que $\vec{B} \parallel Ox$, on suppose que le spin est dévié préférentiellement dans la direction $x > 0$; par exemple $\langle S_x \rangle > 0$. En examinant l'image de l'expérience dans un miroir situé dans le plan xOy , montrer qu'une telle déviation préférentielle est exclue si les interactions pertinentes dans l'expérience sont invariantes par parité (ce qui est effectivement le cas).

9.7.14 Modèle de mesure de von Neumann

1. Dans le modèle de mesure quantique imaginé par von Neumann, on se propose de mesurer une grandeur physique A d'un système quantique S en

faisant interagir ce système avec une particule (quantique) Π dont l'opérateur d'impulsion est P ; on se place pour simplifier à une dimension d'espace. Le hamiltonien d'interaction est supposé de la forme

$$H = g(t)AP$$

où $g(t)$ est une fonction positive présentant un pic aigu de largeur τ autour de $t = 0$ et telle que

$$g = \int_{-\infty}^{\infty} g(t)dt \simeq \int_{-\tau/2}^{\tau/2} g(t)dt$$

On suppose que l'on peut négliger l'évolution de S et de Π pendant la durée très courte τ de l'interaction entre S et Π , qui a lieu entre les temps t_i et t_f : $t_i \simeq -\tau/2$ et $t_f \simeq \tau/2$. En déduire l'opérateur d'évolution (4.14)

$$U(t_f, t_i) \simeq e^{-igAP/\hbar}$$

2. On suppose que l'état initial $S + \Pi$ est

$$|\psi(t_i)\rangle = |n \otimes \varphi\rangle$$

où $|n\rangle$ est un vecteur propre de A , dont le spectre est supposé pour simplifier non dégénéré, $A|n\rangle = a_n|n\rangle$, et $|\varphi\rangle$ un état de la particule localisé au voisinage d'un point x avec une dispersion Δx . Montrer que l'état final est

$$|\psi(t_f)\rangle = |n \otimes \varphi_n\rangle \quad \text{avec} \quad |\varphi_n\rangle = e^{-igAP/\hbar} |\varphi\rangle$$

Soit $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$ la fonction d'onde finale de la particule. Montrer que

$$\varphi_n(x) = \varphi(x - ga_n)$$

La fonction $\varphi_n(x)$ est donc localisée au voisinage du point $x - ga_n$, et si $g|a_n - a_m| \gg \Delta x$ quel que soit $n \neq m$, la position de la particule permet de remonter à la valeur a_n de A et effectue donc une mesure de A . L'état final de la particule est parfaitement corrélé à la valeur de A et à l'état final de S car les états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ sont orthogonaux pour $n \neq m$: $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$.

3. Quel est l'état final de Π si l'état initial de S est la superposition linéaire

$$|\chi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

Montrer que la probabilité d'observer S dans l'état final $|n\rangle$ est $|c_n|^2$: la mesure est idéale car elle ne modifie pas les probabilités $|c_n|^2$.

9.7.15 Transformation de Galilée

Considérons une onde plane classique, par exemple une vibration sonore, se propageant suivant l'axe des x

$$f(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

et une transformation de Galilée de vitesse v

$$x' = x + vt \quad t' = t$$

1. Montrer que pour une onde classique l'amplitude transformée $f'(x', t')$ vérifie

$$f'(x', t') = f(x, t)$$

d'où l'on tire la loi de transformation des vecteurs d'onde et des fréquences

$$k' = k \quad \omega' = \omega + vk$$

Quelle est l'interprétation physique de la loi de transformation des fréquences ? Supposons maintenant que l'on ait affaire à une onde de de Broglie pour une particule de masse m . Les relations précédentes sont-elles compatibles avec les lois de transformation de l'impulsion et de l'énergie

$$p' = p + mv \quad E' = E + pv + \frac{1}{2}mv^2?$$

2. Montrer que pour une onde de Broglie on ne doit pas exiger

$$\varphi'(x', t') = \varphi(x, t)$$

mais seulement

$$\varphi'(x', t') = \exp \left[\frac{if(x, t)}{\hbar} \right] \varphi(x, t)$$

En utilisant les relations (à démontrer)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} &= \frac{\partial}{\partial t} - v \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x'} &= \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

déterminer la forme de la fonction $f(x, t)$ en exigeant que si $\varphi(x, t)$ obéit à l'équation de Schrödinger, il en soit de même pour $\varphi'(x', t')$.

9.8 Bibliographie

Les résultats de ce chapitre sont très classiques et se retrouvent sous une forme voisine dans la plupart des traités de mécanique quantique. Parmi

les exposés les plus clairs, on peut retenir celui de Merzbacher [1970], chapitre 6. Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 6, donnent également une discussion très complète et illustrée par de nombreux exemples. Voir aussi Messiah [1959], chapitre III, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre I ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 2 ; cette dernière référence est accompagnée d'un CD réalisé par M. Joffe, qui permet de visualiser le mouvement de paquets d'ondes. Pour la règle d'or de Fermi, on pourra consulter Messiah [1959], chapitre XVII ou Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre XIII.

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Chapitre 10

Moment angulaire

DANS CE CHAPITRE, nous allons développer l'étude des propriétés du moment angulaire, que nous avons introduit au chapitre 8. La propriété *fondamentale* du moment angulaire est d'être le générateur infinitésimal des rotations. Tous les résultats que nous allons obtenir dans ce chapitre sont des conséquences plus ou moins directes de cette propriété. Dans la section 10.1, nous construirons explicitement une base de vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et à J_z , qui sont des opérateurs hermitiques compatibles. La rotation d'un état physique, que nous avons déjà introduite au chapitre 3 pour la polarisation d'un photon et pour le spin 1/2, sera traitée dans le cas général dans la section 10.2. La section 10.3 est consacrée au moment angulaire orbital, dont l'origine est le mouvement des particules dans l'espace. La section 10.4 transpose à la mécanique quantique les résultats classiques du mouvement dans une force centrale, tandis que la section 10.5 contient des applications aux désintégrations de particules et d'états excités. Enfin la section 10.6 développe l'addition des moments angulaires.

N.B. Dans tout ce chapitre, on utilisera un système d'unités où $\hbar = 1$.

10.1 Diagonalisation de $\vec{J}^2$ et de J_z

Nous avons établi au chapitre 8 les relations de commutation (8.31) et (8.32) entre les différentes composantes du moment angulaire, que nous rappelons ci-dessous dans un système d'unités où $\hbar = 1$ (rappelons qu'un moment angulaire a la dimension de $\hbar$, et c'est pourquoi les notations se simplifient dans un tel système d'unités)

$$\boxed{[J_x, J_y] = iJ_z \quad [J_y, J_z] = iJ_x \quad [J_z, J_x] = iJ_y} \quad (10.1)$$

ou

$$\boxed{[J_k, J_l] = i \sum_m \varepsilon_{klm} J_m} \quad (10.2)$$

La seule connaissance de ces relations de commutation va nous permettre de diagonaliser le moment angulaire, c'est-à-dire de trouver les vecteurs propres et les valeurs propres de combinaisons convenablement choisies de J_x , J_y et J_z . Comme ces trois opérateurs ne commutent pas entre eux, on ne peut évidemment pas les diagonaliser simultanément : les trois composantes de $\vec{J}$ sont mutuellement incompatibles. Une autre observation est que $\vec{J}^2$ est un opérateur scalaire et, d'après un résultat du § 8.2.3, un tel opérateur commute avec les trois composantes de $\vec{J}$

$$[\vec{J}^2, J_k] = 0 \quad (10.3)$$

ce que l'on peut vérifier par un calcul explicite (exercice 10.7.1). On choisit en général de diagonaliser simultanément $\vec{J}^2$ et J_z : c'est ce que l'on appelle souvent *quantifier le moment angulaire suivant Oz*. On dit aussi que l'axe Oz est *choisi comme axe de quantification du moment angulaire*. Il est commode de définir les opérateurs $J_{\pm} = J_{\mp}^{\dagger}$ et J_0 par

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad J_0 = J_z \quad (10.4)$$

On vérifie immédiatement les relations de commutation et les identités suivantes

$$[J_0, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \quad (10.5)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_0 \quad (10.6)$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_- J_+ + J_+ J_-) + J_0^2 \quad (10.7)$$

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_0(J_0 - 1) \quad (10.8)$$

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_0(J_0 + 1) \quad (10.9)$$

Ces relations nous seront utiles pour la diagonalisation. Soit $|jm\rangle$ un vecteur propre de $\vec{J}^2$ et de J_z , où j étiquette la valeur propre de $\vec{J}^2$ et m celle de J_z . Comme $\vec{J}^2$ est un opérateur positif, ses valeurs propres sont ≥ 0 , et on les écrit sous la forme $j(j+1)$ avec $j \geq 0$; on justifiera bientôt cette écriture des valeurs propres de $\vec{J}^2$. Le nombre m est appelé *nombre quantique magnétique*. En résumé

$$\vec{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle \quad (10.10)$$

$$J_0 |jm\rangle = m |jm\rangle \quad (10.11)$$

D'après (10.5), les vecteurs $J_{\pm} |jm\rangle$ sont vecteurs propres de J_0 avec la valeur propre $m \pm 1$

$$\begin{aligned} J_0 [J_{\pm} |jm\rangle] &= (J_{\pm} J_0 \pm J_{\pm}) |jm\rangle = J_{\pm} (m \pm 1) |jm\rangle \\ &= (m \pm 1) [J_{\pm} |jm\rangle] \end{aligned}$$

De même, comme $[\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0$

$$\vec{J}^2[J_{\pm}|jm\rangle] = j(j+1)[J_{\pm}|jm\rangle]$$

Nous venons de montrer que les vecteurs $J_{\pm}|jm\rangle$ sont vecteurs propres de $\vec{J}^2$ avec la valeur propre $j(j+1)$ et de J_0 avec la valeur propre $m \pm 1$. De plus, supposant $|jm\rangle$ unitaire : $\langle jm|jm\rangle = 1$, on peut calculer la norme de $J_{+}|jm\rangle$ à partir de (10.9)

$$\begin{aligned} \|J_{+}|jm\rangle\|^2 &= \langle jm|J_{-}J_{+}|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_0(J_0 + 1)|jm\rangle \\ &= j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \geq 0 \end{aligned} \quad (10.12)$$

et celle de $J_{-}|jm\rangle$ à partir de (10.8)

$$\begin{aligned} \|J_{-}|jm\rangle\|^2 &= \langle jm|J_{+}J_{-}|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_0(J_0 - 1)|jm\rangle \\ &= j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1) \geq 0 \end{aligned} \quad (10.13)$$

La positivité simultanée des deux normes n'est assurée que si $-j \leq m \leq j$. Partant de $|jm\rangle$, par application répétée de J_{+} , on obtient une série de vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et J_0 , étiquetés par $(j, m+1)$, $(j, m+2)$ etc. Ces vecteurs propres ont une norme positive tant que $m \leq j$, mais la norme deviendrait négative pour $m > j$. Il faut donc que la série s'arrête, ce qui n'est possible que si l'un des vecteurs $(J_{+})^n|jm\rangle$ s'annule pour une valeur entière de $n = n_1 + 1$ telle que $m + n_1 = j$

$$J_{+}[(J_{+})^{n_1}|jm\rangle] = 0$$

Le même raisonnement avec J_{-} montre qu'il doit exister un entier n_2 tel que

$$J_{-}[(J_{-})^{n_2}|jm\rangle] = 0$$

Des relations

$$j = m + n_1 \qquad -j = m - n_2$$

on déduit que $2j$, et donc $(2j+1)$ doit être un nombre entier, d'où le théorème de diagonalisation de $\vec{J}^2$ et de J_z .

Théorème : Les valeurs possibles de j sont entières ou demi-entières : $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Si $|jm\rangle$ est vecteur propre commun à $\vec{J}^2$ et J_0 , m prend nécessairement l'une des $(2j+1)$ valeurs

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j \quad \blacksquare$$

Lorsque j prend les valeurs $0, 1, 2, \dots$ on dit que le moment angulaire est entier, et qu'il est demi-entier¹ lorsque $j = 1/2, 3/2, \dots$. Examinons la normalisation et la phase des vecteurs $|jm\rangle$. Partant d'un vecteur $|jm\rangle$ on construit par

1. Bien que la moitié d'un entier pair soit aussi un demi-entier...

application répétée de J_+ et de J_- une série de $(2j+1)$ vecteurs orthogonaux, sous-tendant un sous-espace vectoriel à $(2j+1)$ dimensions $\mathcal{E}(j)$ de $\mathcal{H}$. Ces vecteurs ne sont pas de norme unité, mais si l'on définit $|j, m-1\rangle$ par

$$|j, m-1\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{-1/2} J_- |jm\rangle \quad (10.14)$$

alors $|j, m-1\rangle$ est bien de norme unité d'après (10.13). D'autre part, en utilisant (10.8)

$$\begin{aligned} J_+ J_- |jm\rangle &= [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} J_+ |j, m-1\rangle \\ &= [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} |jm\rangle \end{aligned}$$

soit

$$J_+ |j, m-1\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} |jm\rangle$$

ou bien, avec la substitution $m \rightarrow m+1$

$$J_+ |jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} |j, m+1\rangle \quad (10.15)$$

Les relations (10.14) ou (10.15) fixent complètement la phase relative des vecteurs $|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \dots, |j, -j\rangle$. Une base de $\mathcal{E}(j)$ formée de vecteurs $|jm\rangle$ qui satisfont à (10.14) ou (10.15) est appelée *base standard* $|jm\rangle$.

Il peut arriver que la donnée de (j, m) ne suffise pas à spécifier de façon unique un vecteur de $\mathcal{H}$: $\vec{J}^2$ et J_z ne forment pas un ensemble complet de grandeurs physiques compatibles. Nous en verrons un exemple au § 10.4.2 avec l'atome d'hydrogène : la donnée du moment angulaire (orbital), noté dans ce cas l , ne suffit pas à spécifier un état lié, il faut en plus se donner un nombre quantique $n = l+1, l+2, \dots$, ou nombre quantique principal. En général, on doit utiliser un nombre quantique, ou un ensemble de nombres quantiques supplémentaires τ pour étiqueter des vecteurs propres $|j, m = j\rangle$ de $\vec{J}^2$ et de J_z , normalisés par

$$\langle \tau, j, j | \tau', j, j \rangle = \delta_{\tau, \tau'}$$

Par application répétée de J_- on forme une base standard de $\mathcal{E}(\tau, j)$

$$|\tau, j, j\rangle, |\tau, j, j-1\rangle, \dots, |\tau, j, -j+1\rangle, |\tau, j, -j\rangle$$

Résumons les propriétés essentielles d'une base standard $|\tau, jm\rangle$

$$\vec{J}^2 |\tau, jm\rangle = j(j+1) |\tau, jm\rangle \quad J_z |\tau, jm\rangle = m |\tau, jm\rangle \quad (10.16)$$

$$J_+ |\tau, jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} |\tau, j, m+1\rangle \quad (10.17)$$

$$J_- |\tau, jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} |\tau, j, m-1\rangle \quad (10.18)$$

$$J_+ |\tau, j, j\rangle = 0 \quad J_- |\tau, j, -j\rangle = 0 \quad (10.19)$$

$$\langle \tau', j' m' | \tau, jm \rangle = \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} \delta_{m' m} \quad (10.20)$$

Nous supprimerons par la suite l'indice τ qui ne jouera aucun rôle dans ce chapitre. Les éléments de matrice de $\vec{J}^2$, J_0 et J_- dans une base standard sont

$$\langle j'm' | \vec{J}^2 | jm \rangle = j(j+1) \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (10.21)$$

$$\langle j'm' | J_0 | jm \rangle = m \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (10.22)$$

$$\langle j'm' | J_{\pm} | jm \rangle = [j(j+1) - mm']^{1/2} \delta_{j'j} \delta_{m',m\pm 1} \quad (10.23)$$

Dans le sous-espace $\mathcal{E}(j)$ où $\vec{J}^2$ a une valeur propre $j(j+1)$ fixée, les opérateurs J_0 et $J_{\pm}$ sont représentés par des matrices $(2j+1) \times (2j+1)$, la matrice représentant J_0 étant diagonale. Il est instructif (exercice 10.7.4) d'expliciter ces matrices dans le cas $j = 1/2$ et de retrouver les matrices 2×2 (3.47) du spin $1/2$, ainsi que dans le cas $j = 1$, où l'on retrouve les générateurs infinitésimaux des rotations dans l'espace à trois dimensions : la loi de transformation d'un vecteur est celle d'un moment angulaire $j = 1$. L'équation (10.23) donne pour les générateurs infinitésimaux (exercice 10.7.4)

$$J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.24)$$

Ces générateurs infinitésimaux ont superficiellement une forme différente de celle des générateurs T_i déterminés en (8.26). En fait, ils y sont reliés par la transformation unitaire (10.64) qui fait passer des composantes cartésiennes de $\hat{r}$ à ses composantes sphériques : exercice 10.7.4.

10.2 Matrices de rotation

Nous avons vu au chapitre 3 comment faire tourner un spin $1/2$: partant d'un état $|+\rangle$ obtenu à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à Oz , nous savons construire grâce à (3.57) l'état $|+, \hat{n}\rangle$ obtenu à l'aide d'un appareil de Stern-Gerlach dont le champ magnétique est parallèle à $\hat{n}$. On fait agir sur l'état $|+\rangle$ un opérateur de rotation $U[\mathcal{R}]$ qui transforme $|+\rangle$ en $|+, \hat{n}\rangle$

$$|+, \hat{n}\rangle = U[\mathcal{R}]|+\rangle = |+\rangle_{\mathcal{R}}$$

La rotation $\mathcal{R}$ amène l'axe Oz sur la direction $\hat{n}$; cette rotation n'est pas unique, et nous verrons que cette absence d'unicité correspond à un arbitraire de phase dans la définition de $|+, \hat{n}\rangle$. Un autre exemple de rotation d'un état physique a été donné au chapitre 3 dans le cas de la polarisation d'un photon : partant d'un état de polarisation linéaire $|x\rangle$, on obtient un état de polarisation linéaire $|\theta\rangle$ en lui appliquant un opérateur de rotation $U[\mathcal{R}_z(\theta)]$

correspondant à une rotation d'angle θ autour de la direction de propagation Oz du photon (3.29)

$$|\theta\rangle = \exp(-i\theta\Sigma_z)|x\rangle = U[\mathcal{R}_z(\theta)]|x\rangle$$

Dans le cas général, l'état $|\varphi\rangle_{\mathcal{R}}$ transformé par une rotation $\mathcal{R}$ d'un état $|\varphi\rangle$ est

$$|\varphi\rangle_{\mathcal{R}} = U[\mathcal{R}]|\varphi\rangle$$

Nous allons donner la forme matricielle explicite des opérateurs de rotation $U[\mathcal{R}]$ dans la base $|jm\rangle$. L'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}]$ s'exprime en fonction des générateurs infinitésimaux J_x , J_y et J_z : cf. (8.30). Comme les composantes de $\vec{J}$ commutent avec $\vec{J}^2$, le commutateur $[U(\mathcal{R}), \vec{J}^2] = 0$ et les éléments de matrice de U sont nuls si $j \neq j'$

$$\langle j'm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle \propto \delta_{j'j}$$

Dans le sous-espace $\mathcal{E}(j)$, l'opérateur $U(\mathcal{R})$ sera représenté par une matrice $(2j+1) \times (2j+1)$ notée $D^{(j)}[\mathcal{R}]$. Ses éléments de matrice sont

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}] = \langle jm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle \quad (10.25)$$

Les matrices $D^{(j)}$ sont appelées *matrices de rotation*, ou *matrices de Wigner*. Examinons la transformation par rotation d'un état $|jm\rangle$ qui donne le vecteur $|jm\rangle_{\mathcal{R}}$

$$|jm\rangle_{\mathcal{R}} = U[\mathcal{R}]|jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle \langle jm'|U[\mathcal{R}]|jm\rangle$$

où l'on a remarqué que dans la relation de fermeture

$$\sum_{j',m'} |j'm'\rangle \langle j'm'| = I$$

seuls les termes $j = j'$ contribuent. On peut donc écrire

$$|jm\rangle_{\mathcal{R}} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}]|jm'\rangle \quad (10.26)$$

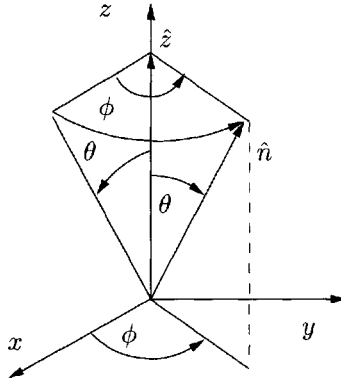
Rappelons les propriétés de groupe des opérateurs $U[\mathcal{R}]$: dans le cas d'une représentation vectorielle (8.12)

$$U[\mathcal{R}_2]U[\mathcal{R}_1] = U[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] \quad (10.27)$$

et dans celui d'une représentation spinorielle (8.13)

$$U[\mathcal{R}_2]U[\mathcal{R}_1] = \pm U[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] \quad (10.28)$$

Nous montrerons à la fin de ce paragraphe que (10.27) correspond au cas d'un moment angulaire entier et (10.28) à celui d'un moment angulaire demi-entier.

FIG. 10.1 – Rotation $\mathcal{R}(\theta, \phi)$ amenant l'axe Oz sur $\hat{n}$.

À la propriété de groupe pour les opérateurs U correspond une propriété analogue pour les matrices de rotation

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1] = \pm \sum_{m''} D_{m'm''}^{(j)}[\mathcal{R}_2] D_{m''m}^{(j)}[\mathcal{R}_1]$$

Revenons à l'étude de la rotation qui amène l'axe Oz dans la direction $\hat{n}$ d'angles polaire et azimutal (θ, ϕ)

$$\hat{n}_x = \sin \theta \cos \phi \quad \hat{n}_y = \sin \theta \sin \phi \quad \hat{n}_z = \cos \theta \quad (10.29)$$

Nous allons choisir par convention la rotation suivante : $\mathcal{R}$, noté $\mathcal{R}(\theta, \phi)$, sera le produit d'une première rotation d'angle θ autour de Oy suivie d'une rotation de ϕ autour de Oz (figure 10.1).

$$\boxed{\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_z(\phi)\mathcal{R}_y(\theta)} \quad (10.30)$$

Compte tenu de (10.30) et de la loi de groupe, l'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}(\theta, \phi)]$ est donné en fonction des générateurs infinitésimaux J_y et J_z par

$$U[\mathcal{R}(\theta, \phi)] = e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} \quad (10.31)$$

et ses éléments de matrice dans une base $|jm\rangle$ par

$$\boxed{D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}(\theta, \phi)] = \langle jm' | e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} | jm \rangle} \quad (10.32)$$

Cette équation se simplifie en

$$D_{m'm}^{(j)}[\mathcal{R}(\theta, \phi)] \equiv D_{m'm}^{(j)}(\theta, \phi) = e^{-im'\phi} \langle jm' | e^{-i\theta J_y} | jm \rangle \quad (10.33)$$

$$= e^{-im'\phi} d_{m'm}^{(j)}(\theta) \quad (10.34)$$

Nous avons défini la matrice $d^{(j)}(\theta)$ par

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = \langle jm' | e^{-i\theta J_y} | jm \rangle} \quad (10.35)$$

Les matrices $d^{(j)}$ vérifient une propriété de groupe déduite de celle des matrices $D^{(j)}$

$$d_{m'm}^{(j)}(\theta_2 + \theta_1) = \sum_{m''} d_{m'm''}^{(j)}(\theta_2) d_{m''m}^{(j)}(\theta_1)$$

Il n'y pas de signe $\pm$ dans cette équation car l'angle de rotation peut être supérieur à 2π .

Nous avons déjà mentionné l'arbitraire dans le choix de la rotation (θ, ϕ) : nous aurions pu effectuer une première rotation d'un angle ψ autour de Oz sans modifier l'axe $\hat{n}$ final. Le nouvel opérateur de rotation serait

$$U[\mathcal{R}'] = U[\mathcal{R}(\theta, \phi)] e^{-i\psi J_z}$$

et le résultat (10.26) serait modifié par le facteur de phase $\exp(-im\psi)$. La définition la plus générale des matrices de rotation fait intervenir trois angles, appelés angles d'Euler, (ϕ, θ, ψ) , et notre convention correspond au choix d'angles d'Euler² $(\phi, \theta, 0)$.

Dans la base $|jm\rangle$, iJ_y est représenté par une matrice réelle, car d'après (10.23) les éléments de matrice de J_+ et de J_- sont réels et

$$J_y = -\frac{i}{2} (J_+ - J_-)$$

La matrice $\exp(-i\theta J_y)$ est aussi une matrice réelle et la propriété de groupe

$$U^\dagger[\mathcal{R}] = U^{-1}[\mathcal{R}] = U[\mathcal{R}^{-1}]$$

se traduit par

$$\left[d^{(j)}(\theta) \right]^\dagger = \left[d^{(j)}(-\theta) \right]$$

ce qui donne pour les éléments de matrice

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = d_{mm'}^{(j)}(-\theta)} \quad (10.36)$$

Il existe une autre propriété de symétrie (exercice 10.4.12)

$$\boxed{d_{m'm}^{(j)}(\theta) = (-1)^{m-m'} d_{-m', -m}^{(j)}(\theta)} \quad (10.37)$$

2. La notation habituelle pour les matrices de rotation est

$$D^{(j)}(\theta, \phi) \rightarrow D^{(j)}(\phi, \theta, \psi = 0)$$

Enfin, on peut montrer que les matrices $D^{(j)}$ forment une représentation dite *irréductible* du groupe des rotations, c'est-à-dire que tout vecteur de $\mathcal{E}(j)$ peut être obtenu à partir d'un vecteur arbitraire de cet espace par application d'une matrice de rotation $D^{(j)}$, et que toute matrice commutant avec toutes les matrices $D^{(j)}$ est multiple de la matrice identité.

Le test pour la présence du facteur $\pm$ dans (10.28) est donné par l'examen des rotations de 2π : ce facteur apparaît lorsqu'une rotation de 2π est représentée par l'opérateur $-I$ dans l'espace $\mathcal{E}(j)$. Examinons une rotation de 2π autour de l'axe Oz

$$\begin{aligned}\langle jm' | U[\mathcal{R}_z(2\pi)] | jm \rangle &= e^{-2i\pi m} \delta_{m'm} = \delta_{m'm} \quad j \text{ entier} \\ &= e^{-2i\pi m} \delta_{m'm} = -\delta_{m'm} \quad j \text{ demi-entier}\end{aligned}$$

Comme le choix de l'axe Oz est arbitraire, l'opérateur de rotation d'angle 2π vaut I pour j entier et $-I$ pour j demi-entier. En revanche les opérateurs de rotation d'angle 4π sont égaux à I pour toute valeur de j . Examinons deux rotations successives d'angles θ_1 et θ_2 autour d'un axe $\hat{n}$, avec

$$\theta_1 + \theta_2 = \theta + 2\pi n \quad 0 \leq \theta < 2\pi \quad n \text{ entier} \geq 0$$

Des équations

$$\begin{aligned}e^{-i(\theta_1+\theta_2)\vec{J}\cdot\hat{n}} &= e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} e^{-2i\pi n(\vec{J}\cdot\hat{n})} = e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} \quad j \text{ entier} \\ &= (-1)^n e^{-i\theta(\vec{J}\cdot\hat{n})} \quad j \text{ demi-entier}\end{aligned}$$

on déduit que (10.27) est valable pour j entier et (10.28) pour j demi-entier. En d'autres termes, à toute rotation $\mathcal{R}$ correspondent deux opérateurs de rotation de signe opposé pour j demi-entier, et un seul pour j entier.

Dans le cas du spin $1/2$, vérifions que nous retrouvons bien la matrice $D^{(1/2)}(\theta, \phi)$ déjà calculée au chapitre 3. La matrice $d^{(1/2)}(\theta)$ vaut, d'après l'exercice 3.3.6

$$d^{(1/2)}(\theta) = \exp(-i\theta\sigma_y/2) = \cos \frac{\theta}{2} I - i\sigma_y \sin \frac{\theta}{2}$$

ou sous forme explicite

$$d^{(1/2)}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & -\sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (10.38)$$

les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre $m = 1/2, -1/2$; l'équation (10.33) donne alors la matrice $D^{(j)}(\theta, \phi)$

$$D^{(1/2)}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \theta/2 & -e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\phi/2} \sin \theta/2 & e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix}$$

en accord avec (3.58).

La matrice de rotation $d^{(1)}(\theta)$ d'un moment angulaire un s'obtient à partir de l'expression (10.24) des générateurs infinitésimaux pour le moment angulaire un, les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre $m = 1, 0, -1$ (exercice 10.7.4)

$$d^{(1)}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \end{pmatrix} \quad (10.39)$$

On vérifie que les matrices $d^{(1/2)}$ et $d^{(1)}$ obéissent aux propriétés de symétrie (10.36) et (10.37).

10.3 Moment angulaire orbital

10.3.1 Opérateur moment angulaire orbital

Considérons une particule dont la fonction d'onde est $\psi(\vec{r})$ et faisons-lui subir une rotation $R_z(\phi)$ d'angle ϕ autour de Oz ; soit $\vec{r}' = \mathcal{R}\vec{r}$ le vecteur transformé du vecteur $\vec{r}$ dans cette rotation

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \phi - y \sin \phi \\ y' &= x \sin \phi + y \cos \phi \\ z' &= z \end{aligned}$$

La valeur de la fonction d'onde $\psi'(\vec{r})$ de l'état transformé au point $\vec{r}'$ doit être identique à celle de la fonction d'onde initiale au point $\vec{r}$

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r})$$

ou encore

$$\boxed{\psi'(\vec{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})} \quad (10.40)$$

Cette loi de transformation serait correcte pour un champ (scalaire) classique, mais les fonctions d'onde $\psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$ et $\psi'(\vec{r})$ pourraient différer *a priori* par un facteur de phase $\psi'(\vec{r}) = e^{i\theta(\vec{r})}\psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$ (voir la discussion suivant (9.17)). En toute rigueur nous savons seulement que $|\psi'(\vec{r}')| = |\psi(\vec{r})|$ et nous devons montrer que le facteur de phase éventuel est absent. Le vecteur $U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle$ représente physiquement un état propre de l'opérateur position $\vec{R}$, obtenu à partir de l'état propre $|\vec{r}\rangle$ de $\vec{R}$ par une rotation $U(\mathcal{R})$. Vérifions-le explicitement en utilisant le fait que $\vec{R}$ est un opérateur vectoriel dont les composantes X_k se transforment suivant (8.33)

$$\begin{aligned} X_k[U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle] &= U(\mathcal{R})U^{-1}(\mathcal{R})X_kU(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle \\ &= U(\mathcal{R})\left(\sum_l \mathcal{R}_{kl}X_l\right)|\vec{r}\rangle = U(\mathcal{R})\left(\sum_l \mathcal{R}_{kl}x_l\right)|\vec{r}\rangle \\ &= (\mathcal{R}\vec{r})_k[U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle] \end{aligned}$$

ce qui montre que l'on peut définir le vecteur d'état $|\mathcal{R}\vec{r}\rangle$, c'est-à-dire fixer sa phase, par

$$|\mathcal{R}\vec{r}\rangle \equiv U(\mathcal{R})|\vec{r}\rangle \quad (10.41)$$

Si $|\psi'\rangle$ est le transformé par $U(\mathcal{R})$ de $|\psi\rangle$: $|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | U(\mathcal{R}) | \psi \rangle = \langle U^\dagger(\mathcal{R}) \vec{r} | \psi \rangle \\ &= \langle U^{-1}(\mathcal{R}) \vec{r} | \psi \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1} \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\mathcal{R}^{-1} \vec{r}) \end{aligned}$$

ce qui démontre (10.40). À première vue l'argument $\mathcal{R}^{-1}$ dans (10.40) qui s'écrit aussi

$$[U(\mathcal{R})\psi](\vec{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\vec{r})$$

peut surprendre, mais nous avons déjà rencontré une situation analogue pour les translations dans l'équation (9.15), écrite ci-dessous dans le cas de la dimension 3 avec $\hbar = 1$

$$\left[e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}} \psi \right](\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a})$$

alors que³

$$e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}} |\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{a}\rangle$$

La transformée par translation de $\vec{a}$ de la fonction $\psi(\vec{r})$ est bien $\psi(\vec{r} - \vec{a})$ et non $\psi(\vec{r} + \vec{a})$! Si l'angle de rotation ϕ devient infinitésimal pour une rotation autour de Oz

$$U[\mathcal{R}_z(\phi)] \simeq I - i\phi J_z$$

et d'après (10.40)

$$\begin{aligned} [(I - i\phi J_z)\psi](\vec{r}) &\simeq \psi(x + y\phi, -x\phi + y, z) \\ &\simeq \psi(\vec{r}) + \phi \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\ &= \psi(\vec{r}) - i\phi (XP_y - YP_x)\psi \end{aligned}$$

d'où

$$[J_z\psi](\vec{r}) = [(XP_y - YP_x)\psi](\vec{r}) = [(\vec{R} \times \vec{P})_z\psi](\vec{r}) = (\vec{L}_z\psi)(\vec{r}) \quad (10.42)$$

L'opérateur moment angulaire de la particule décrite par une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ est appelé *moment angulaire orbital* (car associé au mouvement d'une particule sur une orbite dans l'espace), et il est en général noté $\vec{L}$

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \quad (10.43)$$

3. On remarquera que cette équation fixe la phase du vecteur $|\vec{r} + \vec{a}\rangle$ relativement à celle de $|\vec{r}\rangle$, de même que (10.41) fixe la phase de $|\mathcal{R}\vec{r}\rangle$ relativement à celle de $|\vec{r}\rangle$.

$\vec{L}$ a été construit comme générateur infinitésimal de rotations et vérifie nécessairement les relations de commutation d'un moment angulaire (10.1) ou (10.2)

$$[L_j, L_k] = i \sum_l \varepsilon_{jkl} L_l \quad (10.44)$$

On peut vérifier ces relations par un calcul explicite utilisant les relations de commutation canoniques (8.45) : exercice 10.7.5. On note $|lm\rangle$ les vecteurs propres de $\vec{L}^2$ et de L_z

$$\vec{L}^2 |lm\rangle = l(l+1) |lm\rangle \quad (10.45)$$

$$L_z |lm\rangle = m |lm\rangle \quad (10.46)$$

Ces équations peuvent être transformées en équations différentielles, si l'on écrit les opérateurs L_j sous forme d'opérateurs différentiels agissant dans $L^{(2)}(\mathbb{R}^3)$. Le calcul est laborieux si l'on effectue le changement de variables $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$ mais il se simplifie si l'on utilise la propriété des L_i d'être les générateurs infinitésimaux des rotations. Le cas de L_z est particulièrement simple : considérant ψ comme fonction de (r, θ, ϕ) , nous avons

$$(e^{-i\alpha L_z} \psi) = \psi(r, \theta, \phi - \alpha)$$

et en prenant α infinitésimal

$$([I - i\alpha L_z] \psi)(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi) - \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \phi}$$

soit $L_z \psi = -i(\partial \psi / \partial \phi)$. Le calcul de L_x et L_y prend quelques lignes de plus, car dans une rotation autour de Ox ou autour de Oy les angles θ et ϕ varient tous les deux ; on trouve (exercice 10.7.5)

$$L_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (10.47)$$

$$L_{\pm} = i e^{\pm i\phi} \left(\cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \mp i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (10.48)$$

$$\vec{L}^2 = - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (10.49)$$

Les opérateurs L_j dépendent seulement des angles, et non de r , d'où la dénomination *moment angulaire*. Les fonctions propres de $\vec{L}^2$ et de L_z ne dépendent que des angles θ et ϕ ou, de façon équivalente, de $\hat{r}$. Ces fonctions propres sont appelées *harmoniques sphériques*

$$Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{r}) = \langle \hat{r} | lm \rangle \quad (10.50)$$

Les équations (10.45) et (10.46) deviennent

$$[\vec{L}^2 Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | \vec{L}^2 | lm \rangle = l(l+1) Y_l^m(\hat{r}) \quad (10.51)$$

$$[L_z Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | L_z | lm \rangle = m Y_l^m(\hat{r}) \quad (10.52)$$

tandis que (10.15) s'écrit

$$[L_{\pm} Y_l^m](\hat{r}) = \langle \hat{r} | L_{\pm} | l m \rangle = [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_l^{m \pm 1}(\hat{r})$$

L'équation (10.52) devient, compte tenu de (10.47)

$$[L_z Y_l^m](\theta, \phi) = -i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi)$$

ce qui implique

$$Y_l^m(\theta, \phi) = e^{im\phi} f_l^m(\theta) \quad (10.53)$$

La loi de transformation (10.40) montre que dans une rotation de 2π la fonction d'onde est inchangée et qu'il ne s'introduit donc aucun signe $(-)$ dans une telle rotation. Ceci implique que *les moments angulaires orbitaux sont toujours entiers*.

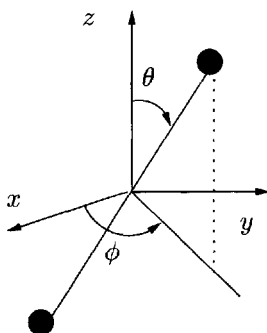


FIG. 10.2 – Rotateur sphérique.

Une application simple et importante est le rotateur sphérique : considérons une molécule diatomique en rotation autour de son centre de masse pris comme origine des coordonnées (figure 10.2 et exercice 1.6.1). Son moment d'inertie est $I = \mu r_0^2$, où μ est la masse réduite et r_0 la distance entre les noyaux (la contribution des électrons est négligeable). Si ω est la vitesse angulaire de rotation, le hamiltonien classique H_{cl} est

$$H_{cl} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} \frac{(I\omega)^2}{I} = \frac{l^2}{2I}$$

où $l = I\omega$ est le moment angulaire. La version quantique du hamiltonien est

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

et les valeurs de l'énergie sont

$$E_l = \frac{l(l+1)}{2I} \quad (10.54)$$

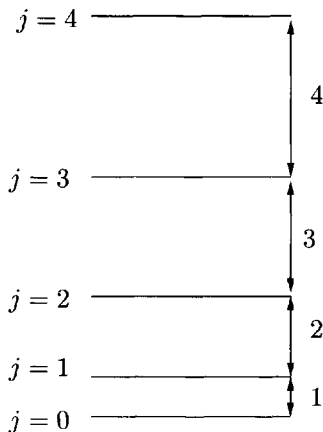


FIG. 10.3 – Spectre du rotateur sphérique. Le niveau j est séparé du niveau $(j-1)$ par j/I , ou $\hbar^2 j/I$ si l'on rétablit $\hbar$.

Les fonctions propres sont les $Y_l^m(\theta, \phi)$, où les angles θ et ϕ donnent l'orientation de la droite joignant les deux noyaux : $Y_l^m(\theta, \phi)$ est l'amplitude pour trouver cette droite orientée suivant la direction (θ, ϕ) . Le spectre des niveaux de rotation est donné dans la figure 10.3, et il reproduit bien les données expérimentales sur les spectres des molécules diatomiques.

10.3.2 Propriétés des harmoniques sphériques

Nous allons maintenant résumer les principales propriétés des harmoniques sphériques, celles qui sont les plus souvent utilisées.

1. *Base sur la sphère unité.* Les harmoniques sphériques forment une base orthonormée pour les fonctions de carré sommable sur la sphère unité $\vec{r}^2 = 1$

$$\int \sin \theta \, d\theta \, d\phi [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\theta, \phi) = \int d\Omega [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (10.55)$$

On utilise fréquemment la notation angle solide : $\Omega = (\theta, \phi)$ et

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\phi = d^2 \hat{r} \quad (10.56)$$

Si une fonction $f(\theta, \phi)$ est de carré sommable sur la sphère unité, on peut écrire un développement analogue à un développement de Fourier

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) &= \sum_{l,m} c_{lm} Y_l^m(\theta, \phi) \\ c_{lm} &= \int d\Omega [Y_l^m(\theta, \phi)]^* f(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.57)$$

2. *Relation avec les polynômes de Legendre.* Une définition possible des polynômes de Legendre $P_l(u)$ est

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (10.58)$$

$P_l(u)$ est un polynôme de degré l , de parité $(-1)^l$

$$P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$$

Les polynômes de Legendre forment un système complet de polynômes orthogonaux dans l'intervalle $[-1, +1]$. Les premiers polynômes de Legendre sont

$$P_0(u) = 1 \quad P_1(u) = u \quad P_2(u) = \frac{1}{2} (3u^2 - 1) \quad (10.59)$$

Les fonctions de Legendre associées $P_l^m(u)$ sont définies par

$$P_l^m(u) = (1 - u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad P_l^0(u) = P_l(u) \quad (10.60)$$

et on montre que les harmoniques sphériques sont reliés aux P_l^m par

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} : m > 0$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^{-m}(\theta, \phi)]^* : m < 0 \quad (10.61)$$

D'après (10.53), Y_l^0 est indépendant de ϕ et est proportionnel à $P_l(\cos \theta)$

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (10.62)$$

Comme cas particuliers, écrivons Y_l^m pour $l = 0$ et $l = 1$

$$l = 0 \quad Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$l = 1 \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_0$$

$$Y_1^\pm = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_{\pm 1} \quad (10.63)$$

À un facteur de normalisation $\sqrt{3/4\pi}$ près, les Y_1^m ne sont pas autre chose que les *composantes sphériques* du vecteur unitaire $\hat{r}$

$$\hat{r} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

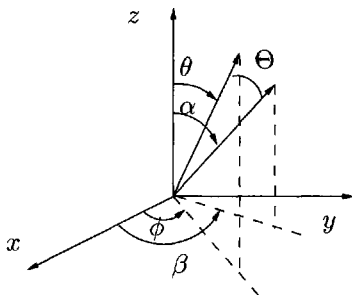


FIG. 10.4 – Configuration des angles dans (10.67).

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_0 \quad Y_1^\pm = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\hat{r}_x \pm i\hat{r}_y}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{r}_{\pm 1} \quad (10.64)$$

Ces formules justifient les conventions de phase utilisées pour les polarisations droite et gauche dans (3.11).

3. *Transformation par rotation.* En multipliant à gauche la relation (10.26) écrite pour $j = l$ par le bra $\langle \hat{r} |$ on obtient

$$Y_l^m(\mathcal{R}^{-1}\hat{r}) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(\mathcal{R}) Y_l^{m'}(\hat{r}) \quad (10.65)$$

On peut montrer également (exercice 10.7.6) une relation entre harmoniques sphériques et matrices de rotation

$$D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \quad (10.66)$$

On déduit de ces deux équations le théorème d'addition des harmoniques sphériques. En effet, prenant $\hat{r}$ suivant la direction d'angles polaires (α, β) , soit $\mathcal{R}$ la rotation d'angles (θ, ϕ) amenant $\hat{z}$ sur $\hat{n}$, et Θ l'angle entre $\hat{r}$ et la direction définie par les angles (θ, ϕ) (figure 10.4)

$$\cos \Theta = \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos(\beta - \phi)$$

L'angle Θ entre $\mathcal{R}^{-1}\hat{r}$ et l'axe des z est le même que l'angle entre $\hat{n}$ et $\hat{r}$. Il suffit alors de faire $m = 0$ dans (10.65) pour obtenir

$$P_l(\cos \Theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l [Y_l^m(\theta, \phi)]^* Y_l^m(\alpha, \beta) \quad (10.67)$$

Parité des harmoniques sphériques. L'opérateur parité Π défini au § 8.3.3 agit sur une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ suivant

$$[\Pi\psi](\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \quad (10.68)$$

Π commute avec le moment angulaire orbital $\vec{L}$, et plus généralement avec $\vec{J}$. En effet, la matrice représentative de l'opérateur parité dans l'espace à trois dimensions $\mathbb{R}^3$ est la matrice $-I$, qui commute avec toute matrice de rotation $\mathcal{R}$, d'où

$$[U(\mathcal{R}), \Pi] = 0 \Rightarrow [\vec{J}, \Pi] = 0 \quad \text{et} \quad [\vec{L}, \Pi] = 0 \quad (10.69)$$

Ceci implique les équations

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 \Pi Y_l^m &= \Pi \vec{L}^2 Y_l^m = l(l+1) \Pi Y_l^m \\ L_z \Pi Y_l^m &= \Pi L_z Y_l^m = m \Pi Y_l^m \end{aligned}$$

qui montrent que ΠY_l^m est proportionnel à Y_l^m

$$\Pi Y_l^m = \alpha(l, m) Y_l^m$$

Y_l^m est donc fonction propre de Π et comme $\Pi^2 = I$, $\alpha(l, m) = \pm 1$. Montrons que $\alpha(l, m)$ est en fait indépendant de m en utilisant le fait que L_+ commute avec Π

$$\begin{aligned} L_+ \Pi Y_l^m &= \alpha(l, m) L_+ Y_l^m = \alpha(l, m) [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} Y_l^{m+1} \\ &= \Pi L_+ Y_l^m = [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} \Pi Y_l^{m+1} \\ &= [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} \alpha(l, m+1) Y_l^{m+1} \end{aligned}$$

ce qui entraîne que $\alpha(l, m+1) = \alpha(l, m)$: $\alpha(l, m)$ est indépendant de m et

$$[\Pi Y_l^m](\hat{r}) = \alpha(l) Y_l^m(\hat{r}) = Y_l^m(-\hat{r})$$

La transformation $\hat{r} \rightarrow -\hat{r}$ correspond à

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (10.70)$$

Si $m = 0$, $Y_l^0 \propto P_l(\cos \theta)$; d'après (10.62) et compte tenu de $P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$ on trouve $\alpha(l) = (-1)^l$ et

$$\boxed{Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) \quad \text{ou} \quad Y_l^m(\hat{r}) = (-1)^l Y_l^m(-\hat{r})} \quad (10.71)$$

10.4 Particule dans un potentiel central

10.4.1 Équation d'onde radiale

Nous allons utiliser les résultats précédents pour montrer que l'équation de Schrödinger à trois dimensions, qui est une équation aux dérivées partielles, se ramène à une équation différentielle ordinaire lorsque le potentiel est un potentiel central, c'est-à-dire un potentiel invariant par rotation

$$V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$$

Dans ce cas, comme l'énergie cinétique est un opérateur scalaire, le hamiltonien total pour une particule de masse M

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + V(r) \quad (10.72)$$

est invariant par rotation : $[H, \vec{J}] = 0$. Dans notre problème, seul intervient le moment angulaire orbital, puisque les seuls opérateurs dont nous disposons sont $\vec{P}$ et $\vec{R}$

$$[H, \vec{L}] = 0 \quad \text{ou} \quad [H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = 0 \quad (10.73)$$

Dans l'espace $L_{\vec{r}}^{(2)}(\mathbb{R}^3)$, l'opérateur énergie cinétique est proportionnel au laplacien ∇^2

$$\begin{aligned} -\vec{P}^2 &= -(-i\nabla)^2 = \nabla^2 \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \end{aligned} \quad (10.74)$$

en écrivant le laplacien en coordonnées polaires. Comparant avec (10.49), on reconnaît dans la partie angulaire du laplacien l'opérateur $\vec{L}^2$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \quad (10.75)$$

Cette équation confirme la relation de commutation $[H, \vec{L}] = 0$, puisque $[\vec{L}^2, \vec{L}] = 0$ et que la partie radiale du laplacien, qui ne dépend pas des angles, commute manifestement avec $\vec{L}$. Nous pouvons donc écrire le hamiltonien (10.72)

$$H = -\frac{1}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2Mr^2} \vec{L}^2 + V(r) \quad (10.76)$$

Compte tenu de leurs relations de commutation, nous savons qu'il est possible de diagonaliser simultanément H , $\vec{L}^2$ et L_z . Soit $\psi_{lm}(\vec{r})$ une fonction propre commune à ces trois opérateurs. Comme il n'existe qu'un seul harmonique sphérique (l, m) , si

$$\vec{L}^2 \psi_{lm} = l(l+1) \psi_{lm} \quad \text{et} \quad L_z \psi_{lm} = m \psi_{lm}$$

alors ψ_{lm} doit être proportionnel⁴ à Y_l^m

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = f_l(r) Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (10.77)$$

4. Nous anticipons sur le fait, prouvé quelques lignes plus bas, que f_l ne dépend pas de m .

Il est commode de factoriser $1/r$: $u_l(r)$ est la *fonction d'onde radiale*. Examinons l'action de H sur ψ_{lm}

$$H\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \left[-\frac{1}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_l(r) + \left(\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) \frac{u_l(r)}{r} \right] Y_l^m(\theta, \phi)$$

L'équation aux valeurs propres

$$H\psi_{lm} = E_l\psi_{lm}$$

devient

$$\boxed{\left[-\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E_l u_l(r)} \quad (10.78)$$

La fonction d'onde radiale et l'énergie sont affectées uniquement d'un indice l , et non m , car elles sont indépendantes de m d'après (10.78). *Chaque valeur de l'énergie aura donc – au moins – une dégénérescence $(2l+1)$* . Ceci aurait pu être prévu à partir de la relation de commutation $[H, L_{\pm}] = 0$: si

$$H\psi_{lm} = E_{lm}\psi_{lm},$$

en utilisant un raisonnement analogue à celui qui nous a permis de montrer que $\alpha(l, m)$ est indépendant de m , on déduit que E_{lm} est indépendant de m (exercice 10.7.7). Pour chaque valeur du moment angulaire l , ou pour chaque *onde partielle* l , nous avons réduit l'équation de Schrödinger à une équation différentielle ordinaire dans la seule variable r . Suivant une tradition historique, les ondes partielles sont étiquetées $s, p, d, f, g, h, \dots$

$l = 0$: onde s ; $l = 1$: onde p ; $l = 2$: onde d ; $l = 3$: onde f

et ensuite par ordre alphabétique : $l = 4$: onde g , etc. Dans chaque onde partielle, l'équation (10.78) montre que le potentiel $V(r)$ doit être remplacé par un *potentiel effectif* $V_l(r)$ (figure 10.5)

$$V_l(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} \quad (10.79)$$

Le terme $l(l+1)/(2Mr^2)$ est appelé terme de *barrière centrifuge*. Ce terme est aussi présent en mécanique classique, où l'énergie peut s'écrire

$$E = \frac{1}{2} M \vec{v}^2 + V(r) = \frac{1}{2} M (v_r^2 + \omega^2 r^2) + V(r)$$

v_r est la vitesse radiale et ω la vitesse angulaire. Comme⁵ $l = M\omega r^2$ et que $\vec{l}$ est constant dans le cas d'une force centrale

$$E = \frac{1}{2} M v_r^2 + \frac{l^2}{2Mr^2} + V(r) = \frac{1}{2} M v_r^2 + V_l(r)$$

5. Suivant notre convention habituelle, les lettres minuscules désignent des quantités classiques (nombres), ou des nombres quantiques.

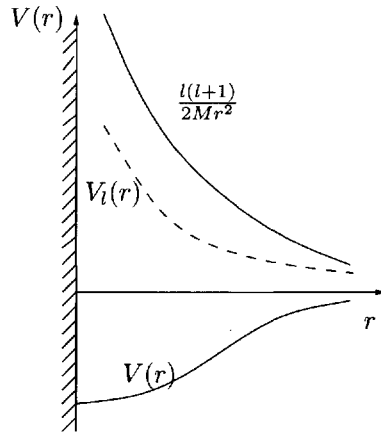


FIG. 10.5 – Potentiel effectif. Les lignes en trait plein représentent les potentiels $V(r)$ et la barrière centrifuge $l(l+1)/(2mr^2)$ et les tirets leur somme, le potentiel effectif $V_l(r)$ dans l'onde partielle de moment angulaire l .

Le terme $l^2/(2Mr^2)$ correspond à la force centrifuge

$$-\frac{d}{dr} \left(\frac{l^2}{2Mr^2} \right) = \frac{l^2}{Mr^3} = M\omega^2 r$$

Ce terme tend à éloigner la particule du centre de force et correspond à un potentiel répulsif. En mécanique quantique, on remplacera pour chaque valeur de l l'opérateur $\tilde{L}^2$ par sa valeur propre $l(l+1)$, et au potentiel $V(r)$ s'ajoutera un potentiel répulsif $l(l+1)/(2Mr^2)$.

Toutes les fonctions $\psi_{lm}(\vec{r})$ de type (10.77) avec $u_l(r)$ solution de (10.78) ne sont pas acceptables physiquement. En effet, si la fonction $\psi_{lm}(\vec{r})$ représente un état lié, elle doit obéir à la condition de normalisation

$$\int d^3r |\psi_{lm}(\vec{r})|^2 = 1 \quad (10.80)$$

Si $\psi_{lm}(\vec{r})$ représente un état de diffusion, un comportement à l'infini en onde plane $+\exp(ikr)/r$ est acceptable (cf. (10.81)). Dans le cas d'un état lié, l'équation (10.78) possède en général à l fixé plusieurs solutions : en effet, cette équation est identique à celle d'un problème unidimensionnel dans l'intervalle $[0, +\infty[$, car $0 \leq r < \infty$, le potentiel effectif étant le potentiel $V_l(r)$ (10.79). La fonction d'onde radiale et l'énergie sont étiquetées par un nombre quantique supplémentaire n' : $n' = 0, 1, 2, \dots$. La fonction d'onde et l'énergie seront notées $u_{n'l}(r)$ et $E_{n'l}$. Si le potentiel $V(r)$ est suffisamment régulier, on montre que n' est égal au nombre de zéros, aussi appelé nombre de nœuds, de la fonction d'onde radiale $u_{n'l}(r)$ (cf. § 9.3.3). Le nombre quantique n' classe

les valeurs de l'énergie par ordre croissant

$$n'_1 > n'_2 \Rightarrow E_{n'_1 l} > E_{n'_2 l}$$

Nous verrons au chapitre 12 que les fonctions d'onde des états de diffusion sont étiquetées par le vecteur d'onde $\vec{k}$

$$r \rightarrow \infty : \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (10.81)$$

Il est possible d'analyser le comportement des fonctions d'onde $u_{n'l}(r)$ pour $r \rightarrow 0$. En effet, dans tous les cas d'intérêt physique, le terme de barrière centrifuge est le plus singulier lorsque $r \rightarrow 0$ et il contrôle le comportement de $u_{nl}(r)$ dans cette limite. Si l'on suppose un comportement en loi de puissances⁶

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^\alpha$$

et que l'on reporte dans (10.78), on obtient pour les deux termes les plus singuliers en $r^{\alpha-2}$

$$-\frac{1}{2M} \alpha(\alpha-1) r^{\alpha-2} + \frac{l(l+1)}{2M} r^{\alpha-2} = 0$$

ce qui implique

$$\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$$

soit $\alpha = l+1$ ou $\alpha = -l$. La seconde valeur est exclue car l'intégrale dans (10.80) divergerait à l'origine, sauf si $l = 0$. Cependant, pour $l = 0$, une solution $u_0(r) \propto \text{cte}$, soit $\psi_l(\vec{r}) \propto 1/r$, bien que normalisable, n'est pas acceptable car elle ne peut pas être solution de l'équation de Schrödinger ; en effet

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

En résumé, le comportement des fonctions d'onde radiales pour $r \rightarrow 0$ est

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^{l+1} \quad (10.82)$$

La fonction d'onde radiale s'annule à l'origine. Ceci peut se comprendre intuitivement : comme $0 \leq r < \infty$, tout se passe comme s'il y avait une barrière de potentiel infinie à $r = 0$, et nous savons que dans ce cas (voir § 9.3.2) la fonction d'onde doit s'annuler. Toutefois, les solutions en r^{-l} peuvent être utiles dans la résolution de l'équation de Schrödinger lorsque l'on se trouve dans une région où r est strictement positif.

L'exemple de l'atome d'hydrogène, étudié dans la sous-section suivante, conduit à redéfinir le nombre quantique radial

$$n' \rightarrow n = n' + l + 1 \quad (10.83)$$

6. La loi de puissances donnant le comportement à l'origine ne dépend pas du nombre quantique n' ou de k , et nous supprimons la dépendance en n' ou en k .

10.4.2 Atome d'hydrogène

Les résultats de la sous-section précédente permettent d'aborder le calcul des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène, un des quelques problèmes physiques pour lesquels on dispose d'une solution analytique. La masse M dans (10.78) est la masse de l'électron m_e , ou plus exactement la masse réduite μ (exercice 8.5.6)

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e \quad (10.84)$$

où m_p est la masse du proton. Nous conserverons néanmoins m_e dans les équations, afin de souligner l'ordre de grandeur (à 0.1 % près !) de la masse pertinente dans ce problème. Le potentiel $V(r)$ est le potentiel coulombien attractif entre l'électron et le proton

$$V(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{r} \quad (10.85)$$

et l'équation (10.78) devient

$$\left[-\frac{1}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r) \quad (10.86)$$

Il est toujours conseillé en physique de rendre les équations adimensionnelles par des changements de variables appropriés. Dans le présent problème, l'unité de longueur naturelle est le rayon de Bohr (1.34) $a_0 = 1/(m_e e^2)$ et l'unité d'énergie le Rydberg (1.35) $R_\infty = e^2/(2a_0) = m_e e^4/2^7$. Ceci suggère de définir les quantités sans dimensions x et ε_{nl}

$$x = \frac{r}{a_0} = m_e e^2 r \quad \varepsilon_{nl} = -\frac{E_{nl}}{R_\infty} = -\frac{2a_0 E_{nl}}{e^2} \quad (10.87)$$

Dans la suite du calcul, nous nous limitons aux états liés pour lesquels $E_{nl} < 0$ et donc $\varepsilon_{nl} > 0$, ce qui explique le choix du signe moins. Définissant également

$$v_{nl}(x) = u_{nl}(r) = u_{nl}(a_0 x)$$

nous obtenons après simplification par $(2m_e a_0^2)^{-1}$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{2}{x} \right] v_{nl}(x) = -\varepsilon_{nl} v_{nl}(x) \quad (10.88)$$

Nous nous contenterons de déterminer la solution dans le cas $l = 0$, c'est-à-dire dans l'onde s , en renvoyant le cas général à l'exercice 10.7.9. Afin d'alléger les notations, nous posons

$$v_{n0}(x) = v(x) \quad \varepsilon_{n0} = \varepsilon$$

7. Rappelons que nous avons choisi un système d'unités où $\hbar = 1$: si l'on rétablit $\hbar$, $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ et $R_\infty = m_e e^4/(2\hbar^2)$.

et (10.88) devient

$$\frac{d^2 v(x)}{dx^2} = \left(\varepsilon - \frac{2}{x} \right) v(x)$$

D'après la sous-section précédente, nous savons que $v(x) \propto x$ pour $x \rightarrow 0$. Cherchons le comportement dominant pour $x \rightarrow \infty$ en négligeant le terme en $2/x$. Nous avons alors⁸

$$v(x) \sim \exp(\pm \sqrt{\varepsilon} x)$$

Le comportement en $\exp(\sqrt{\varepsilon} x)$ est inacceptable car la fonction d'onde ne serait pas normalisable, en raison de la divergence exponentielle. Le seul comportement possible est en $\exp(-\sqrt{\varepsilon} x)$. Afin d'intégrer l'information contenue dans le comportement à l'infini, définissons une nouvelle fonction $f(x)$ par

$$v(x) = e^{-\alpha x} f(x) \quad \alpha^2 = \varepsilon$$

Ce changement de fonction transforme l'équation différentielle pour $v(x)$ en

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - 2\alpha \frac{df}{dx} + \frac{2}{x} f = 0 \quad (10.89)$$

Cherchons pour $f(x)$ un développement en puissances de x , sachant que $f(x) \propto x$ pour $x \rightarrow 0$

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k \quad (10.90)$$

L'équation (10.89) détermine une relation de récurrence sur les coefficients a_k

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-2} - 2\alpha \sum_{k=1}^{\infty} k a_k x^{k-1} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^{k-1} = 0$$

En remarquant que pour $k=1$ le premier terme de l'équation précédente s'annule et en réétiquetant k

$$\sum_{k=1}^{\infty} [k(k+1) a_{k+1} - 2(\alpha k - 1) a_k] x^{k-1} = 0 \quad (10.91)$$

L'annulation du coefficient de x^{k-1} donne une relation entre a_{k+1} et a_k

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} a_k$$

Si l'on fixe arbitrairement a_1 , tous les a_k se déduisent de a_1 . Pour $k \gg 1$ la relation de récurrence est approximativement

$$a_{k+1} \simeq \frac{2\alpha}{k} a_k \Rightarrow a_k \simeq \frac{(2\alpha)^k}{k!} a_1$$

8. En fait ce comportement n'est déterminé qu'à un polynôme multiplicatif près.

et

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k \sim \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2\alpha)^k}{k!} a_1 x^k \sim a_1 e^{2\alpha x}$$

Ce comportement entraîne pour $x \rightarrow \infty$

$$v(x) \sim e^{2\alpha x} e^{-\alpha x} \sim a_1 e^{\alpha x}$$

qui rend la fonction d'onde non normalisable. La seule façon d'éviter la divergence exponentielle est que développement (10.90) s'arrête pour une valeur entière $k = n$, ce qui ne peut se produire que si $\alpha n = 1$. Les valeurs possibles de ε sont donc étiquetées par un entier n

$$\varepsilon_n = \alpha^2 = \frac{1}{n^2}$$

et il en est de même pour celles de l'énergie

$$E_n = E_{n0} = -\frac{me^4}{2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_{\infty}}{n^2} \quad (10.92)$$

L'exercice 10.7.9 montre que les énergies possibles pour $l \neq 0$ sont de la forme

$$E_{nl} = -\frac{R_{\infty}}{n^2} \quad n = l + 1, l + 2, \dots \quad (10.93)$$

Les fonctions d'onde radiales $v_{n0}(x)$ pour $n = 1$ et 2 des états liés de l'atome d'hydrogène dans l'onde s , normalisées à un, sont données par

$$v_{10}(x) = 2e^{-x} \quad (10.94)$$

$$v_{20}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{x}{2}\right) e^{-x/2} \quad (10.95)$$

La fonction d'onde radiale de l'état $n = 2, l = 1$ (onde p) est

$$v_{21}(x) = \frac{1}{2\sqrt{6}} x e^{-x/2} \quad (10.96)$$

En conclusion, nous avons obtenu le spectre de l'atome d'hydrogène (figure 10.6). On remarque que les niveaux sont dégénérés, sauf dans le cas $n = 1$. Pour une valeur donnée de n , toutes les valeurs de l comprises entre $l = 0$ et $l = n - 1$ sont possibles, et la dégénérescence est

$$G(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

Cette dégénérescence est propre au potentiel coulombien. Le spectre de

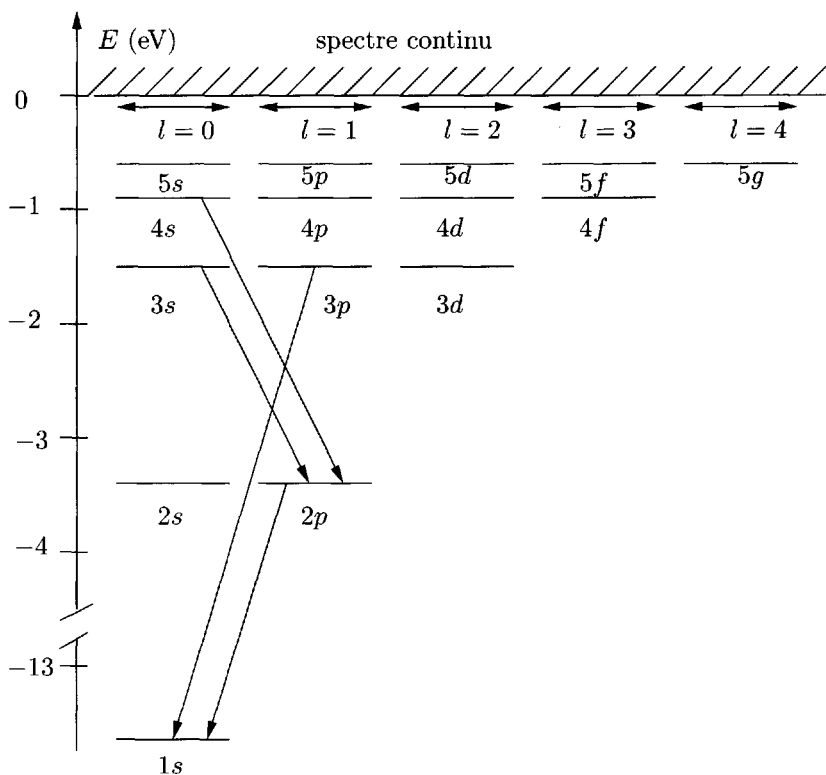


FIG. 10.6 – Spectre de l'atome d'hydrogène.

l'électron externe d'un alcalin est qualitativement semblable à celui de l'atome d'hydrogène (figure 10.7), mais il n'y a plus de dégénérescence. En mécanique classique, le potentiel coulombien présente aussi une particularité remarquable : il est le seul, avec le potentiel harmonique $V(r) \propto r^2$, pour lequel les trajectoires se referment sur elles-mêmes⁹. Dans les deux cas, cette propriété du mouvement classique, ainsi que les dégénérescences associées du problème quantique, ont pour origine une symétrie supplémentaire. Cette symétrie conduit à une loi de conservation supplémentaire, celle du vecteur de Lenz dans le cas coulombien.

9. Les deux comportements peuvent être reliés : cf. Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 11, exercice 3.

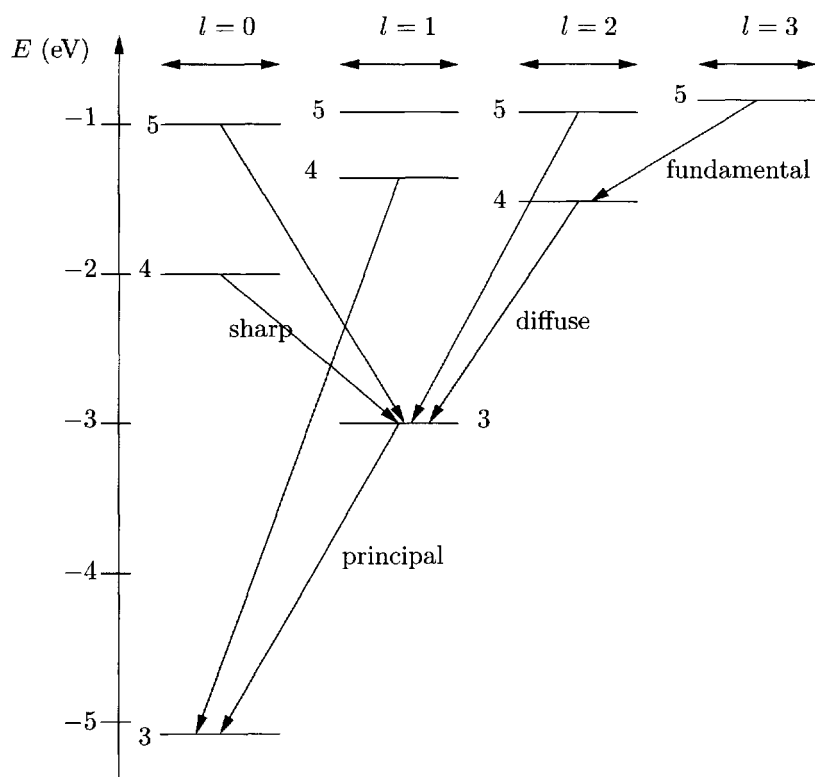


FIG. 10.7 – Spectre de l'atome de sodium.

10.5 Distributions angulaires des désintégrations

10.5.1 Rotations de π , parité, réflexion par rapport à un plan

Dans cette section, nous nous proposons d'étudier les désintégrations d'une particule C en deux particules A et B

$$C \rightarrow A + B \quad (10.97)$$

Nous choisissons un référentiel d'inertie où la particule C est au repos ; les particules A et B partent donc avec des impulsions opposées $\vec{p}$ et $-\vec{p}$ respectivement. Les processus (10.97) comprennent les *désintégrations (ou transitions) radiatives*, avec émission d'un photon : un niveau excité A^* d'un atome, d'une molécule ou d'un noyau atomique émet un photon γ tandis que le système passe dans un niveau d'énergie inférieure A , qui peut être ou non

l'état fondamental

$$A^* \rightarrow A + \gamma \quad (10.98)$$

Les états A^* et A peuvent aussi correspondre à des particules différentes, comme par exemple dans la désintégration (exercice 10.7.17)

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma \quad (10.99)$$

où les particules Σ^0 et Λ^0 sont des particules neutres formées d'un quark up, un quark down et un quark étrange.

L'invariance par rotation du hamiltonien responsable de la désintégration entraîne la conservation du moment angulaire, ce qui conduit à des contraintes sur les amplitudes de désintégration et à des conséquences importantes sur la distribution angulaire des particules finales. Si le hamiltonien responsable de la désintégration est invariant par parité, ce qui est le cas pour les interactions électromagnétiques et fortes, mais non pour les interactions faibles, on obtiendra des contraintes supplémentaires. Il est commode d'introduire l'opérateur $\mathcal{Y}$, produit d'une rotation de π autour de l'axe Oy et de l'opération parité Π (§ 8.3.3)

$$Y = e^{-i\pi J_y} \quad \mathcal{Y} = Y \Pi = e^{-i\pi J_y} \Pi = \Pi e^{-i\pi J_y} \quad (10.100)$$

Cette opération n'est autre qu'une réflexion par rapport au plan xOz : $\mathcal{Y}$ est l'opérateur de réflexion par rapport à ce plan. Étudions tout d'abord l'action de Y . Cet opérateur transforme J_x en $-J_x$, J_z en $-J_z$ et laisse J_y inchangé

$$Y^{-1} J_z Y = -J_z \quad Y^{-1} J_{\pm} Y = -J_{\mp} \quad (10.101)$$

Examinons l'action de Y sur un état $|jm\rangle$

$$J_z(Y|jm\rangle) = -Y J_z |jm\rangle = -m(Y|jm\rangle)$$

L'état $|jm\rangle$ est donc égal à $|j, -m\rangle$ à un facteur de phase près

$$Y|jm\rangle = e^{i\alpha(j,m)} |j, -m\rangle$$

car Y est unitaire et conserve la norme. Ce résultat n'est pas surprenant car l'action de Y équivaut à renverser la direction de l'axe de quantification du moment angulaire. Suivant une stratégie déjà mise en œuvre dans le cas de la parité, on utilise l'action de J_+ pour relier $\alpha(j, m)$ à $\alpha(j, m+1)$

$$\begin{aligned} J_+ Y |jm\rangle &= e^{i\alpha(j,m)} J_+ |j, -m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} e^{i\alpha(j,m)} |j, -m+1\rangle \\ &= -Y J_- |jm\rangle = -\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} Y |j, m-1\rangle \\ &= -\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} e^{i\alpha(j,m-1)} |j, -m+1\rangle \end{aligned}$$

soit

$$e^{i\alpha(j,m-1)} = -e^{i\alpha(j,m)}$$

Comme Y est une rotation de π , Y^2 est une rotation de 2π , $Y^2 = (-1)^{2j}$ et

$$Y^2|jm\rangle = e^{i\alpha(j,m)}e^{i\alpha(j,-m)}|jm\rangle = e^{2i\alpha(j,m)}(-1)^{2m}|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle$$

d'où les deux solutions possibles

$$e^{i\alpha(j,m)} = (-1)^{j-m} \quad \text{ou} \quad e^{i\alpha(j,m)} = (-1)^{j+m}$$

Les deux solutions sont identiques pour j entier, et pour $j = 1/2$ on vérifie sur (10.38) que la première solution est la bonne ; on peut montrer que c'est aussi le cas pour tout j demi-entier. En fin de compte

$$\boxed{Y|jm\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle \quad Y^{-1}|jm\rangle = (-1)^{j+m}|j, -m\rangle} \quad (10.102)$$

10.5.2 Transitions dipolaires

Nous examinons dans cette sous-section les transitions radiatives du type (10.98). Revenons tout d'abord sur la description de la polarisation d'un photon que nous avons étudiée au chapitre 3, en la replaçant dans le cadre général du moment angulaire. Nous avons déterminé le générateur infinitésimal des rotations de la polarisation lorsque la rotation se faisait autour de la direction de propagation, prise comme axe Oz . Dans la base des états de polarisation linéaire $|x\rangle$ et $|y\rangle$, ce générateur infinitésimal est donné par (3.26)

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

En effet nous avons vu en (3.29) que $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ effectue une rotation d'angle θ de la polarisation dans le plan xOy , et on peut identifier Σ_z et la composante z du moment angulaire du photon : $\Sigma_z = J_z$. L'action de l'opérateur $\exp(-i\theta\Sigma_z)$ sur les états de polarisation circulaire droite $|D\rangle$ et gauche $|G\rangle$ (3.11) est d'après (3.27)

$$\exp(-i\theta\Sigma_z)|D\rangle = e^{-i\theta}|D\rangle \quad \exp(-i\theta\Sigma_z)|G\rangle = e^{i\theta}|G\rangle$$

ce qui prouve que les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ ont des nombres quantiques magnétiques $m = 1$ et $m = -1$ respectivement¹⁰. Par ailleurs la description du champ électromagnétique par un potentiel vecteur montre que le photon a un caractère vectoriel, et donc un spin 1, ce qui permet l'identification de $|D\rangle$ et $|G\rangle$ avec des états $|jm\rangle$ (figure 10.8)

$$|D\rangle = |j = 1, m = 1\rangle = |11\rangle \quad |G\rangle = |j = 1, m = -1\rangle = |1, -1\rangle \quad (10.103)$$

l'axe de quantification Oz du moment angulaire étant pris le long de la direction de propagation du photon. La valeur de m est appelée *l'hélicité*

10. Un argument équivalent consiste à remarquer que $\Sigma_z|D\rangle = |D\rangle$ et que $\Sigma_z|G\rangle = -|G\rangle$.

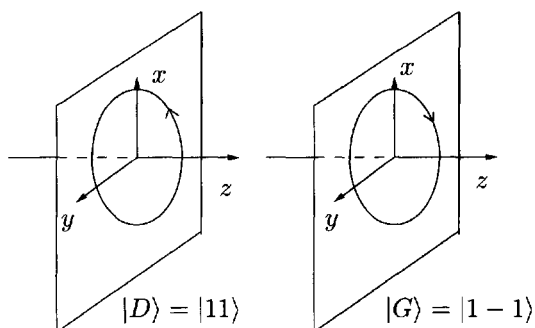


FIG. 10.8 – (a) Polarisation circulaire droite (b) Polarisation circulaire gauche.

du photon : $m = +1$ correspond à une hélicité positive, $m = -1$ à une hélicité négative. Comme à un moment angulaire 1 correspondent trois valeurs possibles du nombre quantique magnétique, $m = +1$, $m = 0$, $m = -1$, on peut se demander ce que devient la valeur $m = 0$ dans le cas du photon. Une analyse générale due à Wigner montre que pour une particule de masse nulle et de spin j , les seules valeurs propres permises de J_z sont $m = j$ et $m = -j$, l'axe Oz étant pris le long de la direction de propagation de la particule. Lorsque la parité n'est pas une symétrie du hamiltonien, les deux valeurs possibles sont indépendantes : si le neutrino avait une masse nulle¹¹, le neutrino, particule de spin $j = 1/2$, aurait toujours $m = -1/2$, et l'antineutrino, particule *différente*, $m = +1/2$. Les interactions du photon, qui sont les interactions électromagnétiques, conservent la parité, ce qui fait que la même particule peut avoir $m = 1$ et $m = -1$.

Il reste à vérifier que la définition (10.103) correspond bien à une base standard du moment angulaire. Nous allons utiliser l'opérateur $Y = \exp(-i\pi J_y)$ qui change la direction de propagation du photon. Son action sur les états de polarisation linéaire est (figure 10.9)

$$Y|x\rangle = -|x\rangle \quad Y|y\rangle = |y\rangle$$

On en déduit l'action sur les états de polarisation circulaire $|D\rangle$ et $|G\rangle$ (3.11)

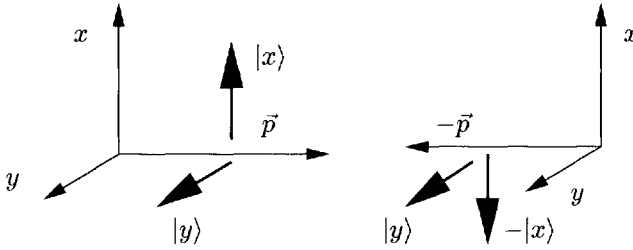
$$Y|D\rangle = Y \left[\frac{-1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle) = |G\rangle \quad (10.104)$$

La phase relative des états $|D\rangle$ et $|G\rangle$ correspond bien à celle d'une base standard puisque d'après (10.102)

$$Y|D\rangle = Y|1, 1\rangle = (-1)^{1-1}|1, -1\rangle = |G\rangle$$

Le choix (3.11) est aussi confirmé par le fait que $|D\rangle$ et $|G\rangle$ sont donnés par les mêmes combinaisons que composantes sphériques $\hat{r}_1$, $\hat{r}_{-1}$ et $\hat{r}_0$ (10.64) de $\hat{r}$.

11. Ce qui a longtemps semblé probable, mais apparemment n'est pas le cas : exercice 4.3.6 et la note 4 du chapitre 1.

FIG. 10.9 – Action de Y sur les états de polarisation linéaire.

Appelons $\vec{p}$ l'impulsion du photon, que nous choisissons comme axe Oz , soit $|jm\rangle$ l'état de moment angulaire de A^* – on dit souvent que l'état excité a un spin j –, $|j'm'\rangle$ l'état de moment angulaire du niveau final A , ou spin du niveau final A , et $|\mu\rangle$ celui du photon. En raison de l'invariance par rotation, le moment angulaire est conservé dans la transition

$$\vec{J} = \vec{J}' + \vec{S} + \vec{L}$$

où $\vec{S}$ est le spin du photon et $\vec{L}$ le moment angulaire orbital. Projetant cette équation sur Oz donne

$$m = m' + \mu + m_l$$

Il est facile de se convaincre que le nombre quantique magnétique du moment angulaire orbital est nul : $m_l = 0$. En effet, la fonction d'onde spatiale du photon est une onde plane

$$e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = e^{ipz}$$

qui est invariante par rotation autour de Oz : la composante suivant Oz du moment angulaire orbital doit être nulle. On peut aussi remarquer que d'après (10.47)

$$L_z e^{ipz} = -i \frac{\partial}{\partial \phi} e^{ipz} = 0$$

La conservation du moment angulaire suivant Oz donne donc

$$\begin{array}{ll} \text{photon droit final} & m = m' + 1 \\ \text{photon gauche final} & m = m' - 1 \end{array} \quad (10.105)$$

Si A et A^* ont un spin nul ($j = j' = 0$), alors $m = m' = 0$ et les équations (10.105) n'ont pas de solution : il n'y a pas de transition radiative à un seul photon $j = 0 \rightarrow j' = 0$, souvent appelée transition $0 \rightarrow 0$. Les transitions radiatives $0 \rightarrow 0$ ne sont possibles qu'avec l'émission d'au moins deux photons, et la probabilité d'une telle transition est défavorisée par une puissance de la constante de structure fine $\alpha \simeq 1/137$.

Un cas plus intéressant, et qui se présente souvent en pratique, est celui où $j = 1$ et $j' = 0$. Si le photon est émis suivant Oz avec une hélicité $\mu = \pm 1$,

deux cas sont possibles, compte tenu de $j' = m' = 0$

$$\text{photon droit final} \quad m = 1 \quad \mu = 1 \quad (10.106)$$

$$\text{photon gauche final} \quad m = -1 \quad \mu = -1 \quad (10.107)$$

Soit a l'amplitude de probabilité de (10.106), b celle de (10.107). Il faut bien comprendre qu'il s'agit de l'amplitude de probabilité d'une *transition*, analogue à celle calculée en (9.167), et non des amplitudes de probabilité telles qu'elles sont définies dans le postulat II du chapitre 4. Le module carré d'une amplitude de transition donne la probabilité de transition par unité de temps. Les amplitudes a et b peuvent être vues comme les éléments de matrice d'un opérateur T , appelé *matrice de transition*, calculable, au moins formellement, en fonction du hamiltonien et qui a les mêmes symétries que le hamiltonien. Anticipant sur ce qui va suivre, on définit un angle θ qui est l'angle entre la direction d'émission prise dans le plan xOz du photon et l'axe Oz , et on écrit les amplitudes de transition a et b (dans (10.105) $m' = 0$ puisque $j' = 0$)

$$a = \langle D, \theta = 0 | T | j = 1, m = 1 \rangle = \langle D, \theta = 0 | T | 11 \rangle \quad (10.108)$$

$$b = \langle G, \theta = 0 | T | j = 1, m = -1 \rangle = \langle G, \theta = 0 | T | 1, -1 \rangle$$

Si la parité est une symétrie du hamiltonien responsable de la transition, T commute avec $\mathcal{Y}$ (10.100) : comme les deux amplitudes a et b correspondent à des transitions qui se déduisent l'une de l'autre par une réflexion par rapport au plan xOz (figure 10.10 (a) et (b)), on doit avoir $|a| = |b|$. Pour déterminer la phase dans cette relation, on utilise

$$\begin{aligned} a &= \langle D, \theta = 0 | \mathcal{Y}^{-1} T \mathcal{Y} | 1, 1 \rangle = \eta_\gamma \eta_A \eta_{A^*} \langle G, \theta = 0 | T | 1, -1 \rangle \\ &= \eta_\gamma \eta_A \eta_{A^*} b \end{aligned} \quad (10.109)$$

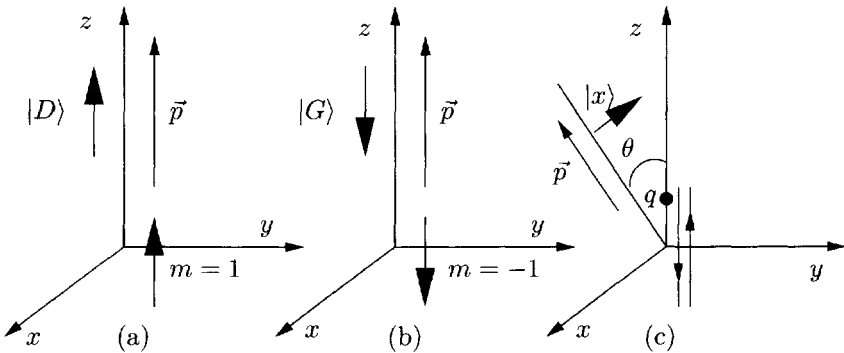


FIG. 10.10 – Émission de photons avec $\vec{p} \parallel Oz$. Les amplitudes (a) et (b) se déduisent l'une de l'autre par réflexion par rapport au plan xOz . (c) Polarisation linéaire du photon final. La charge q effectue un mouvement oscillant le long de Oz .

où $\eta_X = \pm 1$ est la parité d'une particule X : si la particule X a une impulsion $\vec{p}$ et que l'on écrit son vecteur d'état $|X, \vec{p}\rangle$

$$\Pi|X, \vec{p}\rangle = \eta_X|X, -\vec{p}\rangle \quad (10.110)$$

La description du champ électromagnétique par un potentiel vecteur, qui est un vecteur polaire, montre que la parité du photon est $\eta_\gamma = -1$. Soit $\eta = \eta_A \eta_{A^*}$; il y a deux cas possibles

- | | | |
|----|-------------|----------|
| 1. | $\eta = -1$ | $a = b$ |
| 2. | $\eta = +1$ | $a = -b$ |

Nous allons montrer que le premier cas est celui d'une transition dipolaire électrique, le second celui d'une transition dipolaire magnétique¹², par comparaison avec le cas classique le plus simple, le rayonnement d'une charge se déplaçant le long de Oz avec un mouvement harmonique. Le moment angulaire classique de cette charge par rapport à l'origine, et en particulier sa composante suivant z , est toujours nul, et le cas quantique se rapprochant le plus de cette situation est celui où l'état excité A^* possède un moment angulaire nul suivant Oz , c'est-à-dire qu'il est dans l'état $|j = 1, m = 0\rangle$. Afin de comparer la distribution angulaire du photon avec celle du rayonnement classique, il nous faut envisager le cas où l'angle d'émission du photon $\theta \neq 0$, l'état initial de l'atome étant $|10\rangle$. On obtient l'état $|D, \theta\rangle$ ($|G, \theta\rangle$) du photon par une rotation d'angle θ autour de Oy à partir de $|D, \theta = 0\rangle$ ($|G, \theta = 0\rangle$)

$$\begin{aligned} |D, \theta\rangle &= U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|D, \theta = 0\rangle \\ |G, \theta\rangle &= U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]|G, \theta = 0\rangle \end{aligned}$$

L'amplitude d'émission dans la direction θ , par exemple pour un photon droit et un état initial $|j = 1, m = 0\rangle$, est

$$\begin{aligned} a_D^{m=0}(\theta) &= \langle D, \theta | T | 10 \rangle = \langle D, \theta = 0 | U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] T | 10 \rangle \\ &= \langle D, \theta = 0 | T U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | 10 \rangle \\ &= \langle D, \theta = 0 | T | 11 \rangle \langle 11 | U^\dagger[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | 10 \rangle \\ &= a d_{01}^{(1)}(\theta) = \frac{a}{\sqrt{2}} \sin \theta \end{aligned} \quad (10.111)$$

Nous avons utilisé l'invariance par rotation de T , introduit un ensemble d'états intermédiaires dans le sous-espace $j = 1$, $\sum_m |1m\rangle \langle 1m|$ et obtenu l'élément de matrice de rotation grâce à (10.39). Un calcul analogue donne pour l'émission d'un photon gauche

$$a_G^{m=0}(\theta) = b d_{0-1}^{(1)}(\theta) = -\frac{b}{\sqrt{2}} \sin \theta \quad (10.112)$$

12. Ce résultat dépend des conventions de signe utilisées pour les états $|D\rangle$ et $|G\rangle$; on trouve le signe opposé dans Feynman *et al.* [1965], volume III, section 18.1, en raison d'une convention de signe différente dans la définition de $|D\rangle$.

Si la polarisation finale est linéaire, on peut la décomposer sur les états¹³ $|x\rangle$ polarisés dans le plan xOz et $|y\rangle$ polarisés suivant Oy (figure 10.10 (c))

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|D\rangle + |G\rangle) \quad |y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|D\rangle + |G\rangle) \quad (10.113)$$

on déduit

$$a_x^{m=0}(\theta) = \langle x, \theta | T | 10 \rangle = -\frac{1}{2}(a+b) \sin \theta \quad (10.114)$$

$$a_y^{m=0}(\theta) = \langle y, \theta | T | 10 \rangle = \frac{i}{2}(a-b) \sin \theta$$

Dans le cas dipolaire électrique $a = b$ les photons sont polarisés suivant Ox ; dans le cas dipolaire magnétique ils sont polarisés suivant Oy . C'est bien ce qui correspond au cas classique : si l'on prend par exemple une charge animée d'un mouvement d'oscillation harmonique suivant Oz , avec un moment angulaire nul suivant Oz , le rayonnement est polarisé dans le plan xOz . Au contraire, un dipôle magnétique donnerait un rayonnement polarisé suivant Oy . Une transition dipolaire électrique correspond à $\eta = -1$, et donc à un état initial et final ayant des parités opposées, tandis qu'une transition dipolaire magnétique correspond à un état initial et un état final ayant la même parité. Dans les deux cas, la distribution angulaire est en $\sin^2 \theta$.

10.5.3 Désintégrations : cas général

Revenons à la désintégration générale à deux corps (10.97), en appelant j_A , j_B et j_C les spins des particules A , B et C . Définissons les amplitudes de transition pour un état initial $|j_C m_C\rangle$ de la particule C vers les états finaux $|j_A m_A\rangle$ et $|j_B m_B\rangle$ des particules A et B , et supposons la particule A émise avec une impulsion $\vec{p}$ dirigée suivant une direction (θ, ϕ)

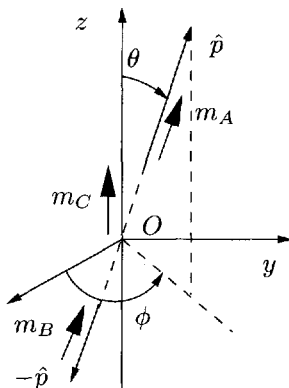
$$a_{m_A m_B}^{m_C}(\theta, \phi) = \langle m_A m_B; (\theta, \phi) | T | m_C \rangle \quad (10.115)$$

Si la particule A est émise dans la direction $\hat{p} = (\theta, \phi)$, l'état

$$|m_A m_B; (\theta, \phi)\rangle = U(\mathcal{R}) |m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0)\rangle$$

est le transformé de $|m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0)\rangle$ par la rotation (θ, ϕ) qui amène l'axe Oz sur la direction $\hat{p}$. Il faut souligner, que dans cet état, nous avons choisi l'axe de quantification du moment angulaire suivant $\hat{p}$, et que m_A et m_B sont les valeurs propres de $(\vec{J} \cdot \hat{p})$, et non J_z (figure 10.11). Lorsque la particule A est émise dans la direction Oz : $\theta = \phi = 0$, la conservation de la

13. Les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ sont définis par rapport à la direction $\vec{p}$ de propagation : figure 10.10(c).

FIG. 10.11 – Désintégration $C \rightarrow A + B$.

composante z du moment angulaire implique, comme dans le cas de la sous-section précédente, que $m_C = m_A + m_B$. Les seules amplitudes de transition non nulles sont

$$b_{m_A, m_B} = \langle m_A m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | T | m_C = m_A + m_B \rangle \quad (10.116)$$

En reprenant le raisonnement utilisé dans (10.111)

$$\begin{aligned} a_{m_A, m_B}^{m_C}(\theta, \phi) &= \langle m_A m_B; (\theta, \phi) | T | m_C \rangle \\ &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | U^\dagger(\mathcal{R}) T | m_C \rangle \\ &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | T | m'_C = m_A + m_B \rangle \\ &\quad \times \langle m'_C = m_A + m_B | U^\dagger(\mathcal{R}) | m_C \rangle \\ &= b_{m_A, m_B} \left(D_{m_C; m_A + m_B}^{(j_C)}(\theta, \phi) \right)^* \end{aligned} \quad (10.117)$$

$$= b_{m_A, m_B} d_{m_C; m_A + m_B}^{(j_C)}(\theta) e^{im_C \phi} \quad (10.118)$$

Si la parité est conservée dans la désintégration

$$\begin{aligned} b_{m_A, m_B} &= \langle m_A, m_B; (\theta = 0, \phi = 0) | \mathcal{Y}^\dagger T \mathcal{Y} | m_C = m_A + m_B \rangle \\ &= \eta (-1)^{j_C - j_A - j_B} b_{-m_A, -m_B} \end{aligned} \quad (10.119)$$

où $\eta = \eta_A \eta_B \eta_C$ est le produit des parités des trois particules. La conservation de la parité divise par deux le nombre d'amplitudes indépendantes. Les amplitudes définies dans (10.118) sont appelées *amplitudes d'hélicité*. Toutefois, il faut prendre garde au fait que l'axe de quantification du moment angulaire de la particule B est souvent pris suivant la direction de son impulsion, soit $-\hat{p}$, ce qui fait que $m_B \rightarrow -m_B$. Les nombres quantiques magnétiques m_A et $-m_B$ (avec notre définition) sont les hélicités des particules A et B .

10.6 Composition de deux moments angulaires

10.6.1 Composition de deux spins 1/2

Nous avons construit au § 6.1.2 l'espace à quatre dimensions $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ produit tensoriel des espaces à deux dimensions de deux spins 1/2, $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$. Une base possible de cet espace est formée des vecteurs propres $|\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle$, $\varepsilon = \pm$, de S_{1z} et de S_{2z}

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle \text{ et } |--\rangle \quad (10.120)$$

Les grandeurs physiques diagonales dans cette base sont $\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}$ et S_{2z}

$$\vec{S}_1^2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad S_{1z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad (10.121)$$

$$\vec{S}_2^2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad S_{2z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \quad (10.122)$$

Cette base correspond au choix suivant d'un ensemble complet d'opérateurs compatibles: $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$. Il est possible de former une autre base intéressante en considérant le moment angulaire total $\vec{S}$ obtenu en additionnant $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (10.123)$$

$\vec{S}$ est bien le moment angulaire total, car il permet de construire le générateur infinitésimal dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ d'une rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ d'angle θ autour d'un axe $\hat{n}$

$$U(\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)) = e^{-i\theta(\vec{S}_1 \cdot \hat{n})} e^{-i\theta(\vec{S}_2 \cdot \hat{n})} = e^{-i\theta(\vec{S} \cdot \hat{n})} \quad (10.124)$$

où nous avons utilisé $[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0$. Comme $\vec{S}_1^2$ et $\vec{S}_2^2$ sont des opérateurs scalaires, ils commutent avec $\vec{S}$, et un autre ensemble d'opérateurs compatibles est $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$; nous vérifierons ultérieurement que cet ensemble est aussi complet. Cherchons les vecteurs de base de ce nouvel ensemble. Posant $|1, 1\rangle = |++\rangle$ on vérifie

$$S_z |1, 1\rangle = |1, 1\rangle$$

$$S_+ |1, 1\rangle = (S_{1+} + S_{2+}) |++\rangle = 0$$

$$S_- |1, 1\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle = |+-\rangle + |-+\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$$

Cette dernière équation définit le vecteur unitaire $|1, 0\rangle$, qui vérifie

$$S_z |1, 0\rangle = (S_{1z} + S_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = 0$$

Enfin

$$S_- |1, 0\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = \sqrt{2} |--\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle$$

$$S_z |1, -1\rangle = -|1, -1\rangle$$

$$S_- |1, -1\rangle = 0$$

Ces équations montrent que les trois vecteurs

$$\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$$

forment une base standard pour un moment angulaire 1. Il suffit de vérifier les propriétés de la base standard pour S_z et S_- , car $S_+ = S_-^\dagger$ et $\vec{S}^2 = \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+) + S_z^2$. Le calcul ci-dessus montre que l'on a bien construit une base standard, par exemple

$$S_-|1, 1\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$$

Il faut enfin, pour obtenir une base de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, construire un quatrième vecteur orthogonal aux trois autres

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Ce vecteur n'est autre que le vecteur $|\Phi\rangle$ (6.15). Ce vecteur étant invariant par rotation correspond à un moment angulaire zéro, et on peut vérifier explicitement que

$$S_z|0, 0\rangle = 0 \quad S_\pm|0, 0\rangle = 0$$

En résumé, en composant deux moments angulaires $1/2$, nous avons obtenu un moment angulaire $s = 1$ et un moment angulaire $s = 0$. Une base standard de $\vec{S}^2$ et de S_z est formée des vecteurs correspondant à $s = 1$

$$s = 1 \quad \begin{cases} |1, 1\rangle = |+-\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{cases} \quad (10.125)$$

et à $s = 0$

$$s = 0 \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (10.126)$$

Comme nous avons trouvé quatre vecteurs orthogonaux, ces vecteurs forment une base de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ et l'ensemble des opérateurs compatibles $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$, ou simplement $\{\vec{S}^2, S_z\}$, est bien complet. Les états $s = 1$ sont appelés *états triplets* et l'état $s = 0$ *état singulet*.

Comme application, retrouvons les résultats de l'exercice 6.4.5, où nous avons à diagonaliser l'opérateur $(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$. Cet opérateur est diagonal dans la base $\{\vec{S}^2, S_z\}$. En effet

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4} (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)^2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad (10.127)$$

ou

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 2\vec{S}^2 - 3I = [2s(s+1) - 3]I$$

L'opérateur $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ est égal à I dans l'état triplet et à $-3I$ dans l'état singulet. On en déduit les projecteurs $\mathcal{P}_1$ et $\mathcal{P}_0$ sur les états triplet et singulet

$$\mathcal{P}_0 + \mathcal{P}_1 = I \quad \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3\mathcal{P}_0 + \mathcal{P}_1$$

d'où

$$\boxed{\mathcal{P}_0 = \frac{1}{4} (I - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad \mathcal{P}_1 = \frac{1}{4} (3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)} \quad (10.128)$$

L'opérateur $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ est un opérateur scalaire qui commute avec $\vec{S}$, mais non avec les opérateurs de spin individuels $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$. On remarque aussi que les états triplets sont symétriques (c'est-à-dire qu'ils ne changent pas de signe) dans la permutation des spins 1 et 2, tandis que l'état singulet est antisymétrique dans cette permutation.

10.6.2 Cas général : composition de deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$

Nous allons généraliser ce qui précède à la composition de deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$. Le raisonnement utilisé en (10.124) peut être répété pour montrer que $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ est le moment angulaire total. Suivant la sous-section précédente, nous construisons l'espace produit tensoriel à $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ dimensions

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$$

Une base possible de cet espace est constituée des vecteurs propres

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \quad (10.129)$$

communs à $\vec{J}_1^2$, $\vec{J}_2^2$, J_{1z} et J_{2z}

$$\vec{J}_1^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

$$\vec{J}_2^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

$$J_{1z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = m_1 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

$$J_{2z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = m_2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Cette base correspond à l'ensemble complet d'opérateurs qui commutent $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$. Nous allons construire une autre base de $\mathcal{E}$, celle où les opérateurs $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ sont diagonaux. Nous partons des deux observations suivantes :

- Tout vecteur $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ est vecteur propre de J_z avec la valeur propre $m = m_1 + m_2$.
- Si une valeur de j est possible, on doit avoir par application de J_+ et J_- une série de $(2j + 1)$ vecteurs $|jm\rangle$. *A priori*, on pourrait même avoir plusieurs séries de vecteurs de ce type, et nous noterons $N(j)$ le nombre de ces séries pour une valeur de j donnée.

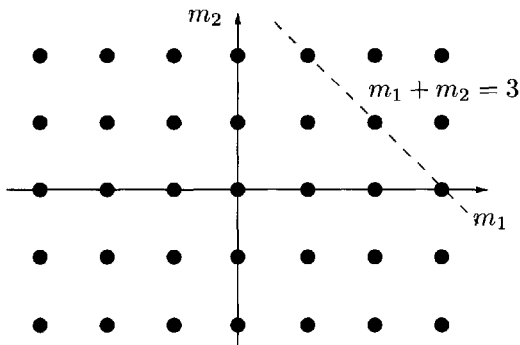


FIG. 10.12 – Composition de deux moments angulaires.

Soit $n(m)$ la dégénérescence de la valeur propre m de J_z . Comme m apparaît si et seulement si $j \geq |m|$, on aura (figure 10.12)

$$n(|m|) = \sum_{j \geq |m|} N(j)$$

et par conséquent

$$N(j) = n(j) - n(j+1)$$

Mais $n(m)$ est égal au nombre de couples (m_1, m_2) tels que $m = m_1 + m_2$. En supposant par exemple $j_1 \geq j_2$

$$n(m) = \begin{cases} 0 & \text{si } |m| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |m| & \text{si } j_1 - j_2 \leq m \leq j_1 + j_2 \\ 2j_2 + 1 & \text{si } 0 \leq |m| \leq j_1 - j_2 \end{cases}$$

On en conclut

$$N(j) = 1 \text{ pour } j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$$

et $N(j) = 0$ dans tous les autres cas. Pour tenir compte du cas $j_2 > j_1$, il suffit de remplacer $(j_1 - j_2)$ par $|j_1 - j_2|$. Nous pouvons donc énoncer le théorème suivant.

Théorème de composition des moments angulaires. Dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$

1. Les valeurs possibles de j sont

$$|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \quad (10.130)$$

2. À chaque valeur de j correspond une seule série de vecteurs propres $|jm\rangle$

$$\vec{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle \quad J_z |jm\rangle = m |jm\rangle \quad \blacksquare \quad (10.131)$$

Il est instructif de vérifier que la dimension de $\mathcal{E}$ est bien correcte ($j_1 \geq j_2$)

$$\begin{aligned} \dim \mathcal{E} &= \sum_{j_1-j_2 \leq j \leq j_1+j_2} (2j+1) \\ &= (j_1+j_2)(j_1+j_2+1) - (j_1-j_2-1)(j_1-j_2) \\ &\quad + (j_1+j_2) - (j_1-j_2-1) \\ &= (2j_1+1)(2j_2+1) \end{aligned}$$

On passe de la base orthonormée $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ à la base orthonormée $|jm\rangle$ par une transformation unitaire. Les éléments de la matrice unitaire qui effectue cette transformation sont appelés *coefficients de Clebsch-Gordan* (C-G) $C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2}$

$$|jm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \quad (10.132)$$

qui ne peuvent être différents de zéro que si $m = m_1 + m_2$ et si $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$. On choisit la convention de phase suivante

$$C_{m_1 m_2; j, m=j}^{j_1 j_2} \text{ réel } \geq 0$$

et on peut alors montrer par application de J_- que tous les C-G sont réels. Les coefficients de Clebsch-Gordan sont les éléments d'une matrice unitaire réelle, les indices matriciels étant $(m_1 m_2)$ et (jm) . Ils vérifient donc les conditions d'orthogonalité

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m_1 m_2; j' m'}^{j_1 j_2} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (10.133)$$

et inversement

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm}^{j_1 j_2} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (10.134)$$

Les équations (10.125) et (10.126) donnent des exemples de C-G

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}; 11}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = 1 \quad C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}; 10}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Comme application de la composition des moments angulaires, étudions le *couplage spin-orbite* : en raison d'effets relativistes, le moment angulaire orbital et le spin d'un électron atomique, par exemple l'électron de l'atome d'hydrogène ou l'électron de valence d'un alcalin, ne sont pas indépendants, comme nous le verrons au § 14.2.2. Le moment angulaire total de l'électron est la somme de son moment angulaire orbital $\vec{L}$ et de son spin $\vec{S}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (10.135)$$

Les valeurs possibles de j sont donc $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$ (sauf si $l = 0$, auquel cas $j = s = 1/2$). Le moment angulaire orbital et le spin sont couplés par un potentiel spin-orbite

$$V_{\text{so}}(r) = V(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (10.136)$$

Ce potentiel prend des valeurs différentes selon que $j = l + 1/2$ ou $j = l - 1/2$; en effet

$$(\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

soit

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (10.137)$$

ce qui donne pour le potentiel spin-orbite

$$V_{\text{so}}(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} V(r) l & : j = l + 1/2 \\ -\frac{1}{2} V(r)(l+1) & : j = l - 1/2 \end{cases} \quad (10.138)$$

10.6.3 Composition des matrices de rotation

La loi de composition des moments angulaires se reflète dans une loi de composition des matrices de rotation. Considérons les éléments de matrice de l'opérateur de rotation $U(\mathcal{R})$ entre les états $|jm\rangle$ et $|jm'\rangle$ du type (10.132)

$$\begin{aligned} \langle jm|U(\mathcal{R})|jm'\rangle &= D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) \\ &= \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} \\ &\quad \times \langle j_1 j_2 m_1 m_2|U(\mathcal{R})|j_1 j_2 m'_1 m'_2\rangle \end{aligned}$$

d'où

$$D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R}) \quad (10.139)$$

Compte tenu des relations d'orthogonalité (10.133) et (10.134) des C-G, on peut inverser (10.139)

$$D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R}) = \sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} C_{m_1 m_2; jm}^{j_1 j_2} C_{m'_1 m'_2; jm'}^{j_1 j_2} D_{mm'}^{(j)}(\mathcal{R}) \quad (10.140)$$

Cette équation peut être interprétée de la manière suivante : dans l'espace $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$, on forme la matrice $\Delta(\mathcal{R})$, produit tensoriel de $D^{(j_1)}(\mathcal{R})$ et $D^{(j_2)}(\mathcal{R})$

$$\Delta_{m_1 m_2; m'_1 m'_2}(\mathcal{R}) = D_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\mathcal{R}) \otimes D_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\mathcal{R})$$

Par un changement de base effectué grâce à une matrice unitaire dont les éléments sont les coefficients de C-G $C_{m_1 m_2; j m}^{j_1 j_2}$, la matrice

$$\Delta'(\mathcal{R}) = C \Delta(\mathcal{R}) C^{-1}$$

devient une matrice diagonale par blocs

$$C \Delta(\mathcal{R}) C^{-1} = \begin{pmatrix} D^{(j_1+j_2)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D^{(j_1+j_2-1)} & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & D^{(|j_1-j_2|)} \end{pmatrix}$$

En termes mathématiques, ceci s'appelle réduire le produit de deux représentations $D^{(j_1)}$ et $D^{(j_2)}$ du groupe de rotation en composantes irréductibles

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(j_1+j_2)} + D^{(j_1+j_2-1)} + \dots + D^{(|j_1-j_2|)} \quad (10.141)$$

10.6.4 Théorème de Wigner-Eckart (opérateurs scalaires et vectoriels)

Nous avons donné au § 8.2.3 la définition d'un opérateur scalaire $\mathcal{S}$: c'est un opérateur qui commute avec $\vec{J}$: $[\mathcal{S}, \vec{J}] = 0$. Examinons les éléments de matrice $\langle j' m' | \mathcal{S} | j m \rangle$ de $\mathcal{S}$ dans une base standard du moment angulaire

$$[\mathcal{S}, \vec{J}^2] = 0 \Rightarrow j' = j \quad [\mathcal{S}, J_z] = 0 \Rightarrow m' = m$$

De plus

$$[\mathcal{S}, J_{\pm}] = 0 \Rightarrow \langle j m | \mathcal{S} | j m \rangle = \langle j || \mathcal{S} || j \rangle \text{ indépendant de } m \quad (10.142)$$

La quantité $\langle j || \mathcal{S} || j \rangle$ est appelée *élément de matrice réduit* de $\mathcal{S}$.

Nous passons maintenant aux opérateurs vectoriels $\vec{V}$, dont nous avons donné la définition en (8.33) : les composantes cartésiennes V_k d'un opérateur vectoriel se transforment par rotation suivant la loi

$$U^\dagger(\mathcal{R}) V_k U(\mathcal{R}) = \sum_l \mathcal{R}_{kl} V_l \quad (10.143)$$

En considérant des rotations infinitésimales, nous en avons déduit les relations de commutation avec les composantes du moment angulaire

$$[J_k, V_l] = i \sum_p \varepsilon_{klp} V_p \quad (10.144)$$

Les équations (10.143) et (10.144) sont strictement équivalentes et peuvent servir l'une comme l'autre pour définir un opérateur vectoriel. Il est commode d'utiliser les composantes sphériques V_q de $\vec{V}$

$$V_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y) \quad V_0 = V_z \quad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y) \quad (10.145)$$

Ces composantes sont aussi appelées composantes standard de $\vec{V}$, car dans le cas où $\vec{V}$ est l'opérateur position, $\vec{V} = \vec{R}$, les composantes $\hat{r}_1, \hat{r}_0$ et $\hat{r}_{-1}$ du vecteur $\hat{r}$ ne sont autres que les harmoniques sphériques $Y_1^\pm$ et Y_1^0 à un facteur $\sqrt{3/4\pi}$ près (cf. (10.64)). Ceci implique d'après (10.65) la loi de transformation

$$(\mathcal{R}\hat{r})_m = \sum_{m'} D_{m'm}^{(1)}(\mathcal{R}^{-1})\hat{r}_{m'} \quad (10.146)$$

La loi de transformation des composantes sphériques de $\vec{V}$ est donc¹⁴

$$U(\mathcal{R})V_qU^\dagger(\mathcal{R}) = \sum_{q'} D_{q'q}^{(1)}(\mathcal{R})V_{q'} \quad (10.147)$$

On pourrait naturellement vérifier cette expression en utilisant les formules explicites pour $D^{(1)}$ et la définition des composantes sphériques.

Notre objectif est de relier les éléments de matrice des diverses composantes d'un opérateur vectoriel entre des états $|jm\rangle$. Pour ce faire, examinons les propriétés de transformation par rotation du vecteur $|1jqm\rangle = V_q|jm\rangle$

$$\begin{aligned} U(\mathcal{R})|1jqm\rangle &= U(\mathcal{R})V_qU^\dagger(\mathcal{R})U(\mathcal{R})|jm\rangle \\ &= \sum_{q'm'} D_{q'q}^{(1)}(\mathcal{R})D_{m'm}^{(j)}(\mathcal{R})|1jq'm'\rangle \end{aligned}$$

Les vecteurs $|1jqm\rangle$ se transforment par rotation exactement de la même façon que les vecteurs $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ avec $j_1 = 1, j_2 = j, m_1 = q, m_2 = m$. On peut donc construire des vecteurs

$$|\tilde{j}\tilde{m}\rangle = \sum_{m+q=\tilde{m}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} |1jqm\rangle \quad (10.148)$$

qui se transforment par rotation suivant la loi

$$U(\mathcal{R})|\tilde{j}\tilde{m}\rangle = \sum_{\tilde{m}'} D_{\tilde{m}'\tilde{m}}^{(\tilde{j})} |\tilde{j}\tilde{m}'\rangle$$

Cette équation montre que les vecteurs $|\tilde{j}\tilde{m}\rangle$ forment une base standard de l'espace $\mathcal{E}(\tilde{j})$, à un facteur global multiplicatif près. Ces vecteurs ne seront

14. On remarquera que l'ordre $U, U^\dagger$, ainsi que l'ordre des indices, sont différents de ceux de (10.143).

pas en général normalisés à un, mais ils auront une norme identique, quel que soit $\tilde{m}$

$$\langle \tilde{j} \tilde{m} | \tilde{j}' \tilde{m}' \rangle = \delta_{\tilde{j}\tilde{j}'} \delta_{\tilde{m}\tilde{m}'} \alpha(\tilde{j})$$

Inversant (10.148)

$$V_q |jm\rangle = |1qjm\rangle = \sum_{\tilde{j}=j-1}^{j+1} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} |\tilde{j}\tilde{m}\rangle$$

d'où

$$\begin{aligned} \langle j'm' | V_q | jm \rangle &= \sum_{\tilde{j}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} \langle j'm' | 1\tilde{j}\tilde{m} \rangle \\ &= \sum_{\tilde{j}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{1j} \delta_{j'\tilde{j}} \delta_{m'\tilde{m}} \beta(j', j) = C_{qm;j',m'}^{1j} \beta(j', j) \end{aligned}$$

Définissant l'élément de matrice réduit $\langle j' || V_q || j \rangle$ par

$$\langle j' || V || j \rangle = \beta(j', j)$$

on obtient le *théorème de Wigner-Eckart* pour les opérateurs vectoriels

$$\boxed{\langle j'm' | V_q | jm \rangle = C_{qm;j'm'}^{1j} \langle j' || V || j \rangle} \quad (10.149)$$

Toute la dépendance dans les nombres quantiques magnétiques m, m' et q est contenue dans le coefficient de Clebsch-Gordan $C_{qm;j'm'}^{1j}$, que l'on trouve dans des tables. À j fixé, les seules valeurs possibles de j' sont $j' = j - 1, j, j + 1$. Ce théorème se généralise aux *opérateurs tensoriels irréductibles* : voir l'exercice 10.7.18.

Comme application, calculons les éléments de matrice d'un opérateur vectoriel lorsque $j = j'$, en utilisant le fait que $\vec{J}$ est un opérateur vectoriel dont les éléments de matrice obéissent à (10.149)

$$\langle jm' | J_q | jm \rangle = C_{qm;jm'}^{1j} \langle j || J || j \rangle$$

Il en découle une relation de proportionnalité pour les composantes cartésiennes V_k

$$\langle jm' | V_k | jm \rangle = K \langle jm' | J_k | jm \rangle$$

Pour évaluer la constante K , nous calculons le produit scalaire $\vec{J} \cdot \vec{V}$, qui est un opérateur scalaire

$$\begin{aligned} \langle jm | (\vec{J} \cdot \vec{V}) | jm \rangle &= \sum_{k,m''} \langle jm | J_k | jm'' \rangle \langle jm'' | V_k | jm \rangle \\ &= K \sum_{k,m''} \langle jm | J_k | jm'' \rangle \langle jm'' | J_k | jm \rangle \\ &= K \langle jm | \vec{J}^2 | jm \rangle = K j(j+1) \end{aligned}$$

En combinant ces équations on obtient pour les éléments de matrice de V_k

$$\langle jm' | V_k | jm \rangle = \frac{1}{j(j+1)} \langle j || (\vec{J} \cdot \vec{V}) || j \rangle \langle jm' | J_k | jm \rangle \quad (10.150)$$

Comme $(\vec{J} \cdot \vec{V})$ est un opérateur scalaire, $\langle jm | (\vec{J} \cdot \vec{V}) | jm \rangle$ est indépendant de m et égal à l'élément de matrice réduit $\langle j || (\vec{J} \cdot \vec{V}) || j \rangle$.

10.7 Exercices

10.7.1 Propriétés de $\vec{J}$

Vérifier par un calcul explicite que $[\vec{J}^2, J_z] = 0$. Vérifier également les identités (10.5) à (10.9).

10.7.2 Rotation d'un moment angulaire

Soit $\mathcal{R}$ la rotation (10.30) d'angles (θ, ϕ) . Vérifier que le vecteur

$$U(\mathcal{R})|jm\rangle = e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} |jm\rangle$$

est vecteur propre de l'opérateur

$$J_x \sin \theta \cos \phi + J_y \sin \theta \sin \phi + J_z \cos \theta = \vec{J} \cdot \hat{n}$$

avec la valeur propre m ; $\hat{n}$ est le vecteur unitaire dans la direction (θ, ϕ) .
Suggestion : adapter (8.29).

10.7.3 Rotations (θ, ϕ)

Montrer que l'on peut écrire la rotation (10.30) $\mathcal{R}(\theta, \phi)$ sous la forme

$$\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_{y'}(\theta) \mathcal{R}_z(\phi)$$

où Oy' est l'axe obtenu à partir de Oy par une rotation de ϕ autour de Oz .
Suggestion : montrer

$$\mathcal{R}_{y'}(\theta) = \mathcal{R}_z(\phi) \mathcal{R}_y(\theta) \mathcal{R}_z(-\phi)$$

10.7.4 Moments angulaires $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$

1. Retrouver à partir de (10.23) les opérateurs S_x, S_y et S_z du spin $1/2$.
2. Toujours à partir de (10.23), calculer les matrices 3×3 représentatives de J_x, J_y et J_z pour le moment angulaire $j = 1$.
3. Montrer que pour $j = 1$, J_x, J_y, J_z sont reliés aux générateurs infinitésimaux (8.26) T_x, T_y, T_z par la transformation unitaire qui fait passer

des composantes cartésiennes de $\hat{r}$ à ses composantes sphériques (10.64) : $J_i = U^\dagger T_i U$ avec

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -i & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

4. Calculer la matrice de rotation $d^{(1)}(\theta)$

$$d^{(1)}(\theta) = \exp(-i\theta J_y)$$

et vérifier (10.39). Suggestion : montrer que $J_y^3 = J_y$.

10.7.5 Moment angulaire orbital

1. Utiliser les relations de commutation canoniques

$$[X_i, P_j] = i\delta_{ij}I$$

et l'expression $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ pour montrer

$$[L_x, L_y] = iL_z$$

2. Démontrer les équations (10.47) à (10.49). Suggestion : montrer que pour une rotation infinitésimale d'angle $d\alpha$ autour de Ox , les angles θ et ϕ varient de

$$d\theta = -\sin\phi d\alpha \quad d\phi = -\frac{\cos\phi}{\tan\theta} d\alpha$$

En déduire L_x et $L_y = i[L_x, L_z]$.

3. Comme $L_z = -i\partial/\partial\phi$, on pourrait s'attendre à une inégalité de Heisenberg

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq \frac{1}{2}$$

Or dans un état propre de L_z où m est fixé, $\Delta L_z = 0$, tandis que $\Delta\phi \leq 2\pi$, puisque $0 \leq \phi \leq 2\pi$ et l'inégalité de Heisenberg est violée dans cet état. Où est la faute de raisonnement ? Suggestion : voir l'exercice 7.4.3, question 2. Pourquoi le raisonnement de l'exercice 9.7.1 est-il en défaut ?

10.7.6 Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques

1. Soit $\varphi(\vec{r}) = \varphi(x, y, z)$ la fonction d'onde d'une particule. Montrer que

$$(e^{-i\alpha L_z} \varphi)(0, 0, z) = \varphi(0, 0, z)$$

et en déduire que si une particule est localisée sur l'axe Oz , la composante z de son moment angulaire orbital est nulle. Interpréter qualitativement ce résultat.

2. On suppose que le moment angulaire orbital de la particule est l et on écrit sa fonction d'onde comme le produit d'un harmonique sphérique et d'une fonction d'onde radiale $g_l(r)$ qui ne dépend que de $r = |\vec{r}|$

$$\psi_{lm}(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \phi) g_l(r) = \langle \theta, \phi | lm \rangle g_l(r)$$

On s'intéresse uniquement à la partie angulaire. En utilisant

$$|\theta, \phi\rangle = U(\mathcal{R})|\theta = 0, \phi = 0\rangle$$

où $\mathcal{R}$ est la rotation d'angles (θ, ϕ) , montrer que

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto \left[D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) \right]^*$$

On peut montrer que le coefficient de proportionnalité est $\sqrt{(2l+1)/(4\pi)}$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \left[D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi) \right]^*$$

10.7.7 Indépendance de l'énergie par rapport à m

En supposant le potentiel $V(r)$ invariant par rotation, soit ψ_{lm} une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H\psi_{lm} = E_{lm}\psi_{lm}$$

Utiliser la relation de commutation $[L_+, H] = 0$ pour montrer que l'énergie E_{lm} est en fait indépendante de m .

10.7.8 Puits sphérique

1. Soit le potentiel $V(\vec{r})$ à symétrie sphérique (voir la figure 12.4)

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ &= 0 & r > R \end{aligned}$$

appelé puits sphérique. Établir l'équation donnant les états liés dans l'onde s ($l = 0$). Y a-t-il toujours un état lié ? Comparer avec le cas du puits à une dimension.

2. On modélise le potentiel neutron-proton par un puits sphérique de rayon $R \simeq 2$ fm. Il existe un seul état lié neutron-proton dans l'onde s , le deutéron¹⁵, dont l'énergie de liaison est $B \simeq 2.2$ MeV. Calculer la profondeur V_0 du puits nécessaire pour qu'il y ait juste un état lié. Comparer V_0 avec l'énergie de liaison et montrer que $V_0 \gg B$.

3. Trouver les niveaux d'énergie dans l'onde s d'une particule dans le potentiel

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \quad A, B > 0$$

15. En fait le deutéron a aussi une petite composante d'onde d .

10.7.9 Atome d'hydrogène pour $l \neq 0$

1. Écrire l'équation qui généralise (10.89) lorsque le moment angulaire orbital $l \neq 0$. En déduire que l'on doit rajouter à (10.91) le terme

$$-l(l+1) \left[\frac{a_1}{x} - \sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1} x^{k-1} \right]$$

2. Montrer la relation de récurrence

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k$$

et en déduire

- $\alpha = \frac{1}{n}$
- $k \geq l+1$

et par conséquent $l+1 \leq k \leq n$. Montrer que le spectre de l'atome d'hydrogène est donné par (10.93).

10.7.10 Éléments de matrice d'un potentiel

L'électron externe d'un atome est supposé dans un état p ($l = 1$). Sa fonction d'onde est

$$\psi_{1m}(\vec{r}) = Y_1^m(\theta, \phi) \frac{u_1(r)}{r}$$

Il est plongé dans un potentiel extérieur de la forme

$$V(\vec{r}) = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2$$

où A et B sont des constantes.

1. Montrer *sans calculs* que la matrice représentative de V dans la base $|lm\rangle$ est de la forme

$$V_{m'm} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \beta \\ 0 & \gamma & 0 \\ \beta & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

les lignes et les colonnes étant rangées dans l'ordre m' , $m = 1, 0, -1$.

2. Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de V . Montrer que $\langle L_z \rangle = 0$ dans un état propre de V .

3. Utiliser (10.63) pour calculer explicitement α , β et γ en fonction de A , B et

$$I = \int_0^\infty |u_1(r)|^2 r^2 dr$$

10.7.11 Équation radiale en dimension $d = 2$

On se propose d'écrire l'équivalent de l'équation (10.78) lorsque l'espace est à deux dimensions et le potentiel invariant par rotation. L'équation de Schrödinger indépendante du temps est

$$\left[-\frac{1}{2M} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

On utilise les coordonnées polaires dans le plan xOy

$$x = r \cos \theta \quad y = r \sin \theta$$

On rappelle l'expression du laplacien en coordonnées polaires

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

et l'expression du moment angulaire

$$L_z = X P_y - Y P_x = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$$

1. Montrer que les fonctions propres de L_z sont de la forme $\exp(im\theta)$.

2. On cherche des solutions de l'équation de Schrödinger de la forme

$$\psi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{r}} e^{im\theta} u_{nm}(r)$$

Montrer que $u_{nm}(r)$ et E_{nm} vérifient l'équation radiale

$$\left[-\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{m^2 + 1/4}{2Mr^2} \right] u_{nm}(r) = E u_{nm}(r)$$

Quelle est l'interprétation de n ? Quel est le comportement de $u_{nm}(r)$ lorsque $r \rightarrow 0$?

10.7.12 Propriété de symétrie des matrices $d^{(j)}$

En utilisant l'opérateur Y (10.100), démontrer la propriété de symétrie des matrices de rotation $d^{(j)}(\beta)$

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{-m', -m}^{(j)}(-\beta)$$

10.7.13 Diffusion de la lumière

1. On reprend l'étude de la transition radiative $A^* \rightarrow A + \gamma$ avec $j = j(A^*) = 1$ et $j' = j(A) = 0$. Déterminer dans le cas dipolaire électrique les amplitudes de transition pour un état initial $m = 1$ lorsque les photons polarisés circulairement sont émis dans le plan xOz avec une impulsion $\vec{p}$ faisant un angle θ avec l'axe Oz

$$a_D^{m=1}(\theta) = \frac{1}{2} a(1 + \cos \theta)$$

$$a_G^{m=1}(\theta) = \frac{1}{2} a(1 - \cos \theta)$$

2. On suppose que des photons d'impulsion $\vec{p} \parallel Oz$ arrivent sur l'atome dans son état fondamental A . L'atome absorbe le photon et est porté dans son état excité A^* ; il revient dans son état fondamental en émettant un photon dans une direction du plan xOz faisant un angle θ avec Oz . On appelle b l'amplitude d'absorption d'un photon de polarisation circulaire droite D

$$b = \langle j = 1, m = 1 | T' | D \rangle$$

Montrer que si les transitions sont dipolaires électriques, on a aussi

$$b = \langle j = 1, m = -1 | T' | G \rangle$$

Soit $c_{P \rightarrow P'}(\theta)$ l'amplitude de transition pour la diffusion d'un photon initial de polarisation circulaire P ($P = D$ ou G) sous un angle θ avec une polarisation finale P' . Montrer que

$$c_{P \rightarrow P'}(\theta) = \frac{ab}{2} (1 \pm \cos \theta)$$

où le signe (+) correspond à $P = P'$ et le signe (−) à $P \neq P'$. En déduire pour une polarisation linéaire $|x\rangle$ du photon initial et pour des polarisations linéaires $|x'\rangle$ ou $|y\rangle$ du photon diffusé, définies par rapport à la direction de propagation de ce photon

$$c_{x \rightarrow x'}(\theta) = ab \cos \theta$$

$$c_{x \rightarrow y}(\theta) = 0$$

Donner une analogie classique qui conduit également à une distribution angulaire en $\cos^2 \theta$ avec un rayonnement polarisé dans le plan xOz .

10.7.14 Mesure du moment magnétique du Λ^0

La particule Λ^0 est une particule de charge nulle, de masse $M \simeq 1115 \text{ MeV}/c^2$, de spin $1/2$ et de vie moyenne $\tau \simeq 2.5 \times 10^{-10} \text{ s}$. Un de ses modes de désintégration principaux (66 % des cas) est

$$\Lambda^0 \rightarrow \text{proton} + \text{méson } \pi^-$$

où le proton a spin $1/2$ et le méson π^- spin 0 .

1. Dans le référentiel où le Λ^0 est au repos, on suppose le proton émis avec une impulsion $\vec{p}$ dans la direction Oz , choisie comme axe de quantification du moment angulaire. Soit m la projection suivant Oz du spin du Λ^0 et m' celle du proton. Pourquoi doit-on avoir $m = m'$? Soit a et b les amplitudes de probabilité des transitions

$$\begin{aligned} a &: \Lambda^0 \left(m = \frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} \left(m' = \frac{1}{2}; \vec{p} \parallel Oz \right) \\ b &: \Lambda^0 \left(m = -\frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} \left(m' = -\frac{1}{2}; \vec{p} \parallel Oz \right) \end{aligned}$$

Montrer que $|a| = |b|$ si la parité est conservée dans la désintégration. Suggestion : examiner l'action d'une réflexion par rapport au plan xOz .

2. Le proton est maintenant émis avec une impulsion $\vec{p}$ parallèle à une direction $\hat{n}$ du plan xOz , faisant un angle θ avec Oz . Soit m' la projection du spin du proton sur la direction $\hat{n}$ et $a_{m'm}(\theta)$ l'amplitude

$$a_{m'm}(\theta) : \Lambda^0 \left(m = \frac{1}{2} \right) \rightarrow \text{proton} (m'; \vec{p} \parallel \hat{n})$$

Exprimer

$$a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta) = a_{++}(\theta) \quad \text{et} \quad a_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta) = a_{-+}(\theta)$$

en fonction de a , b et θ .

3. On suppose que le Λ^0 est produit dans un état de spin $m = 1/2$. Montrer que la distribution angulaire du proton est de la forme

$$w(\theta) = w_0(1 + \alpha \cos \theta)$$

Calculer α en fonction de a et b . L'expérience montre que

$$\alpha \simeq -0.645 \pm 0.016$$

Que peut-on en conclure sur la conservation de la parité dans la désintégration ?

4. Le Λ^0 est produit en bombardant une cible de protons au repos par un faisceau de mésons π^- dans la réaction (figure 10.13)

$$\text{méson } \pi^- + \text{proton} \rightarrow \Lambda^0 + \text{méson } K^0$$

Par conservation de l'impulsion, $\vec{p}_{\pi^-}$, $\vec{p}_{\Lambda^0}$ et $\vec{p}_{K^0}$ sont situés dans un même plan. On choisit pour axe Oz une perpendiculaire à ce plan

$$\hat{z} = \frac{\vec{p}_{\pi^-} \times \vec{p}_{\Lambda^0}}{|\vec{p}_{\pi^-} \times \vec{p}_{\Lambda^0}|}$$

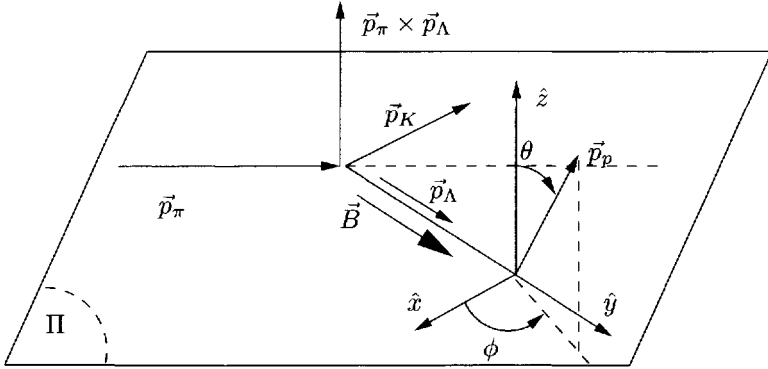


FIG. 10.13 – Cinématique de la production du Λ^0 .

et comme axe Oy la direction $\vec{p}_{\Lambda^0}$ de l'impulsion du Λ^0 . Sachant que la parité est conservée dans la réaction de production et que les protons cibles ne sont pas polarisés, montrer que si $\vec{S}$ est l'opérateur de spin du Λ^0 , alors les valeurs moyennes des composantes S_x et S_y sont nulles: $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$.

5. On suppose pour simplifier¹⁶ que $\langle S_z \rangle = 1/2$ et que tous les Λ^0 ont la même durée de vie τ et se désintègrent au même point. Le système est plongé dans un champ magnétique $\vec{B}$ uniforme et constant parallèle à Oy . Le Λ^0 possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ relié à son spin $\vec{S}$ par un facteur gyromagnétique γ : $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$. Décrire qualitativement le mouvement du spin du Λ^0 . Déterminer son orientation au moment de la désintégration en fonction de τ , de B et γ . Montrer que la distribution angulaire du proton émis dans la désintégration est

$$w(\theta, \phi) = w_0(1 + \alpha \cos \Theta)$$

avec

$$\cos \Theta = \cos \lambda \cos \theta + \sin \lambda \sin \theta \cos \phi$$

où les angles θ et ϕ sont les angles polaire et azimutal de l'impulsion du proton. Quelle est la valeur de l'angle λ ? En déduire que la détermination de $w(\theta, \phi)$ permet de mesurer le facteur gyromagnétique γ . On négligera la courbure de la trajectoire du proton due au champ magnétique ainsi que les transformations des angles dues au mouvement du Λ^0 .

10.7.15 Production et désintégration du méson ρ^+

1. Le méson ρ^+ est une particule de spin 1 qui se désintègre en deux mésons π , particules de spin 0

$$\rho^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0$$

16. En fait $|\langle S_z \rangle| < 1/2$ et on doit faire appel au formalisme de l'opérateur densité.

On choisit de se placer dans un référentiel où le méson ρ^+ est au repos ; on suppose que son spin est quantifié suivant l'axe Oz et qu'il se trouve initialement dans l'état de spin $|1m\rangle$, $m = -1, 0, 1$. Soit

$$a_m(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | T | 1m \rangle$$

l'amplitude de transition pour la désintégration du méson ρ^+ dans l'état initial $|1m\rangle$ avec émission du méson π^+ dans la direction d'angles polaire et azimutal (θ, ϕ) . Montrer que l'on peut écrire

$$a_m(\theta, \phi) = a \left[D_{m0}^{(1)}(\theta, \phi) \right]^*$$

Quelle est la signification physique de a ? En déduire la distribution angulaire $W_m(\theta, \phi)$ du méson π^+ , c'est-à-dire la probabilité d'émission du méson π^+ dans la direction (θ, ϕ) lorsque le méson ρ^+ est initialement dans l'état $|1m\rangle$. Montrer que $W_m(\theta, \phi)$ est indépendant de ϕ (pourquoi ?) et donner son expression explicite en fonction de θ pour les trois valeurs de m , $m = -1, 0, 1$.

2. Si l'état initial du méson ρ^+ est une combinaison linéaire d'états $|1m\rangle$

$$|\lambda\rangle = \sum_{m=-1,0,1} c_m |1m\rangle \quad \sum_{m=-1,0,1} |c_m|^2 = 1$$

quelle sera la distribution angulaire $W_\lambda(\theta, \phi)$?

3. En général le méson ρ^+ n'est pas produit dans un état pur, mais dans un mélange décrit par un opérateur densité ρ

$$\rho = \sum_{\lambda} p_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| \quad p_{\lambda} \geq 0 \quad \sum_{\lambda} p_{\lambda} = 1$$

Montrer que la distribution angulaire est alors

$$W(\theta, \phi) = \rho_{00} \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \sin^2 \theta (\rho_{11} + \rho_{-1,-1}) \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\theta \operatorname{Re} (\rho_{-10} e^{-i\phi} - \rho_{10} e^{i\phi}) - \sin^2 \theta \operatorname{Re} (\rho_{1,-1} e^{2i\phi})$$

4. Le méson ρ^+ est produit dans la réaction : méson π^+ ($\vec{p}_1$) + proton ($\vec{p} = 0$) $\rightarrow$ méson ρ^+ ($\vec{p}_2$) + proton ($\vec{p}_3$), où $\vec{p}_i$ dénote l'impulsion des particules. On choisit pour axes Oz la normale $\hat{n}$ au plan de la réaction

$$\hat{n} = \frac{\vec{p}_1 \times \vec{p}_2}{|\vec{p}_1 \times \vec{p}_2|}$$

La parité Π est conservée dans cette réaction et on suppose que les protons cibles ne sont pas polarisés. Montrer que la valeur moyenne $\langle \vec{J} \rangle = \operatorname{Tr}(\rho \vec{J})$ du spin du méson ρ^+ est dirigée suivant $\hat{n}$: $\langle \vec{J} \rangle = c \hat{n}$. En déduire

$$\operatorname{Tr}(\rho J_x) = \operatorname{Tr}(\rho J_y) = 0$$

Utiliser le fait que l'état initial de la réaction de production est invariant dans l'opération

$$\mathcal{Z} = \Pi e^{-i\pi J_z}$$

pour montrer que ρ commute avec les rotations d'axe Oz

$$[\rho, e^{-i\pi J_z}] = 0$$

ce qui peut s'écrire

$$\rho_{mm'} = (-1)^{m-m'} \rho_{mm'}$$

ρ ne dépend en fait que de quatre paramètres réels et a la forme d'un damier

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \rho_{1,-1} \\ 0 & \rho_{00} & 0 \\ \rho_{1,-1}^* & 0 & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

10.7.16 Interaction de deux dipôles

Le hamiltonien d'interaction de deux dipôles magnétiques portés par des particules de spin 1/2 s'écrit

$$H = \frac{K}{r^3} [3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2] = \frac{K}{r^3} S_{12}$$

où $\vec{r}$ est le vecteur joignant les deux dipôles et $\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ les matrices de Pauli des deux particules. Soit

$$\vec{\Sigma} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

le spin total. Montrer que

$$S_{12} = 2 [3Q^2 - \vec{\Sigma}^2] \quad Q = (\vec{\Sigma} \cdot \hat{r})^2$$

et que $Q^4 = Q^2$: Q^2 est un projecteur. En déduire que $S_{12}^2 = 4\vec{\Sigma}^2 - 2S_{12}$ et que les valeurs propres de S_{12} sont 0, 2 et -4.

10.7.17 Désintégration du Σ^0

La particule Σ^0 , formée d'un quark up, d'un quark down et d'un quark étrange, de masse 1192 MeV/c² et de spin 1/2, se désintègre par une transition radiative en une particule Λ^0 , également formée d'un quark up, d'un quark down et d'un quark étrange, de masse 1115 MeV/c² et de spin 1/2

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma$$

Le Σ^0 est supposé au repos, son spin quantifié suivant Oz et la projection de son spin sur cet axe est m ; l'impulsion $\vec{p}$ du photon est située dans le plan xOz et fait un angle θ avec l'axe Oz .

1. On suppose d'abord que le photon est émis dans la direction Oz ($\theta = 0$). Si m' est la projection du spin du Λ^0 sur Oz , montrer que les amplitudes non nulles sont (T est l'opérateur de transition)

$$a = \langle D, m' = -\frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = \frac{1}{2} \rangle$$

$$b = \langle G, m' = \frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = -\frac{1}{2} \rangle$$

tandis que

$$c = \langle D, m' = \frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = \frac{1}{2} \rangle = 0$$

$$d = \langle G, m' = -\frac{1}{2}; \theta = 0 | T | m = -\frac{1}{2} \rangle = 0$$

autrement dit $m' = m$ est interdit et les transitions permises correspondent à $m' = -m$ quand $\theta = 0$. La notation (D , G) spécifie l'état de polarisation circulaire droite (D) ou gauche (G) du photon.

2. L'opérateur de transition T est invariant dans l'opération parité. En déduire $|a| = |b|$. Si η est le produit des parités du Σ^0 et du Λ^0 , aussi appelé parité relative des deux particules

$$\eta = \eta_{\Sigma^0} \eta_{\Lambda^0}$$

montrer que $a = \eta b$. L'expérience montre que $\eta = 1$, et donc $a = b$.

3. On suppose que la valeur initiale de la projection du spin du Σ^0 est $m = 1/2$. Soit $a_D^{m'}(\theta)$ et $a_G^{m'}(\theta)$ les amplitudes de transition où m' est la projection du spin du Λ^0 sur la direction de $\vec{p}$: c'est donc la valeur propre de $\vec{S} \cdot \hat{p}$. Calculer $a_D^{m'}$ et $a_G^{m'}$ en fonction de a et θ . Quelles sont les valeurs permises pour m' ?

10.7.18 Opérateurs tensoriels irréductibles

Un opérateur tensoriel irréductible d'ordre k , $T^{(k)}$ possède $(2k + 1)$ composantes $T_q^{(k)}$

$$q = -k, -k + 1, \dots, k - 1, k$$

et se transforme par une rotation $\mathcal{R}$ suivant

$$U(\mathcal{R}) T_q^{(k)} U^\dagger(\mathcal{R}) = \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)}(\mathcal{R}) T_{q'}^{(k)}$$

Montrer que le vecteur

$$|k j q m\rangle = T_q^{(k)} |j m\rangle$$

se transforme par rotation comme un vecteur $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ avec $j_1 = k$, $j_2 = j$, $m_1 = q$, $m_2 = m$. En passant par l'intermédiaire des vecteurs

$$|kj\tilde{j}\tilde{m}\rangle = \sum_{q+m=\tilde{m}} C_{qm;\tilde{j}\tilde{m}}^{kj} |kjqm\rangle$$

montrer la forme générale du théorème de Wigner-Eckart

$$\langle j'm'|T_q^{(k)}|jm\rangle = C_{qm;j'm'}^{kj} \langle j'||T^{(k)}||jm\rangle$$

et en déduire

$$|j - k| \leq j' \leq j + k$$

10.8 Bibliographie

La présentation de ce chapitre, inspirée par celle de de Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitres 17 et 18, met particulièrement l'accent sur les propriétés et l'utilisation des matrices de rotation. Pour une présentation plus classique, on se reportera à Messiah [1959], chapitre XIII, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre VII ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 10. On trouvera de nombreuses applications à la physique des particules élémentaires dans le livre de S. Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics*, J. Wiley, New-York (1966) ; le chapitre 4 de ce livre expose aussi l'analyse de Wigner fondée sur l'invariance par le groupe de Poincaré, qui montre en particulier qu'une particule de masse nulle a seulement deux états d'hélicité. Sur ce dernier sujet, voir aussi Weinberg [1995], chapitre 2.

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Chapitre 11

Oscillateur harmonique

L'OSCILLATEUR HARMONIQUE est un système d'une grande importance en mécanique classique, car il décrit les petites oscillations de systèmes physiques autour d'une position d'équilibre stable ; son importance n'est pas moindre en mécanique quantique. Pour fixer les idées, et afin de prendre l'exemple simple d'un mouvement à une dimension, examinons le cas d'une molécule diatomique dont les deux noyaux ont des masses m_1 et m_2 . On prend pour axe des x la droite joignant les deux noyaux et on note $x = x_1 - x_2$ la coordonnée de la particule relative (exercice 8.5.6). À l'équilibre, les deux noyaux se trouvent à une distance $x = x_0$. En physique classique, le hamiltonien de la particule relative s'écrit

$$H_{cl} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (11.1)$$

où $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ est la masse de la particule relative. Développons $V(x)$ au voisinage de $x = x_0$:

$$V = V(x_0) + (x - x_0)V'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 V''(x_0) + \dots$$

La constante $V(x_0)$ est en général sans intérêt et on peut la prendre égale à zéro par une redéfinition du zéro d'énergie. Comme x_0 est une position d'équilibre, $V'(x_0) = 0$, et si cette position d'équilibre est stable, $V''(x_0) > 0$. Posant

$$q = x - x_0, \quad C = V''(x_0), \quad \omega = \sqrt{\frac{C}{m}}$$

le hamiltonien (11.1) devient

$$H_{cl} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \quad (11.2)$$

où ω est la fréquence des oscillations autour de la position d'équilibre.

Nous venons d'introduire l'exemple le plus simple, celui d'un oscillateur isolé, dont le traitement quantique fera l'objet de la section 11.1 dans une base particulière, celle des états propres de l'énergie. Une autre « base », celle des états cohérents, sera examinée dans la section suivante. Elle trouve de nombreuses applications en optique quantique. Un cas un peu plus complexe est celui des oscillateurs couplés, qui jouent aussi un rôle important. Un exemple en sera donné dans la section 11.3, où sera étudié un modèle simple de vibrations dans un solide qui permettra d'introduire le concept de phonon. La généralisation aux photons sera également traitée dans une configuration simple.

Il peut sembler surprenant de trouver dans la dernière section de ce chapitre l'étude du mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique. Nous verrons que dans le cas d'un champ magnétique constant, les équations du mouvement se ramènent à celles d'un oscillateur harmonique. L'étude des niveaux d'énergie dans un champ magnétique, ou niveaux de Landau, sera précédée d'une définition de l'invariance de jauge locale, qui fixe la forme de l'interaction d'une particule chargée avec le champ électromagnétique.

11.1 L'oscillateur harmonique simple

11.1.1 Opérateurs de création et d'annihilation

Notre point de départ sera le hamiltonien (11.2). Ce hamiltonien se transpose en mécanique quantique si l'on interprète les quantités p et q comme des opérateurs : $p \rightarrow P$, $q \rightarrow Q$ et si l'on impose les relations de commutation canoniques

$$[Q, P] = i\hbar I \quad (11.3)$$

Comme souvent en physique, il est utile de définir des quantités sans dimensions, et nous introduirons les opérateurs $\hat{P}$ et $\hat{Q}$ par

$$Q = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \hat{Q} \quad P = (m\hbar\omega)^{1/2} \hat{P} \quad (11.4)$$

qui obéissent à relation de commutation

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = iI \quad (11.5)$$

Nous allons construire les vecteurs propres de H par une méthode algébrique, suivant l'esprit de celle qui a été utilisée pour le moment angulaire. Le principe de cette méthode consiste à introduire des opérateurs a et $a^\dagger$, appelés respectivement *opérateur d'annihilation* (ou de destruction) et *opérateur de création* de l'oscillateur harmonique, qui feront passer d'une valeur propre de H à une autre, tout comme J_- et J_+ font passer d'une valeur propre de J_z à

une autre. Nous définissons donc les opérateurs¹

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \quad (11.6)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad (11.7)$$

Un calcul immédiat permet d'établir les relations de commutation de a et $a^\dagger$

$$\boxed{[a, a^\dagger] = I} \quad (11.8)$$

ainsi que trois expressions utiles de H

$$\boxed{H = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right)} \quad (11.9)$$

Nous avons introduit l'opérateur N , ou opérateur *nombre de particules*²

$$\boxed{N = a^\dagger a} \quad (11.10)$$

qui vérifie les relations de commutation suivantes avec a et $a^\dagger$

$$[N, a] = -a \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (11.11)$$

Compte tenu de (11.9), il est équivalent de diagonaliser N ou H .

11.1.2 Diagonalisation du hamiltonien

Supposons que nous ayons trouvé un vecteur propre $|\nu\rangle$ de N , normalisable, mais pas nécessairement unitaire, de valeur propre ν

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

On doit avoir $\nu \geq 0$: en effet

$$0 \leq \|a|\nu\rangle\|^2 = \langle \nu | a^\dagger a | \nu \rangle = \langle \nu | N | \nu \rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle$$

ce qui implique que si $\nu = 0$, alors $a|\nu\rangle = 0$. Dans le cas contraire, $a|\nu\rangle$ est un vecteur de norme carrée $\nu\langle\nu|\nu\rangle$, et c'est un vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu - 1)$, car, en utilisant (11.11)

$$Na[|\nu\rangle] = a(N - 1)|\nu\rangle = (\nu - 1)a[|\nu\rangle]$$

1. Afin de nous conformer aux notations usuelles, nous dérogeons à notre règle selon laquelle les opérateurs sont notés par des lettres majuscules.

2. Cette terminologie sera justifiée au § 11.3.1.

Enfin $a^\dagger|\nu\rangle$ est certainement un vecteur non nul, de norme carrée $(\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$, et c'est un vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu+1)$. En effet, d'une part

$$0 \leq \|a^\dagger|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|aa^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$$

et d'autre part

$$N[a^\dagger|\nu\rangle] = a^\dagger(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)[a^\dagger|\nu\rangle]$$

Si $\nu > 0$, nous avons vu que $a|\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu-1)$. Si $(\nu-1) = 0$, $a^2|\nu\rangle = 0$. Si $(\nu-1) > 0$, on peut construire le vecteur non nul $a^2|\nu\rangle$, de valeur propre $(\nu-2)$, et continuer le processus si $(\nu-2) > 0$. La suite des vecteurs

$$a^0|\nu\rangle, a^1|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \dots, a^p|\nu\rangle \dots$$

est une suite de vecteurs propres de N correspondant aux valeurs propres

$$\nu, \nu-1, \dots, (\nu-p) \dots$$

Ceci montre que ν est nécessairement un nombre entier. Sinon, pour p suffisamment grand, $(\nu-p)$ deviendrait négatif et le vecteur $a^p|\nu\rangle$ serait de norme négative. Il est donc nécessaire que la série s'arrête pour une valeur entière $\nu = p$ telle que le vecteur $a^{p+1}|\nu\rangle = 0$.

La suite des vecteurs

$$(a^\dagger)^0|\nu\rangle, (a^\dagger)^1|\nu\rangle, (a^\dagger)^2|\nu\rangle, \dots, (a^\dagger)^p|\nu\rangle \dots$$

forme une suite de vecteurs propres de N correspondant aux valeurs propres

$$\nu, \nu+1, \dots, (\nu+p) \dots$$

En résumé, les valeurs propres de N sont des nombres entiers :

$$n = 0, 1, 2, \dots, n, \dots$$

On note $|n\rangle$ les vecteurs propres de N correspondant à la valeur propre n

$$N|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \quad (11.12)$$

ou de façon équivalente pour H

$$H|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (11.13)$$

Les valeurs propres E_n de l'énergie étiquetées par l'entier n sont de la forme

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (11.14)$$

Contrairement au cas de l'oscillateur classique, le niveau d'énergie E_0 du fondamental n'est pas zéro, ce qui correspondrait à une particule immobile à l'équilibre, mais $E_0 = \hbar\omega/2$: c'est l'énergie de point zéro de l'oscillateur harmonique. On peut en donner une explication qualitative grâce aux inégalités de Heisenberg (exercice 9.7.4). Il ne faut surtout pas confondre le vecteur propre $|0\rangle$ de l'état fondamental et le vecteur nul de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$, $|\varphi\rangle = 0$! On remarque aussi que les niveaux d'énergie sont équidistants : c'est bien ce que l'on constate expérimentalement, en première approximation, pour les niveaux de vibration d'une molécule.

Les vecteurs $|n\rangle$ sont bien sûr orthogonaux si $n \neq n'$ et nous les supposons désormais unitaires. Il reste à montrer qu'ils ne sont pas dégénérés, qu'ils forment une base de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$, et avant tout que N a au moins un vecteur propre, ce qui n'est pas garanti pour un opérateur, même hermitique, dans un espace de dimension infinie ! Nous construirons explicitement dans la section suivante le vecteur $|0\rangle$ et nous montrerons qu'il est unique. Cela suffit à montrer que la série de vecteurs

$$|0\rangle, (a^\dagger)^1|0\rangle, (a^\dagger)^2|0\rangle, \dots, (a^\dagger)^n|0\rangle \dots \quad (11.15)$$

est unique. En effet nous pouvons raisonner par récurrence en supposant le vecteur $|n\rangle$ non dégénéré. Soit $|n+1\rangle$ un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $(n+1)$: $N|n+1\rangle = (n+1)|n+1\rangle$. Alors, c étant un nombre complexe $\neq 0$,

$$a|n+1\rangle = c|n\rangle \Rightarrow a^\dagger a|n+1\rangle = ca^\dagger|n\rangle \Rightarrow |n+1\rangle = \frac{ca^\dagger}{n+1}|n\rangle$$

ce qui montre que $|n+1\rangle \propto a^\dagger|n\rangle$: si $|0\rangle$ est unique, le vecteur $|n\rangle$ est aussi unique à un facteur de phase près.

Comme dans le cas de la base standard $|jm\rangle$ du moment angulaire, il est commode de fixer une fois pour toutes la phase relative des vecteurs propres de H . Si $|n\rangle$ est de norme unité, le vecteur $a^\dagger|n\rangle$ est de norme $\sqrt{n+1}$ et par conséquent

$$a^\dagger|n\rangle = e^{i\alpha} \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Le choix de phase le plus simple est $\alpha = 0$ et on a alors

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (11.16)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (11.17)$$

Les équations (11.16) et (11.17) mettent en évidence le rôle de création et de destruction de $a^\dagger$ et a : $a^\dagger$ augmente n d'une unité, a diminue n d'une unité. Les vecteurs $|n\rangle$ se déduisent de $|0\rangle$ par

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle} \quad (11.18)$$

Il reste à montrer que les vecteurs $|n\rangle$ forment une base de $\mathcal{H}$: nous renvoyons ce point de rigueur à l'exercice 11.5.1

11.1.3 Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique

En mécanique ondulatoire, le hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \quad (11.19)$$

En définissant comme dans (11.4) la variable sans dimension u

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} u \quad -i\hbar \frac{d}{dq} = -i(\hbar m\omega)^{1/2} \frac{d}{du} \quad (11.20)$$

le hamiltonien (11.2) devient

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \quad (11.21)$$

On aurait pu obtenir directement cette forme de H à partir de la première des équations (11.9) en remarquant que u et $-i\hbar d/du$ ne sont autres que les réalisations dans l'espace $L_u^{(2)}(\mathbb{R})$ des opérateurs $\hat{Q}$ et $\hat{P}$. Il serait possible de chercher directement les solutions de

$$H\varphi_n(u) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \varphi_n(u) = E_n \varphi_n(u) \quad (11.22)$$

avec $\varphi_n(u) = \langle u|n \rangle$, mais nous nous limiterons à montrer l'unicité du vecteur $|0\rangle$ dont nous nous sommes servi ci-dessus. Comme $\langle u|0\rangle = \varphi_0(u)$, l'équation $a|0\rangle = 0$ devient

$$\langle u|a|0\rangle = \left[u + \frac{d}{du} \right] \varphi_0(u) = 0$$

qui s'intègre immédiatement en

$$\varphi_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-u^2/2} \quad (11.23)$$

Le facteur $\pi^{-1/4}$ assure que φ_0 est normalisé à l'unité. Cette solution est unique, ce qui prouve que les vecteurs propres donnés par la série (11.15) sont non dégénérés. Il est immédiat de vérifier que $\varphi_0(u)$ obéit à (11.22) avec la valeur propre $\hbar\omega/2$. La fonction $\varphi_0(u)$ vérifie bien la propriété caractéristique de la fonction d'onde d'un état fondamental : elle ne s'annule pas, ou de façon équivalente, elle n'a pas de nœuds.

Déterminons enfin la forme explicite des fonctions d'onde $\varphi_n(u) = \langle u|n \rangle$. Multiplions à gauche (11.18) écrit sous la forme

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\hat{Q} - i\hat{P} \right)^n |0\rangle$$

par le bra $\langle u|$

$$\varphi_n(u) = \langle u|n \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} \quad (11.24)$$

Les fonctions $\varphi_n(u)$ sont orthogonales pour $n \neq n'$ et normalisées à l'unité en raison de $\langle n|n' \rangle = \delta_{nn'}$. Les fonctions définies dans l'équation (11.24) sont reliées aux *polynômes de Hermite* $H_n(u)$

$$e^{-u^2/2} H_n(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-u^2/2} \quad (11.25)$$

par

$$\varphi_n(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-u^2/2} H_n(u) \quad (11.26)$$

Les premiers polynômes de Hermite sont

$$H_0(u) = 1 \quad H_1(u) = 2u \quad H_2(u) = 4u^2 - 2 \dots$$

En résumé, on peut établir un « dictionnaire » permettant de passer de la « représentation n » du § 11.1.2 à la représentation du § 11.1.3 des états propres de H en termes de fonctions d'onde $\varphi_n(u)$. Dans le résumé ci-dessous, la première équation est écrite dans la base $|n\rangle$, et la seconde est l'équation équivalente en mécanique ondulatoire.

- Équation aux valeurs propres

$$\frac{1}{2} \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \iff$$

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right) \varphi_n(u) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \varphi_n(u)$$

- Relations d'orthonormalisation

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm} \iff \int_{-\infty}^{\infty} du \varphi_n^*(u) \varphi_m(u) = \delta_{nm}$$

- Relation de fermeture

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I \iff \sum_n \varphi_n(u) \varphi_n^*(v) = \delta(u-v)$$

La conjugaison complexe est en fait superflue car les fonctions $\varphi_n(u)$ sont réelles.

11.2 États cohérents

11.2.1 Définition et propriétés des états cohérents

Les *états cohérents*, ou *états semi-classiques*, sont des états quantiques remarquables de l'oscillateur harmonique : dans ces états, les valeurs moyennes des opérateurs position et impulsion ont des propriétés aussi proches que possibles des valeurs classiques de la position $q(t)$ et de l'impulsion $p(t)$. L'exercice 11.5.3 montre que l'expression des états cohérents découle de cette propriété. Nous les définirons ci-dessous *a priori*. Soit $z(t)$ un nombre complexe, combinaison de $q(t)$ et $p(t)$

$$z(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q(t) + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p(t) \quad (11.27)$$

À partir des équations du mouvement classique

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{1}{m} p(t) \quad \frac{dp(t)}{dt} = -m\omega^2 q(t) \quad (11.28)$$

on montre que $z(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$\frac{dz}{dt} = -i\omega z(t) \quad (11.29)$$

qui a pour solution

$$z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

Le nombre complexe $z(t)$ décrit une trajectoire circulaire dans le plan complexe en z avec une vitesse uniforme. On déduit de $z(t)$ la position $q(t)$, l'impulsion $p(t)$ et l'énergie de l'oscillateur

$$\begin{aligned} q(t) &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} z(t) \\ p(t) &= \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im} z(t) \\ E &= \hbar\omega |z_0|^2 \end{aligned} \quad (11.30)$$

Il est facile de montrer que la valeur moyenne $\langle a \rangle(t)$ de l'opérateur d'annihilation a obéit à la même équation différentielle que $z(t)$ (exercice 11.5.3). Ceci suggère de chercher les vecteurs propres de l'opérateur a , dont nous allons montrer qu'ils existent³, car les valeurs propres correspondantes obéiront alors à (11.29). Ces vecteurs propres sont précisément les états cohérents. Un état cohérent $|z\rangle$ est défini par

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{a^\dagger z} |0\rangle \quad (11.31)$$

3. Il n'est pas évident *a priori* que a , qui n'est pas un opérateur hermitique, ait des vecteurs propres, et encore moins que ces vecteurs propres forment une base de $\mathcal{H}$.

Énonçons quelques propriétés des états cohérents et vérifions tout d'abord que $|z\rangle$ est vecteur propre de a .

- L'état cohérent $|z\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur d'annihilation (non hermitique) a avec la valeur propre z

$$\boxed{a|z\rangle = z|z\rangle} \quad (11.32)$$

Pour le montrer, on peut utiliser directement (11.31), mais on peut aussi se servir de l'identité (2.54) de l'exercice 2.4.11 qui s'écrit ici

$$\begin{aligned} e^{a^\dagger z} a e^{-a^\dagger z} &= a + z[a^\dagger, a] = a - z \\ e^{a^\dagger z} a &= (a - z)e^{a^\dagger z} \end{aligned}$$

Il suffit d'appliquer les deux membres de cette dernière équation sur le vecteur $|0\rangle$ pour obtenir (11.32).

- Le vecteur $|z\rangle$ est unitaire : $\langle z|z\rangle = 1$ et le module carré du produit scalaire $\langle z|z'\rangle$

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z - z'|^2) \quad (11.33)$$

est une mesure de la « distance » entre les deux états cohérents.

- La distribution des valeurs de n suit une loi de Poisson

$$p(n) = |\langle n|z\rangle|^2 = \frac{|z|^{2n}}{n!} e^{-|z|^2} \quad (11.34)$$

ce qui donne pour la valeur moyenne $\langle n\rangle = |z|^2$ et pour la dispersion $\Delta n = |z|$.

- L'action de $\exp(\lambda N)$ sur un état cohérent, où λ est un nombre imaginaire pur ($|\exp \lambda| = 1$), redonne un état cohérent

$$\begin{aligned} e^{\lambda N}|z\rangle &= e^{\lambda N} e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{\lambda n} |n\rangle \\ &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^\lambda z)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |e^\lambda z\rangle \end{aligned} \quad (11.35)$$

La relation $|\exp \lambda| = 1$ a été utilisée uniquement pour obtenir la dernière égalité.

- Les états cohérents forment une base « surcomplète »

$$\int \frac{d\operatorname{Re} z d\operatorname{Im} z}{\pi} |z\rangle \langle z| = I \quad (11.36)$$

Pour montrer cette identité, on la prend en sandwich entre le bra $\langle n|$ et le ket $|m\rangle$; posant $z = \rho \exp(i\theta)$

$$\begin{aligned} \int \frac{d\operatorname{Re} z d\operatorname{Im} z}{\pi} \langle n|z\rangle \langle z|m\rangle &= \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi} \frac{z^n z^{*m}}{\sqrt{n!m!}} e^{-\rho^2} \\ &= \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi} \frac{\rho^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} e^{i(n-m)\theta} e^{-\rho^2} \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le changement de variables $\rho^2 = u$ et

$$\int_0^\infty du u^n e^{-u} = n!$$

Une conséquence directe de (11.36) est que les « éléments de matrice diagonaux » $\langle z|A|z\rangle$ suffisent à définir complètement un opérateur A (exercice 11.5.3).

Ces propriétés permettent de calculer aisément les valeurs moyennes

$$\begin{aligned} \langle z|Q|z\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle z|(a + a^\dagger)|z\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} z \\ \langle z|P|z\rangle &= \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im} z \\ \langle z|H|z\rangle &= \hbar\omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (11.37)$$

Ceci est le résultat classique (11.30), si l'on ignore l'énergie de point zéro $\hbar\omega/2$ dans l'expression de $\langle H\rangle$. De plus, si l'état de l'oscillateur harmonique est un état cohérent au temps $t = 0$, cette propriété est conservée par l'évolution temporelle. Supposons en effet que l'oscillateur se trouve au temps $t = 0$ dans l'état cohérent $|\varphi(t=0)\rangle = |z_0\rangle$ et calculons $|\varphi(t)\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |z_0\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-i\omega Nt} |z_0\rangle = e^{-i\omega t/2} |z_0 e^{-i\omega t}\rangle \quad (11.38)$$

où nous avons utilisé (11.35). Au facteur de phase $\exp(-i\omega t/2)$ près, on retrouve l'évolution classique $z(t) = z_0 \exp(-i\omega t)$. Si l'on part d'un état cohérent au temps $t = 0$, l'évolution des valeurs moyennes $\langle Q\rangle$, $\langle P\rangle$ et $\langle H\rangle$ suit très exactement l'évolution classique de $q(t)$, $p(t)$ et E . Nous avons donc montré que les valeurs moyennes dans un état cohérent suivent les lois classiques.

Il est également instructif de calculer les dispersions. Évaluons par exemple $\langle Q^2\rangle$ dans l'état cohérent $|z\rangle$

$$\begin{aligned} \langle Q^2\rangle_z &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z|a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a|z\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle z|a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1|z\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + (z + z^*)^2] = \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + 4(\operatorname{Re} z)^2] \end{aligned}$$

Un calcul analogue (exercice 11.5.3) donne $\langle P^2 \rangle$ et $\langle H^2 \rangle$, d'où l'on déduit les dispersions⁴ dans l'état cohérent $|z\rangle$

$$\Delta_z Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad \Delta_z P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \quad \Delta_z H = \hbar\omega|z| \quad (11.39)$$

La dispersion $\Delta_z H$ peut être obtenue en utilisant $\Delta H = \hbar\omega\Delta_z N$ et $\Delta_z N = \Delta n = |z|$ d'après (11.34), mais il est équivalent de calculer directement $\langle z|N^2|z\rangle$. On note que l'inégalité de Heisenberg est saturée dans un état cohérent : $\Delta_z Q \Delta_z P = \hbar/2$ et que pour $|z| \gg 1$

$$\frac{\Delta_z H}{\langle H \rangle} \simeq \frac{1}{|z|} \rightarrow 0 \quad \text{si } |z| \rightarrow \infty$$

En résumé, pour $|z| \gg 1$, les dispersions autour des valeurs moyennes sont les plus faibles possible.

11.3 Introduction aux champs quantifiés

11.3.1 Ondes sonores et phonons

Lorsque les amplitudes de vibration sont faibles, un système d'oscillateurs couplés peut être décomposé en modes normaux et être mis sous la forme d'une somme d'oscillateurs harmoniques indépendants. Un cas intéressant est celui des vibrations dans un solide, que nous allons utiliser pour introduire les champs quantifiés. Le premier modèle quantique de vibrations dans un solide cristallin est dû à Einstein, qui suppose que chaque atome peut vibrer indépendamment des autres autour de sa position d'équilibre avec une fréquence ω . En physique quantique, à chaque atome est donc associé un oscillateur harmonique quantifié de fréquence ω . Ce modèle fut le premier à expliquer qualitativement le comportement de la chaleur spécifique des solides à basse température : alors que la loi de Dulong et Petit prévoyait une chaleur spécifique indépendante de la température, l'expérience montrait au contraire que cette loi n'était valable qu'à une température suffisamment haute, et qu'en réalité la chaleur spécifique diminuait avec la température. Cependant le modèle d'Einstein ne donne pas des résultats quantitativement corrects, ce qui n'est pas surprenant, car l'hypothèse selon laquelle les atomes vibrent indépendamment n'est pas réaliste : si tel était le cas, les vibrations ne pourraient pas se propager dans un solide et il n'y aurait pas d'ondes sonores !

Nous allons étudier le modèle le plus simple possible de chaîne d'oscillateurs couplés, en nous limitant au cas à une dimension. À l'équilibre, N atomes sont disposés à intervalles réguliers l sur une droite : les N positions

4. Nous utilisons indifféremment pour les dispersions les notations $(\Delta P, \Delta Q)$ ou $(\Delta p, \Delta q)$ car aucune ambiguïté n'est possible.

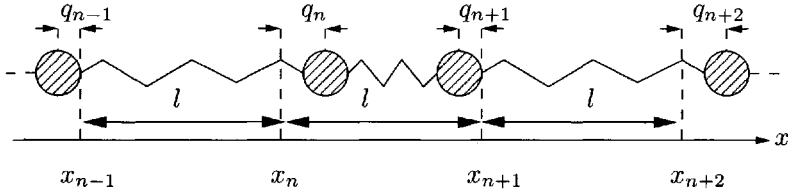


FIG. 11.1 – Modèle pour les vibrations dans un solide : chaîne de ressorts.

d'équilibre ont pour abscisses $x_n = nl$, $n = 0, 1, \dots, N-1$. Il sera commode d'utiliser des conditions aux limites périodiques $x_{n+N} \equiv x_n$, mais il serait également possible de supposer des conditions aux limites d'annulation : $x_0 = x_{N+1} = 0$. Comme précédemment, on appelle q_n l'écart à l'équilibre de l'atome n . Le couplage entre les atomes n et $n+1$ est décrit par un terme $(K/2)(q_n - q_{n+1})^2$, où K est une constante, et le hamiltonien classique de l'ensemble est

$$H_{cl} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} K \sum_{n=0}^{N-1} (q_{n+1} - q_n)^2 \quad (11.40)$$

Ce hamiltonien est en fait celui de N masses identiques m reliées par des ressorts identiques de raideur K (figure 11.1). Dans (11.40), m est la masse des atomes, $p_n = m\dot{q}_n$ leur impulsion. Le premier terme de H_{cl} est l'énergie cinétique, le second l'énergie potentielle. Les équations du mouvement correspondant au hamiltonien (11.40) s'écrivent

$$m\ddot{q}_n = -K[(q_n - q_{n-1}) + (q_n - q_{n+1})] \quad (11.41)$$

Commençons par le problème classique : pour découpler les modes q_n , nous allons chercher les modes normaux, ce qui se fait en prenant la transformée de Fourier sur réseau des q_n et des p_n

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{ikx_n} q_n = \sum_n U_{kn} q_n \quad k = j \times \frac{2\pi}{Nl} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (11.42)$$

Afin d'alléger les notations, nous n'avons pas utilisé $\tilde{q}_k$ pour désigner la transformée de Fourier, l'indice k ou n permettant de distinguer entre les composantes de Fourier q_k et les positions q_n sur le réseau. La matrice U_{kn} effectue une transformation de Fourier discrète, ou sur réseau, et c'est une

matrice unitaire

$$\begin{aligned}
 \sum_n U_{kn} U_{nk'}^\dagger &= \sum_n U_{kn} U_{k'n}^* = \frac{1}{N} \sum_n e^{ikx_n} e^{-ik'x_n} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_n \exp \left[\frac{2i\pi}{Nl} (j - j') x_n \right] \\
 &= \frac{1}{N} \frac{1 - \exp(2i\pi(j - j')/N)}{1 - \exp(2i\pi(j - j')/N)} = \delta_{jj'}
 \end{aligned}$$

c'est-à-dire, en remarquant que $U_{nk}^\dagger = U_{kn}^* = U_{-kn}$

$$\sum_n U_{kn} U_{nk'}^\dagger = \sum_n U_{kn} U_{-k'n} = \delta_{kk'} \quad (11.43)$$

L'intervalle de variation de k est

$$0 \leq k \leq \frac{2\pi(N-1)}{Nl}$$

mais, compte tenu de la périodicité, nous pouvons le remplacer par l'intervalle

$$-\frac{\pi}{l} \leq k \leq \frac{\pi}{l}$$

qui est appelé *première zone de Brillouin* ; comme nous supposons $N \gg 1$, nous avons négligé les effets de bord. L'unitarité de U_{kn} permet d'écrire la transformation de Fourier inverse de (11.42)

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=-\pi/l}^{\pi/l} e^{-ikx_n} q_k = \sum_k U_{nk}^\dagger q_k = \sum_k U_{-kn} q_k \quad (11.44)$$

La transformation de Fourier (11.42) et son inverse (11.44) s'appliquent aussi bien à l'impulsion : il suffit de faire les substitutions $q_n \rightarrow p_n$, $q_k \rightarrow p_k$. On obtient l'expression recherchée du hamiltonien en exprimant p_n et q_n en fonction de p_k et q_k . Le terme d'énergie cinétique est le plus simple à évaluer

$$\sum_n p_n^2 = \sum_n \sum_{k,k'} U_{-kn} U_{-k'n} p_k p_{k'} = \sum_{k,k'} \delta_{k,-k'} p_k p_{k'} = \sum_k p_k p_{-k}$$

ce qui n'est pas autre chose que la relation de Parseval. Examinons ensuite le terme d'énergie potentielle

$$\begin{aligned}
 \sum_n (q_{n+1} - q_n)^2 &= \sum_n \sum_{k,k'} (e^{-ikl} - 1) (e^{-ik'l} - 1) U_{-kn} U_{-k'n} q_k q_{k'} \\
 &= \sum_k (e^{-ikl} - 1) (e^{ikl} - 1) q_k q_{-k} = 4 \sum_k \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right) q_k q_{-k}
 \end{aligned}$$

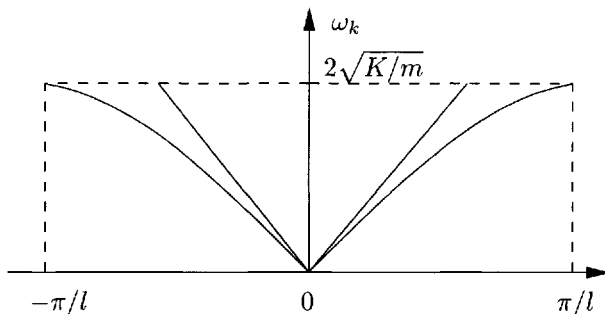


FIG. 11.2 – Loi de dispersion des modes normaux.

Combinant ces deux équations, nous arrivons à une expression de H_{cl} où les modes sont presque découplés

$$\begin{aligned} H_{cl} &= \sum_k \frac{p_k p_{-k}}{2m} + \frac{1}{2} K \sum_k 4 \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right) q_k q_{-k} \\ &= \sum_k \frac{p_k p_{-k}}{2m} + \frac{1}{2} m \sum_k \omega_k^2 q_k q_{-k} \end{aligned} \quad (11.45)$$

Nous avons défini la fréquence ω_k du mode k par

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \sin \frac{|k|l}{2} \quad (11.46)$$

La loi (11.46) donnant la fréquence ω_k en fonction de k est la *loi de dispersion* pour les modes normaux (figure 11.2). L'expression (11.45) de H_{cl} en fonction des modes normaux a été obtenue dans le cadre de la physique classique. Elle se généralise immédiatement à la version quantique en remplaçant dans (11.40) les nombres p_n et q_n par des opérateurs P_n et Q_n obéissant aux relations de commutation

$$[Q_n, P_{n'}] = i\hbar \delta_{nn'} I \quad (11.47)$$

car les opérateurs correspondant à des atomes n et n' différents commutent. Les transformations de Fourier se transposent sans modification à la version quantique du problème et nous avons donc

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \frac{P_k P_{-k}}{2m} + \frac{1}{2} K \sum_k 4 \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right) Q_k Q_{-k} \\ &= \sum_k \frac{P_k P_{-k}}{2m} + \frac{1}{2} m \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k} \end{aligned}$$

Les relations de commutation des Q_k et des P_k sont

$$[Q_k, P_{k'}] = \sum_{nn'} U_{kn} U_{k'n'} [Q_n, P_{n'}] = i\hbar I \sum_n U_{kn} U_{k'n} = i\hbar \delta_{k,-k'} I \quad (11.48)$$

Il reste à découpler les modes k et $-k$. Pour ce faire, nous introduisons les opérateurs d'annihilation et de création des modes normaux, par analogie avec (11.4) et (11.6)–(11.7)

$$Q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger) \quad P_k = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m \omega_k}{2}} (a_k - a_{-k}^\dagger) \quad (11.49)$$

Il est immédiat de vérifier que les relations de commutation (11.48) sont satisfaites à condition que⁵

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} I \quad (11.50)$$

On remarquera le facteur $\delta_{k,-k'}$ dans (11.48) et $\delta_{kk'}$ dans (11.50). Ce facteur a pour origine les conditions aux limites périodiques, qui impliquent des ondes planes avec $k > 0$ et $k < 0$. Si l'on utilise des conditions aux limites d'annulation, on a seulement $k > 0$ et on trouve un facteur $\delta_{kk'}$: exercice 11.5.9. En substituant les relations (11.49) dans l'expression de H et en utilisant les relations de commutation (11.50) nous aboutissons à la forme finale de H

$$H = \sum_{k=-\pi/l}^{\pi/l} \hbar \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (11.51)$$

Le hamiltonien est une somme d'oscillateurs harmoniques indépendants de fréquence ω_k . Soit $|r\rangle$ un état propre de H , $H|r\rangle = E_r|r\rangle$; compte tenu des relations de commutation (11.11)

$$H a_k |r\rangle = (a_k H + [H, a_k]) |r\rangle = (E_r - \hbar \omega_k) a_k |r\rangle$$

$$H a_k^\dagger |r\rangle = (a_k^\dagger H + [H, a_k^\dagger]) |r\rangle = (E_r + \hbar \omega_k) a_k^\dagger |r\rangle$$

L'opérateur de création $a_k^\dagger$ augmente l'énergie de $\hbar \omega_k$, tandis que l'opérateur d'annihilation a_k diminue l'énergie de $\hbar \omega_k$. À cette énergie est associée une *excitation élémentaire* ou une *quasi-particule*, appelée *phonon*. L'opérateur $N_k = a_k^\dagger a_k$, qui commute avec H , compte le nombre de phonons dans le mode k . Soit $|0_k\rangle$ l'état fondamental du mode k : $a_k |0_k\rangle = 0$; cet état correspond à zéro phonon dans le mode k . On construit l'état $|n_k\rangle$ qui contient n_k phonons dans le mode k en utilisant (11.18)

$$|n_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (a_k^\dagger)^{n_k} |0_k\rangle \quad (11.52)$$

5. De façon équivalente, on peut exprimer a_k et $a_k^\dagger$ en fonction de Q_k et P_k et en déduire les relations de commutation (11.50).

et les états propres de H par produit tensoriel d'états $|n_k\rangle$

$$|r\rangle = \bigotimes_{k=-\pi/l}^{k=\pi/l} |n_k\rangle \quad (11.53)$$

$$H|r\rangle = \sum_{k=-\pi/l}^{\pi/l} \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_k |r\rangle \quad (11.54)$$

L'espace de Hilbert ainsi construit est appelé *espace de Fock*. L'état $|r\rangle$ est spécifié par la donnée des *nombre d'occupation* n_k , ou nombre de phonons dans le mode k . Le formalisme que nous venons de développer permet de décrire des situations où le nombre de particules est variable, et nous venons en fait de construire un champ quantifié en utilisant l'exemple non trivial le plus simple possible.

11.3.2 Quantification du champ scalaire à une dimension

Après la quantification des vibrations sonores, notre objectif est maintenant celle du champ électromagnétique ; nous allons passer par une étape intermédiaire en quantifiant un modèle simple, celui du *champ scalaire* à une dimension que nous allons définir ci-dessous, qui est un modèle physiquement pertinent pour les vibrations d'une barre élastique considérée comme un milieu continu. Lorsque $|k|l \ll 1$, la loi de dispersion (11.46) devient linéaire en $|k|$

$$|k|l \ll 1 : \quad \omega_k \simeq \sqrt{\frac{K}{m}} |k|l = c_s |k| \quad (11.55)$$

où $c_s = l\sqrt{K/m}$ est la vitesse du son pour les faibles fréquences. Il sera utile de récrire cette équation comme une relation entre la vitesse du son, le module d'Young⁶ $Y = Kl$ et la masse par unité de longueur $\mu = m/l$

$$c_s = \sqrt{\frac{Y}{\mu}} \quad (11.56)$$

Notre champ scalaire sera la limite aux grandes longueurs d'onde $\lambda \gg l$ (ou $|k|l \ll 1$) du modèle sur réseau de la sous-section précédente, et la loi de dispersion linéaire (11.55) $\omega_k = c_s |k|$ sera supposée valable pour toute valeur de k . En fait notre objectif ultime est de prendre la limite $l \rightarrow 0$, aussi appelée

6. À une dimension, l'allongement ΔL d'une barre de longueur L sous l'action d'une force $F = K\Delta x$ vérifie

$$\frac{\Delta L}{L} = \frac{F}{Y} = \frac{\Delta x}{l} = \frac{F}{Kl}$$

d'où $Y = Kl$. À trois dimensions $\Delta L/L = F/(YS)$, où S est l'aire de la section droite de la barre, et $Y = K/l$, $c_s = \sqrt{Y/\mu}$ avec $\mu = m/l^3$.

limite continue du modèle sur réseau. On introduit deux fonctions $\varphi(x, t)$ et $\pi(x, t)$ telles que

$$q_n(t) = \varphi(x_n, t) \quad p_n(t) = l\pi(x_n, t) \quad (11.57)$$

Dans la limite des grandes longueurs d'onde, les élongations $q_n(t)$ et les impulsions $p_n(t)$ varient peu d'un site à l'autre et on peut utiliser l'approximation suivante pour la dérivée de $\varphi(x, t)$ par rapport à x

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=x_n} \simeq \frac{1}{l} [\varphi(x_{n+1}, t) - \varphi(x_n, t)] = \frac{1}{l} [q_{n+1}(t) - q_n(t)] \quad (11.58)$$

L'équation du mouvement (11.41) devient

$$\mu \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right|_{x=x_n} = \frac{Y}{l^2} ([\varphi(x_{n+1}) - \varphi(x_n)] + [\varphi(x_{n-1}) - \varphi(x_n)])$$

Un développement de Taylor à l'ordre l^2 donne

$$\varphi(x+l) + \varphi(x-l) - 2\varphi(x) \simeq l^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$$

et on obtient une équation d'ondes décrivant la propagation de vibrations à la vitesse c_s

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - c_s^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \quad (11.59)$$

Le hamiltonien classique s'écrit en fonction de φ_n et π_n

$$H_{cl} = l \sum_n \left[\frac{\pi^2(x_n)}{2\mu} + \frac{1}{2} Kl \left(\frac{\varphi(x_{n+1}) - \varphi(x_n)}{l} \right)^2 \right]$$

ce qui est une approximation de l'intégrale

$$H_{cl} = \int_0^L dx \left[\frac{1}{2\mu} \pi^2(x) + \frac{1}{2} \mu c_s^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (11.60)$$

où $L = Nl$ est la longueur du système : H_{cl} dans (11.60) est la version continue⁷ de (11.40). Nous avons supprimé la dépendance par rapport au temps : $\varphi(x) = \varphi(x, t=0)$ et $\pi(x) = \pi(x, t=0)$ car H_{cl} est indépendant du temps.

7. Le lecteur familier de la mécanique analytique remarquera que les équations de Hamilton sont

$$\frac{\delta H}{\delta \pi(x)} = \frac{1}{\mu} \pi = \dot{\varphi} \quad \frac{\delta H}{\delta \varphi(x)} = -Y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\mu \ddot{\varphi}$$

ce qui donne bien l'équation d'ondes (11.59).

Comme dans la sous-section précédente, nous allons décomposer $\varphi(x)$ et $\pi(x)$ en modes normaux à l'aide d'une transformation de Fourier. Définissons φ_k par

$$\varphi_k = \varphi_{-k}^* = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L dx e^{ikx} \varphi(x) \simeq \frac{l}{\sqrt{Nl}} \sum_n e^{ikx_n} \varphi(x_n) = \sqrt{l} q_k \quad (11.61)$$

par comparaison avec (11.42). Inversement φ_k est donné par

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ikx} \varphi_k \quad (11.62)$$

La relation pour p_k correspondant à (11.83) est $\pi_k = l^{-1/2} p_k$. Nous allons maintenant passer à la version quantique, en substituant aux nombres φ_k et π_k des opérateurs Φ_k et Π_k , obéissant à des relations de commutation⁸ déduites de (11.48)

$$[\Phi_k, \Pi_{k'}] = i\hbar \delta_{k, -k'} I \quad (11.63)$$

En conséquence, si l'on remplace les nombres φ_k et π_k dans (11.62) et dans l'équation équivalente pour $\pi(x)$ par les opérateurs Φ_k et Π_k , les fonctions $\varphi(x)$ et $\pi(x)$ deviennent des opérateurs $\Phi(x)$ et $\Pi(x)$: $\Phi(x)$ est appelé *opérateur de champ* ou *champ quantifié*⁹. On remarquera que $\Phi(x, t)$ et $\Pi(x, t)$ sont étiquetés par une variable continue x , tandis que leurs transformées de Fourier Φ_k et Π_k sont étiquetées par un indice discret k . Cette propriété découle de l'utilisation de conditions aux limites dans une boîte : $0 \leq x \leq L$. La variable x n'est pas une variable dynamique qui se transforme en opérateur dans la version quantique du problème, mais une *étiquette* d'un point sur la barre, et les opérateurs fondamentaux sont Φ et Π .

Nous pouvons maintenant exprimer le hamiltonien quantique H en fonction des composantes de Fourier de Π et Φ : écrivons par exemple le terme d'énergie potentielle en fonction des Φ_k

$$\begin{aligned} \int_0^L dx \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 &= \frac{1}{L} \int dx \sum_{k, k'} \Phi_k \Phi_{k'} (-ik) (-ik') e^{-ikx} e^{-ik'x} \\ &= - \sum_k \Phi_k \Phi_{k'} k k' \delta_{k, -k'} = \sum_k k^2 \Phi_k \Phi_{-k} \end{aligned}$$

8. La démarche usuelle consiste à déduire ces relations des relations de commutation canoniques à temps égaux postulées entre le champ $\Phi(x, t)$ et son « moment conjugué » $\Pi(x, t)$

$$[\Phi(x, t), \Pi(x', t)] = i\hbar \delta(x - x') I$$

relation qui est démontrée en (11.69) à partir de (11.63). Cette démarche est considérée – à tort – par certains auteurs comme plus « rigoureuse », mais elle est tout aussi heuristique que celle suivie ici.

9. La construction que nous avons suivie est parfois appelée « seconde quantification ». Cette expression est totalement incorrecte : il est clair qu'il n'y a qu'une seule quantification, et l'expression « seconde quantification » devrait être définitivement bannie.

On obtient l'expression suivante pour le hamiltonien quantique H

$$H = \sum_k \left(\frac{1}{2\mu} \Pi_k \Pi_{-k} + \frac{1}{2} \mu c_s^2 k^2 \Phi_k \Phi_{-k} \right) \quad (11.64)$$

Introduisons enfin comme en (11.49) les opérateurs a_k et $a_k^\dagger$ qui vérifient les relations de commutation (11.50)

$$\Phi_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger) \quad \Pi_k = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar\mu\omega_k}{2}} (a_k - a_{-k}^\dagger) \quad (11.65)$$

H prend à nouveau la forme d'une somme d'oscillateurs harmoniques indépendants

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (11.66)$$

Le résultat est superficiellement identique à (11.51), mais il y a une différence de taille ! En effet, les vecteurs d'onde k étaient précédemment limités : $|k| \leq \pi/l$. À la limite continue, il n'y a plus de borne sur k et l'énergie de point zéro

$$E_0 = \sum_k \frac{1}{2} \hbar\omega_k$$

est infinie. Toutefois ce résultat infini est artificiel dans ce cas précis (exercice 11.5.6). En effet, lorsque le vecteur d'onde k devient grand, ou de façon équivalente lorsque la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ devient petite, de l'ordre du pas l du réseau, la théorie continue n'est plus valable : c'est seulement si la longueur d'onde d'une vibration vérifie $\lambda \gg l$ que cette onde ne voit pas réseau cristallin sous-jacent. Nous retrouverons ce problème de l'énergie infinie dans le cas du champ électromagnétique, où cette fois k n'est pas limité.

Donnons en conclusion de cette sous-section le développement de Fourier du champ quantifié $\Phi_H(x, t)$ dans le point de vue de Heisenberg (4.30), avec $\Phi_H(x, t=0) = \Phi_S(x) = \Phi(x)$. La dépendance par rapport au temps s'obtient à l'aide des équations

$$\begin{aligned} a_k(t) &= e^{iHt/\hbar} a_k e^{-iHt/\hbar} = a_k e^{-i\omega_k t} \\ a_k^\dagger(t) &= e^{iHt/\hbar} a_k^\dagger e^{-iHt/\hbar} = a_k^\dagger e^{-i\omega_k t} \end{aligned} \quad (11.67)$$

que l'on montre à partir de

$$\frac{da_k}{dt} = -i[a_k(t), H] = -i\omega_k a_k(t)$$

et l'on obtient

$$\Phi_H(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu L}} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left[a_k e^{i(kx - \omega_k t)} + a_k^\dagger e^{-i(kx - \omega_k t)} \right] \quad (11.68)$$

On vérifie sur cette expression que l'opérateur de champ $\Phi(x, t)$, dont les dimensions sont celles d'une longueur, est bien hermitique. Il est immédiat de calculer les relations de commutation de $\Phi_H(x, t)$ et de $\Pi_H(x', t)$. Plaçons nous d'abord à $t = 0$, $\Phi(x) = \Phi_H(x, t = 0)$, $\Pi(x') = \Pi_H(x', t = 0)$

$$\begin{aligned} [\Phi(x), \Pi(x')] &= -\frac{i\hbar}{2L} \sum_{k, k'} \sqrt{\frac{\omega_{k'}}{\omega_k}} \left[a_k e^{ikx} + a_k^\dagger e^{-ikx}, a_{k'} e^{ik'x} - a_{k'}^\dagger e^{-ik'x} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{L} \sum_k e^{ik(x-x')} I = i\hbar \delta(x-x') I \end{aligned} \quad (11.69)$$

où nous avons utilisé (9.145) pour obtenir la dernière égalité. Comme ce commutateur est un multiple de l'identité, on obtient trivialement le même résultat pour le commutateur à temps égaux $[\Phi_H(x, t), \Pi_H(x', t)]$.

11.3.3 Quantification du champ électromagnétique

La quantification du champ électromagnétique suit le schéma de celle du champ scalaire de la sous-section précédente, avec trois modifications : nous devons passer de une à trois dimensions, tenir compte du caractère vectoriel du champ électromagnétique et remplacer la vitesse du son c_s par celle de la lumière c . Rappelons les équations de Maxwell (1.8)–(1.9) pour le champ électrique $\vec{E}$ et le champ magnétique $\vec{B}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (11.70)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{em}}{\varepsilon_0} \quad c^2 \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}_{em} \quad (11.71)$$

Les deux équations (11.70) sont des équations de *contraintes* sur les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$, tandis que les deux équations (11.71) dépendent des *sources* du champ électromagnétique, c'est-à-dire de la densité de charge ρ_{em} et de la densité de courant $\vec{j}_{em}$. On déduit des équations de Maxwell l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho_{em}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{em} = 0 \quad (11.72)$$

On pourrait songer à quantifier les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$. Cependant cette idée se heurte à deux difficultés : tout d'abord $\vec{E}$ et $\vec{B}$ sont liés par des contraintes, ce qui fait que les six composantes ne sont pas indépendantes, et surtout, comme le montre l'effet Bohm-Aharonov¹⁰, l'interaction du champ électromagnétique avec les charges n'est pas locale. On préfère passer par l'intermédiaire des

10. Voir par exemple Feynman *et al.*[1965], Vol II, chapitre 15.

potentiels¹¹ scalaire $\bar{V}$ et vecteur $\vec{A}$ dont on déduit les champs

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\bar{V} - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (11.73)$$

Cette utilisation des potentiels au lieu des champs ne devrait pas surprendre : en effet, en mécanique quantique, nous n'avons jamais utilisé les forces, reliées directement aux champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ par la loi de Lorentz (1.11), mais toujours l'énergie potentielle. En mécanique quantique, ce sont l'énergie et l'impulsion qui jouent le rôle fondamental, car ce sont elles qui influencent directement la phase de la fonction d'onde. En présence d'un champ électrique $\vec{E}$, c'est le potentiel $\bar{V}$ qui intervient directement dans l'équation de Schrödinger via l'énergie potentielle $V = q\bar{V}$. On ne sera pas surpris qu'en présence d'un champ magnétique $\vec{B}$, ce soit le potentiel vecteur $\vec{A}$ qui intervienne directement dans l'équation de Schrödinger, et non le champ $\vec{B}$.

Les potentiels ne sont pas uniques. En effet dans une *transformation de jauge*

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda \quad \bar{V} \rightarrow \bar{V}' = \bar{V} + \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (11.74)$$

où $\Lambda(\vec{r}, t)$ est une fonction scalaire de l'espace et du temps, les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ ne sont pas modifiés. Afin de lever l'arbitraire sur les potentiels $(\vec{A}, \bar{V})$, on fait souvent un *choix de jauge* en imposant une condition sur $(\vec{A}, \bar{V})$. Un choix fréquent que nous adopterons (mais ce n'est pas le seul possible !) est celui de la *jauge de Coulomb*, ou *jauge de rayonnement*

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (11.75)$$

Avec ce choix, le potentiel vecteur est transverse : en effet, si l'on passe dans l'espace de Fourier, la condition (11.75) se traduit par $\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}) = 0$ (voir également l'exercice 11.5.7). D'après la première des équations (11.71) et (11.73)

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla}\bar{V} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = \nabla^2 \bar{V} + \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) = \nabla^2 \bar{V} = -\frac{\rho_{\text{em}}}{\varepsilon_0}$$

d'où l'on déduit le potentiel scalaire $\bar{V}$

$$\bar{V}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho_{\text{em}}(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (11.76)$$

Cette expression du potentiel scalaire est appelée *potentiel de Coulomb instantané*, car les effets de retard ne sont pas apparents : le temps t dans $\bar{V}$

11. Nous utilisons la notation $\bar{V}$ pour le potentiel électrique, afin de ne pas créer de confusion avec l'énergie potentielle V : une particule de charge q dans le potentiel $\bar{V}$ a une énergie potentielle $V = q\bar{V}$.

est le même que celui de la source ρ_{em} . Cette caractéristique pourrait sembler incompatible avec la relativité, mais on doit se souvenir qu'un potentiel n'est pas directement observable, et la contradiction est seulement apparente¹².

En l'absence de sources : $\rho_{\text{em}} = \vec{j}_{\text{em}} = 0$, la seconde des équations (11.71) s'écrit

$$c^2 \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = c^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - c^2 \nabla^2 \vec{A} = -\frac{\partial(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})}{\partial t} - \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2}$$

soit, en tenant compte de (11.75) et de $\vec{V} = 0$

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \vec{A} = 0 \quad (11.77)$$

Cette équation d'ondes est l'analogue de (11.59) avec les trois différences suivantes : (i) la dimension d'espace est trois, et non un ; (ii) la vitesse est celle de la lumière c et non celle du son c_s ; (iii) le champ $\vec{A}$ est un champ vectoriel et non un champ scalaire. Compte tenu de l'expression classique de la densité d'énergie du champ électromagnétique, l'expression du hamiltonien classique est

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int d^3r \left(\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2 \right) \quad (11.78)$$

Si $\vec{A}$ est l'analogue de φ , alors $\vec{E} = -\partial \vec{A} / \partial t$ sera celui¹³ de π tandis que le terme $c^2 \vec{B}^2$, qui dépend des dérivées spatiales de $\vec{A}$, sera l'analogue de $c_s^2 (\partial \varphi / \partial x)^2$. Nous pouvons écrire directement un développement de Fourier du champ quantifié¹⁴ $\vec{A}_H(\vec{r}, t)$ par analogie avec (11.68), à condition de faire les substitutions $L \rightarrow L^3$ et $\mu \rightarrow \varepsilon_0$. Cette dernière substitution se déduit de la comparaison des termes $\varepsilon_0 c^2 (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2$ dans (11.78) et $\mu c_s^2 (\partial \varphi / \partial x)^2$ dans (11.60). Une dernière différence avec (11.68) vient du caractère vectoriel de $\vec{A}$: *a priori* une composante de Fourier de $\vec{A}$ devrait être décomposée sur une base orthonormée de trois vecteurs $\hat{k}$, $\vec{e}_1(\hat{k})$ et $\vec{e}_2(\hat{k})$, avec $\hat{k} \cdot \vec{e}_i(\hat{k}) = 0$. C'est effectivement ce qui se passerait pour des vibrations sonores à trois dimensions dans un milieu isotrope¹⁵, où les vibrations peuvent être soit de compression, c'est-à-dire longitudinales et parallèles à $\hat{k}$, soit de cisaillement, c'est-à-dire transversales et perpendiculaires à $\hat{k}$. Dans le cas du champ électromagnétique, la condition de jauge (11.75) se traduit dans l'espace de Fourier par $\hat{k} \cdot \vec{A}(\hat{k}) = 0$ et il n'y a pas de composante longitudinale. Tenant compte de tous ces facteurs, nous pouvons généraliser (11.68) et écrire le

12. cf. Weinberg[1995], chapitre 8.

13. En fait dans une formulation du type mécanique analytique de l'électromagnétisme (cf. la note 7), c'est $-\varepsilon_0 \vec{E}$ qui joue le rôle de moment conjugué de $\vec{A}$, comme le montre (11.85).

14. Afin de distinguer les champs quantifiés des champs classiques, nous les désignons par des lettres « sans sérif » : $\vec{A}$, $\vec{E}$, $\vec{B}$.

15. Toutefois, notre discussion est trop simpliste car la vitesse des ondes de compression diffère de celle des ondes de cisaillement.

*champ électromagnétique quantifié*¹⁶ dans le point de vue de Heisenberg (nous continuons à utiliser des conditions aux limites périodiques dans une boîte de volume $\mathcal{V} = L^3$, ou *quantification dans une boîte*)

$$\boxed{\vec{A}_H(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \times \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\hat{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right]} \quad (11.79)$$

Les vecteurs unitaires $\vec{e}_s(\hat{k})$, orthogonaux à $\vec{k}$, décrivent la polarisation. On peut choisir une base de polarisation complexe, par exemple une base d'états de polarisation circulaire : $s = D, G$, d'où la nécessité du complexe conjugué dans le second terme de (11.79), qui assure l'hermiticité de $\vec{A}$. L'expression du projecteur sur le sous-espace orthogonal à $\vec{k}$ est souvent utile

$$\sum_s e_{si}(\hat{k}) e_{sj}^*(\hat{k}) = \delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \quad (11.80)$$

Les opérateurs $a_{\vec{k}s}$ ($a_{\vec{k}s}^\dagger$) détruisent (créent) des photons de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation s . Ils obéissent aux relations de commutation

$$\boxed{[a_{\vec{k}s}, a_{\vec{k}'s'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{ss'} I} \quad (11.81)$$

On déduit de (11.79) l'expression du champ électrique quantifié $\vec{E}_H = -\partial \vec{A}_H / \partial t$

$$\vec{E}_H(\vec{r}, t) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\omega_k} \times \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} - a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\hat{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] \quad (11.82)$$

et celle du champ magnétique, compte tenu de

$$\vec{\nabla} \times (\vec{e}_s(\hat{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}) = i\vec{k} \times \vec{e}_s(\hat{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (11.83)$$

$$\vec{B}_H(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{i}{c} \sqrt{\omega_k} \hat{k} \times \left[\vec{e}_s(\hat{k}) a_{\vec{k}s} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} - \vec{e}_s^*(\hat{k}) a_{\vec{k}s}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right] \quad (11.84)$$

Comme dans une onde plane classique, $\vec{B} = (\hat{k}/c) \times \vec{E}$. Il est facile, comme dans le cas du champ scalaire, de calculer les commutateurs des diverses

16. Nous avons passé sous silence quelques problèmes délicats : voir par exemple Weinberg [1995], chapitre 8, pour une discussion approfondie.

composantes du champ à $t = 0$. On trouve les relations de commutation suivantes entre la composante A_i du champ et celle $-\varepsilon_0 E_j$ de son moment conjugué (exercice 11.5.8)

$$[A_i(\vec{r}), -\varepsilon_0 E_j(\vec{r}')] = i\hbar \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) I \quad (11.85)$$

où nous avons utilisé (9.151). On en déduit que E_x commute avec B_x , mais non avec B_y ou B_z : on ne peut pas mesurer simultanément au même point la composante x du champ électrique et la composante y du champ magnétique.

L'expression du hamiltonien (exercice 11.5.8) généralise trivialement (11.66)

$$H = \sum_{\vec{k}, s} \hbar \omega_k \left(a_{\vec{k}, s}^\dagger a_{\vec{k}, s} + \frac{1}{2} \right) \quad (11.86)$$

On en déduit l'énergie (infinie) de point zéro

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, s} \hbar \omega_k \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k \hbar c k = \frac{\hbar c L^3}{2\pi^2} \int_0^\infty k^3 dk \quad (11.87)$$

où nous avons utilisé (9.151). Dans le rayonnement du corps noir, la mécanique quantique s'était révélée capable de contrôler les *fluctuations thermiques*, qui conduisaient à une énergie infinie en mécanique statistique classique. Mais nous avons éliminé cet infini pour en introduire un autre, cette fois lié aux *fluctuations quantiques*. Ces fluctuations quantiques ont des effets observables, comme l'effet Casimir (exercice 11.5.12). L'énergie de point zéro est aussi appelée *énergie du vide*, dont les propriétés restent encore aujourd'hui largement débattues, et qui pourrait jouer un rôle important en cosmologie.

On peut écrire un couplage du champ quantifié avec une source classique $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ de la forme

$$W(t) = - \int d^3r \vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t) \cdot \vec{A}(\vec{r}) \quad (11.88)$$

Ce couplage généralise celui (11.124) de l'oscillateur harmonique forcé dans l'exercice 11.5.4 : la force $f(t)$ est remplacée par la source $\vec{j}_{\text{em}}$ et l'opérateur position Q par le champ quantifié $\vec{A}$. On peut alors montrer que si l'on part d'un état à zéro photon et si la source agit pendant un temps fini, on obtient un état cohérent du champ électromagnétique, où le nombre de photons dans un mode $\vec{k}$ est donné par une loi de Poisson dont la valeur moyenne est déterminée par $|\vec{j}_{\text{em}}(\vec{k}, \omega_k)|^2$, $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{k}, \omega_k)$ étant la transformée de Fourier quadridimensionnelle de $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ ¹⁷.

17. Voir l'exercice 11.5.4. On trouvera un traitement détaillé par exemple dans Le Bellac [1988], chapitre 9 ou C. Itzykson et J-B Zuber, *Quantum Field Theory*, Mac Graw Hill, New-York (1980), chapitre 4.

Le champ quantifié $\vec{A}$ a été écrit dans la jauge de Coulomb. C'est la jauge la plus commode pour traiter les problèmes élémentaires, mais ce n'est pas la jauge qui convient pour traiter l'électrodynamique quantique de façon générale. En effet, la condition $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ privilégie un référentiel d'inertie particulier et l'invariance de Lorentz de la théorie n'est pas manifeste. Naturellement il ne s'agit pas d'un défaut rédhibitoire, car il est possible de vérifier tous calculs faits l'invariance de Lorentz des résultats physiques. Le véritable défaut de la jauge de Coulomb est qu'elle conduit à des calculs inextricables car le programme de renormalisation (élimination des infinis) exige que l'on maintienne de façon explicite l'invariance de Lorentz, si l'on veut garder des calculs maniables¹⁸. Une jauge où l'invariance de Lorentz est manifeste est la jauge de Lorentz¹⁹

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Cependant la jauge de Lorentz introduit des états non physiques, que l'on doit correctement interpréter et éliminer des résultats physiques. Ces états non physiques n'apparaissent pas dans la jauge de Coulomb, qui est un exemple de « jauge physique ». Malheureusement on ne peut pas à la fois utiliser une jauge physique et conserver l'invariance de Lorentz formelle.

11.3.4 Fluctuations quantiques du champ électromagnétique

Dans le formalisme de la sous-section précédente, le champ électromagnétique est un opérateur et on doit observer des fluctuations quantiques. Dans l'état à zéro photon, ou état du vide $|0\rangle$, la valeur moyenne des champs électrique (11.82) et magnétique (11.84) est nulle

$$\langle 0 | \vec{E}_H(\vec{r}, t) | 0 \rangle = \langle 0 | \vec{B}_H(\vec{r}, t) | 0 \rangle = 0$$

car $\langle 0 | a_{\vec{k}s} | 0 \rangle = \langle 0 | a_{\vec{k}s}^\dagger | 0 \rangle = 0$, mais la nullité des valeurs moyennes n'implique pas celle des fluctuations ! Ces fluctuations ont des conséquences physiques importantes, et nous allons les examiner successivement dans plusieurs types d'états : le vide, les états à nombre de photons fixé, les états cohérents et les états comprimés. Afin de simplifier la discussion, nous nous concentrons sur un seul mode de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation s fixés, $a_{\vec{k}s} \rightarrow a$, $\omega_{\vec{k}} \rightarrow \omega$, en nous plaçant de plus à $\vec{r} = 0$. Cette restriction à un mode unique est souvent une bonne approximation, par exemple pour un laser monomode si l'on peut négliger les effets transverses dus à la diffraction ou pour un mode

18. D'un point de vue technique, les contre-terms qui éliminent les infinis sont contraints par l'invariance de Lorentz, si le choix de jauge respecte cette invariance formelle.

19. Cette invariance de Lorentz formelle est manifeste en notation quadri-dimensionnelle : $\partial_\mu A^\mu = 0$, $A^\mu = (\vec{V}, \vec{A})$.

dans une cavité supraconductrice du type étudié à l'annexe B. Le champ électrique dans une cavité réduit à un seul mode s'écrit

$$\mathbf{E}(t) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} (a e^{-i\omega t} - a^\dagger e^{i\omega t}) \quad (11.89)$$

où $\mathcal{V}$ est le volume de la cavité ; l'expression (11.89) se déduit immédiatement de celle (11.136) du champ électrique écrite dans l'exercice 11.5.9. Nous avons supprimé l'indice H et la notation vectorielle afin d'alléger les notations ; les opérateurs a et $a^\dagger$ vérifient la relation de commutation $[a, a^\dagger] = I$. Calculons d'abord les fluctuations de $\mathbf{E}$ dans l'état du vide en utilisant

$$(a e^{-i\omega t} - a^\dagger e^{i\omega t})^2 = a^2 e^{-2i\omega t} + (a^\dagger)^2 e^{2i\omega t} - 2a^\dagger a - I \quad (11.90)$$

Seul le dernier terme donne un résultat non nul quand on prend la valeur moyenne sur le vide et

$$\langle 0 | \mathbf{E}^2(t) | 0 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

d'où la dispersion

$$\Delta_0 \mathbf{E} = [\langle 0 | \mathbf{E}^2(t) | 0 \rangle - \langle 0 | \mathbf{E}(t) | 0 \rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \quad (11.91)$$

Les fluctuations quantiques du champ électromagnétique ont des conséquences physiques importantes : outre l'effet Casimir (exercice 11.5.12), elles sont aussi à l'origine du clivage entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène dégénérés à l'approximation de la théorie relativiste de Dirac (cf. § 14.2.2), et qui est appelé *déplacement Lamb*. Ce déplacement $\simeq 4.38 \times 10^{-6}$ eV est une fraction de l'ordre de 10^{-7} de la différence d'énergie entre les niveaux $1s$ et $2s$, et il vaut 1058 MHz en unités de fréquence²⁰. Ces fluctuations sont aussi responsables du moment magnétique anormal de l'électron : alors que la théorie de Dirac prédit un facteur gyromagnétique de l'électron $\gamma_e = q_e/m_e$, ce facteur est en fait

$$\gamma_e = \frac{q_e}{m_e} \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2) \right)$$

où $\alpha \simeq 1/137$ est la constante de structure fine.

Dans un état à nombre de photons n fixé (dans le mode considéré), la valeur moyenne de $\mathbf{E}(t)$ est nulle car $\langle n | a | n \rangle = \langle n | a^\dagger | n \rangle = 0$, tandis que celle de $\mathbf{E}^2(t)$ vaut d'après (11.90) et (11.12)

$$\langle n | \mathbf{E}^2(t) | n \rangle = \frac{\hbar\omega(2n+1)}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}$$

20. Une faible partie de ce déplacement (-27 MHz $\simeq 3$ %) est due, non aux fluctuations du champ électromagnétique, mais à celles du champ électron-positron. La création de paires (virtuelles) électron-positron a un effet d'écran sur le champ coulombien et agit comme une constante diélectrique du vide. L'effet est beaucoup plus important pour les atomes muoniques : cf. l'exercice 14.5.3 et la note 36 du chapitre 1.

d'où la dispersion $\Delta_n E$ dans l'état $|n\rangle$

$$\Delta_n E = [\langle n|E^2|n\rangle - \langle n|E|n\rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega(2n+1)}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \quad (11.92)$$

Cette dispersion croît comme la racine carrée du nombre de photons lorsque $n \gg 1$.

Des états plus intéressants en pratique que ceux à nombre de photons fixé sont les états cohérents $|z\rangle$. En effet, la grande majorité des sources lumineuses usuelles émettent des états du champ électromagnétique très proches d'un état cohérent (laser), ou d'un mélange statistique d'états cohérents (source classique). Calculons la valeur moyenne de $E(t)$ dans un état cohérent en posant $z = |z| \exp(i\phi)$

$$\langle z|E(t)|z\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} (ze^{-i\omega t} - z^*e^{i\omega t}) = \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} |z| \sin(\omega t - \phi) \quad (11.93)$$

tandis que

$$\langle z|E^2(t)|z\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}} \left[(ze^{-i\omega t} - z^*e^{i\omega t})^2 - 1 \right]$$

La dispersion $\Delta_z E$ dans un état cohérent est identique à la dispersion dans le vide

$$\Delta_z E = [\langle z|E^2(t)|z\rangle - \langle z|E(t)|z\rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} = \Delta_0 E \quad (11.94)$$

La nombre moyen de photons est $\langle N \rangle_z = \langle z|N|z\rangle = |z|^2$ et la dispersion $\Delta_z N = |z|$. Ces deux résultats découlent de la distribution de Poisson (11.34) du nombre de photons, qui permet de prédire la statistique des résultats dans les expériences de comptage de photons.

Définissons les opérateurs hermitiques Q et P par

$$Q = \frac{1}{2} (a + a^\dagger) \quad P = \frac{1}{2i} (a - a^\dagger) \quad (11.95)$$

qui vérifient la relation de comutation $[Q, P] = i/2$, d'où l'on tire l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta P \Delta Q \geq \frac{1}{4} \quad (11.96)$$

Un calcul immédiat montre que

$$E(t) = \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} [Q \sin \omega t - P \cos \omega t] \quad (11.97)$$

tandis que, suivant (11.37) et (11.39)

$$\langle Q \rangle_z = \operatorname{Re} z \quad \langle P \rangle_z = \operatorname{Im} z \quad \Delta_z P = \Delta_z Q = \frac{1}{2}$$

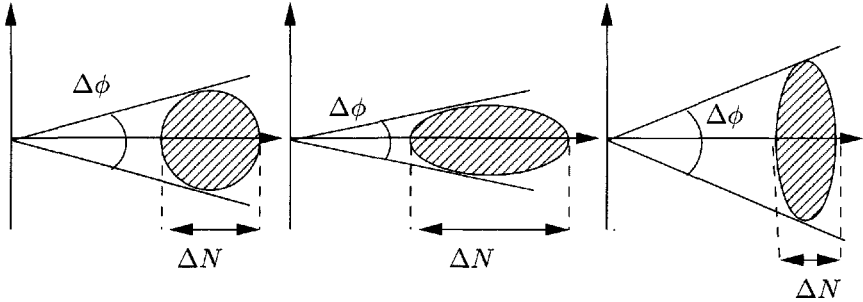


FIG. 11.3 – Représentation de Fresnel du champ électrique. La zone hachurée représente la dispersion sur l'extrémité du champ. (a) état cohérent ; (b) et (c) états comprimés.

L'inégalité de Heisenberg (11.96) est donc saturée quand le champ se trouve dans un état cohérent. On peut représenter géométriquement (11.97) : $E(t)$ décrit dans le plan (q, p) un cercle de rayon $\simeq |z| \sqrt{2\hbar\omega/\varepsilon_0\mathcal{V}}$ avec une vitesse angulaire ω . L'extrémité de ce vecteur fluctue dans un cercle de rayon R

$$R \simeq \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} \Delta_z Q = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}}$$

En d'autres termes, la position de l'extrémité du vecteur champ électrique dans la représentation de Fresnel présente un certain flou, $\simeq [\hbar\omega/(2\varepsilon_0\mathcal{V})]^{1/2}$. La figure 11.3 (a) montre que la dispersion sur la phase ϕ est de l'ordre de $\Delta_z Q/|z| = 1/(2|z|)$, mais d'après (11.39) la fluctuation du nombre de photons est précisément $\Delta_z N = |z|$. On obtient donc pour un état cohérent une relation entre la dispersion $\Delta_z \phi$ sur la phase et celle $\Delta_z N$ sur le nombre de photons

$$\Delta_z \phi \Delta_z N \simeq \frac{1}{2} \quad (11.98)$$

Ces fluctuations sont très faibles pour un laser monomode où $|z| \gg 1$, mais elles sont importantes pour la cavité supraconductrice étudiée à l'annexe B, où $|z| \lesssim 3$.

On souhaiterait pouvoir démontrer une inégalité de Heisenberg sur le produit $\Delta\phi\Delta N$, mais une démonstration calquée sur celle du § 4.1.3 est impossible car on ne sait pas définir un opérateur de phase. On peut néanmoins essayer de simuler les fluctuations quantiques en prenant comme modèle un champ classique dont l'amplitude et la phase sont des fonctions aléatoires, et il est alors possible de montrer l'inégalité

$$\boxed{\Delta\phi\Delta N \geq \frac{1}{2}} \quad (11.99)$$

Les états cohérentsaturent l'inégalité (11.99).

Il existe un autre type d'états intéressant, les *états comprimés*. Ces états s'obtiennent à partir d'une transformation de Bogoliubov²¹ sur les opérateurs a et $a^\dagger$. Soit b et $b^\dagger$ les opérateurs

$$b = \lambda a + \mu a^\dagger \quad b^\dagger = \lambda^* a^\dagger + \mu^* a \quad (11.100)$$

où les nombres complexes λ et μ vérifient

$$|\lambda|^2 - |\mu|^2 = 1$$

Il est immédiat de vérifier que les opérateurs b et $b^\dagger$ obéissent à $[b, b^\dagger] = I$: on dit que la transformation de Bogoliubov est une *transformation canonique*, elle préserve les relations de commutation. Comme les opérateurs b et $b^\dagger$ vérifient la même algèbre que a et $a^\dagger$, il existe des états $|\tilde{z}\rangle$ tels que $b|\tilde{z}\rangle = \tilde{z}|\tilde{z}\rangle$. La transformation inverse de (11.100) est

$$a = \lambda^* b - \mu b^\dagger \quad a^\dagger = \lambda b - \mu^* b^\dagger$$

Un calcul simple mais fastidieux (exercice 11.5.5) montre que les dispersions dans l'état $|\tilde{z}\rangle$ vérifient

$$\Delta_{\tilde{z}}P = \frac{1}{2} |\lambda - \mu| \quad \Delta_{\tilde{z}}Q = \frac{1}{2} |\lambda + \mu|$$

soit, si λ et μ sont réels, ou ont la même phase

$$\Delta_{\tilde{z}}P \Delta_{\tilde{z}}Q = \frac{1}{4}$$

On en déduit que les états comprimés, tout comme les états cohérents, saturent l'inégalité de Heisenberg. Les figures 11.3 (b) et (c) montrent schématiquement la représentation de Fresnel du champ électrique dans un état comprimé. On voit que l'on peut, soit diminuer la dispersion sur la phase et augmenter celle sur N , soit inversement diminuer la dispersion sur le nombre de photons et augmenter celle sur ϕ .

11.4 Mouvement dans un champ magnétique

11.4.1 Invariance de jauge locale

Nous revenons maintenant au champ électromagnétique *classique* ($\vec{E}, \vec{B}$) : notre objectif est d'établir la forme de l'interaction de ce champ avec une particule quantique chargée de charge q . En électrodynamique classique, la densité de charge électrique $\rho_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ et la densité de courant

$$\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t) = \rho_{\text{em}}(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) \quad (11.101)$$

21. Cette transformation a été utilisée pour la première fois par Bogoliubov au début des années 1950 dans la théorie de la superfluidité.

vérifient l'équation de continuité (11.72). Nous souhaitons généraliser l'expression de ce courant à la physique quantique. Nous avons établi au chapitre 9 l'expression du courant de particules (9.141)

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{r}, t) &= \text{Re} \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{\nabla} \right] \varphi(\vec{r}, t) \right) \\ &= \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \right] \varphi(\vec{r}, t) - \varphi(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \right] \varphi^*(\vec{r}, t) \right) \quad (11.102)\end{aligned}$$

Le courant électromagnétique créé par le mouvement d'une particule quantique chargée de charge q devrait être *a priori* $j_{\text{em}} = q\vec{j}$, la densité de charge ρ_{em} étant $q|\varphi|^2$. Cette forme du courant de particules obéit à l'équation de continuité (11.72) lorsque la fonction d'onde $\varphi(\vec{r}, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \varphi$$

et il en est de même pour le courant électromagnétique associé

$$\rho_{\text{em}} = q|\varphi|^2, \quad \vec{j}_{\text{em}} = q\vec{j}$$

qui vérifie (11.72). Cependant nous allons voir que l'expression (11.102) du courant doit être modifiée en présence d'un potentiel vecteur. L'expression (11.102) du courant est invariante dans une *transformation de jauge globale*, qui consiste à multiplier φ par un facteur de phase

$$\boxed{\varphi(\vec{r}, t) \rightarrow \varphi'(\vec{r}, t) = \exp\left(-i\frac{q}{\hbar} \Lambda\right) \varphi(\vec{r}, t) = \Omega \varphi(\vec{r}, t)} \quad (11.103)$$

où Λ est un nombre réel. Lorsque Λ est une fonction de $\vec{r}$ et de t , on a affaire à une *transformation de jauge locale* : le lien avec (11.74) sera bientôt fait. Nous allons déduire la forme du courant d'un principe d'invariance de jauge locale, qui pourra sembler *a priori* arbitraire. En fait ce principe est très général, car on pense aujourd'hui que toutes les interactions fondamentales de la physique se déduisent d'un tel principe (exercice 11.5.11). Une transformation de jauge locale s'obtient en remplaçant la constante Λ dans (11.103) par une *fonction* de $\vec{r}$ et de t

$$\boxed{\varphi(\vec{r}, t) \rightarrow \varphi'(\vec{r}, t) = \exp\left(-i\frac{q}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)\right) \varphi(\vec{r}, t) = \Omega(\vec{r}, t) \varphi(\vec{r}, t)} \quad (11.104)$$

Cette transformation est manifestement unitaire. Il est immédiat de vérifier que le courant (11.102) n'est pas invariant dans une transformation de jauge locale, car le gradient agit sur $\exp(iq\Lambda/\hbar)$. Nous allons modifier l'expression du courant en substituant au gradient $\vec{\nabla}$ la *dérivée covariante* $\vec{D}$

$$\boxed{-i\hbar \vec{D} = -i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}} \quad (11.105)$$

Contrairement à la dérivée ordinaire, la dérivée covariante a une action simple lorsque l'on effectue une transformation de jauge locale (11.104)

$$\begin{aligned}
 -i\hbar\vec{D}\varphi &= -i\hbar\vec{D}(\Omega^{-1}\varphi') = (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Lambda(\vec{r}, t)\right) \varphi'(\vec{r}, t) \\
 &= \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A} + q\vec{\nabla}\Lambda)\varphi' \\
 &= \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}')\varphi' = \Omega^{-1}(-i\hbar\vec{D}'\varphi') \quad (11.106)
 \end{aligned}$$

où $\vec{D}'$ est la dérivée covariante calculée avec le potentiel vecteur transformé (11.74). Les dérivées covariantes $\vec{D}$ et $\vec{D}'$ sont physiquement équivalentes car $\vec{A}$ est $\vec{A}'$ le sont. L'expression du courant devient invariante par transformation de jauge locale si au lieu de la dérivée ordinaire on se sert de la dérivée covariante

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}, t) &= \text{Re} \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{\nabla} - \frac{q}{m} \vec{A} \right] \varphi(\vec{r}, t) \right) \\
 &= \text{Re} \left(\varphi^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{D}\varphi \right] \right) \quad (11.107)
 \end{aligned}$$

En effet, si l'on exprime φ en fonction de φ' en utilisant (11.104) et (11.106)

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}, t) &= \text{Re} \left(\varphi'^*(\vec{r}, t) \Omega \Omega^{-1} \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{D}'\varphi' \right] \right) \\
 &= \text{Re} \left(\varphi'^*(\vec{r}, t) \left[\frac{-i\hbar}{m} \vec{D}'\varphi' \right] \right) = \vec{j}'(\vec{r}, t)
 \end{aligned}$$

Ceci suggère que l'opérateur vitesse $d\vec{R}/dt$ n'est pas simplement $d\vec{R}/dt = \vec{P}/m = -(i\hbar/m)\vec{\nabla}$ mais plutôt

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{D} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} - \frac{q}{m} \vec{A} \quad (11.108)$$

Sachant que l'opérateur vitesse est donné par le commutateur de $\vec{R}$ avec le hamiltonien, examinons sa composante x . D'après (8.61) et l'expression (11.108) de $d\vec{R}/dt$

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X] = \frac{1}{m} (P_x - qA_x)$$

ce qui donne, en reprenant le raisonnement de la section 8.4, la forme la plus générale de H

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\bar{V} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + q\bar{V} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 + q\bar{V} \quad (11.109)$$

où $V = q\bar{V}$ est une fonction arbitraire de $\vec{R}$ et t . Exiger l'invariance de jauge locale du courant permet de retrouver la forme générique (8.73) du hamiltonien compatible avec l'invariance galiléenne. La substitution $-i\hbar\vec{\nabla} \rightarrow -i\hbar\vec{D}$ dans l'équation de Schrödinger, écrite dans un premier temps en l'absence de champ électromagnétique, et qui permet d'écrire cette équation en présence d'un tel champ est appelée *couplage minimal*²². La prescription du couplage minimal s'étend aux théories de jauge non abéliennes (exercice 11.5.11) et permet d'écrire toutes les interactions du modèle standard de la physique des particules élémentaires entre les particules de spin 1/2 (« particules de matière ») et celles de spin 1 (bosons de jauge) définies au § 1.1.3.

En mécanique analytique, on montre que le hamiltonien dont se déduit la force de Lorentz (1.11) est

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\bar{V}$$

Un autre façon d'obtenir (11.109) est de partir de cette forme classique et d'utiliser le principe de correspondance pour remplacer $\vec{p}$ et $\vec{r}$ par des opérateurs : $\vec{p} \rightarrow \vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$, $\vec{r} \rightarrow \vec{R}$.

Si φ est solution de l'équation de Schrödinger dans le potentiel $(\vec{A}, \bar{V})$, alors φ' en sera solution dans le potentiel transformé de jauge $(\vec{A}', \bar{V}')$ (11.74). En effet l'équation de Schrödinger pour φ s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \varphi + q\bar{V} \varphi$$

Mais d'une part

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp \left(\frac{iq\Lambda}{\hbar} \right) \varphi' \right) = \Omega^{-1} \left(\frac{iq}{\hbar} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \varphi' + \frac{\partial \varphi'}{\partial t} \right)$$

et d'autre part

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \varphi = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D})^2 \Omega^{-1} \varphi' = \Omega^{-1} \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D}')^2 \varphi'$$

ce qui donne, en mettant Ω^{-1} en facteur dans les deux membres de l'équation de Schrödinger pour φ'

$$i\hbar \frac{\partial \varphi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{D}')^2 \varphi' + q\bar{V}' \varphi'$$

22. L'interaction $W = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}$ entre un moment magnétique de spin et un champ magnétique ne semble pas découler du couplage minimal. En fait, cette interaction se déduit de l'équation relativiste de Dirac et de l'application de la prescription du couplage minimal à cette équation, d'où l'on tire le facteur gyromagnétique $\gamma = q_e/m_e$. Les corrections de type moment magnétique anormal se déduisent du couplage minimal appliqué à l'électrodynamique quantique.

On vérifie également (exercice 11.5.10) que $\vec{j}$ obéit à l'équation de continuité

$$\frac{\partial |\varphi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (11.110)$$

11.4.2 Champ magnétique uniforme : niveaux de Landau

Comme application, étudions le mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique uniforme et constant. Nous ignorons les effets de spin : l'interaction d'un moment magnétique lié au spin a déjà été étudiée au § 3.2.5. Nous supposons $\vec{B}$ dirigé suivant Oz , et afin de simplifier la discussion, nous supposons également que le mouvement est confiné au plan xOy . Ce cas est d'ailleurs d'un grand intérêt pratique, car on sait réaliser des structures bidimensionnelles, avec des applications importantes comme l'effet Hall quantique²³. Le mouvement d'une particule classique sous l'action de la force

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$$

se fait alors sur un cercle²⁴ de rayon $\rho = mv/(|q|B)$ avec une fréquence $\omega = |q|B/m$, ou fréquence de Larmor (cf. (3.61)). Si $q < 0$, ce que nous supposerons pour fixer les idées, le cercle est parcouru dans le sens trigonométrique. Le mouvement est donc

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \rho \cos \omega t \\ y(t) &= y_0 + \rho \sin \omega t \end{aligned} \quad (11.111)$$

où x_0 et y_0 sont les coordonnées du centre du cercle. La projection de ce mouvement circulaire uniforme sur les axes Ox et Oy donne deux oscillateurs harmoniques, que l'on retrouvera en mécanique quantique. Un choix possible pour le potentiel vecteur est

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad (11.112)$$

et donc $A_x = -yB/2$, $A_y = xB/2$, $A_z = 0$. Ce choix n'est évidemment pas unique et un autre choix fréquent²⁵ est $A_x = A_z = 0$, $A_y = xB$. Calculons le commutateur des composantes de la vitesse

$$\begin{aligned} [\dot{X}, \dot{Y}] &= \frac{1}{m^2} \left[P_x + \frac{q}{2} YB, P_y - \frac{q}{2} XB \right] \\ &= \frac{1}{m^2} \frac{qB}{2} \left(-[P_x, X] + [Y, P_y] \right) = -\frac{i\hbar\omega}{m} I \end{aligned} \quad (11.113)$$

23. cf. Ph. Taylor et O. Heinonen, *Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2002), chapitre 10.

24. Si le mouvement est à trois dimensions, la trajectoire est une hélice qui se projette suivant un cercle de rayon ρ parcouru à la fréquence ω dans le plan xOy .

25. C'est par exemple le choix de Landau et Lifschitz[1966], § 111.

Comme l'expression de H peut s'écrire

$$H = \frac{1}{2} m \left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 \right) \quad (11.114)$$

on se ramène à (11.9) en définissant

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}} \dot{Y} \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}} \dot{X}$$

et

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) \quad (11.115)$$

Les niveaux d'énergie sont étiquetés par un entier n

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11.116)$$

Ces niveaux sont appelés *niveaux de Landau*. Par analogie avec le cas classique, on définit un opérateur R^2 qui est l'analogue du rayon carré ρ^2 de la trajectoire circulaire

$$R^2 = \frac{1}{\omega^2} \left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 \right) = \frac{2H}{m\omega^2} \quad (11.117)$$

La valeur moyenne de R^2 dans l'état $|n\rangle$ est

$$\langle R^2 \rangle_n = \frac{2}{m\omega^2} \langle n | H | n \rangle = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Si la particule est dans un état propre de H , la dispersion sur R^2 est nulle. Le flux Φ du champ magnétique à travers une orbite est quantifié en unité de $h/|q|$. En effet

$$\Phi = \pi \langle R^2 \rangle_n B = \frac{h}{|q|} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

La deuxième caractéristique du mouvement est la position du centre du cercle. Suivant (11.111) on définit les opérateurs X_0 et Y_0 par

$$X_0 = X - \frac{1}{\omega} \dot{Y} \quad Y_0 = Y + \frac{1}{\omega} \dot{X} \quad (11.118)$$

Compte tenu de $[X, \dot{X}] = [Y, \dot{Y}] = i\hbar I/m$ et de (11.113) le commutateur $[X_0, Y_0]$ vaut

$$[X_0, Y_0] = \frac{i\hbar}{m\omega} I$$

On vérifie immédiatement que

$$[X_0, \dot{X}] = [X_0, \dot{Y}] = [Y_0, \dot{X}] = [Y_0, \dot{Y}] = 0$$

et donc que $[H, X_0] = [H, Y_0] = 0$. L'opérateur R_0^2

$$R_0^2 = X_0^2 + Y_0^2 \quad (11.119)$$

commute avec R^2 : R^2 et R_0^2 sont hermitiques et simultanément diagonalisables. Posant

$$\hat{Q}_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X_0 \quad \hat{P}_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Y_0$$

conduit à

$$R_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega} (\hat{Q}_0^2 + \hat{P}_0^2)$$

et les valeurs propres r_0^2 de R_0^2 sont

$$r_0^2 = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(p + \frac{1}{2} \right) \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (11.120)$$

Nous avons retrouvé les deux oscillateurs harmoniques ; le premier donne la valeur n du niveau de Landau, c'est-à-dire le rayon de l'orbite, et le second la position du centre de l'orbite. Supposons que la particule se trouve dans le plan à l'intérieur d'un cercle de rayon r_0 et que $\rho^2 \ll r_0^2$; les valeurs de p sont alors limitées par

$$p \leq \frac{m\omega}{2\hbar} r_0^2 = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} \mathcal{S}$$

où $\mathcal{S} = \pi r_0^2$ est l'aire du cercle. La dégénérescence g d'un niveau de Landau n est donnée par le nombre de valeurs possibles de p

$$g = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} \mathcal{S} = \frac{|q|B}{2\pi\hbar} \mathcal{S} \quad (11.121)$$

Il faut multiplier ce résultat par un facteur 2 si l'on veut tenir compte du spin. En toute rigueur, il faudrait s'assurer qu'il n'y a pas de dégénérescence supplémentaire, en montrant que tout opérateur commutant avec H (ou R^2) et R_0^2 est une fonction de H et de R_0^2 : on ne peut pas trouver des grandeurs physiques supplémentaires compatibles et indépendantes. La démonstration suit le même canevas que celle donnée pour l'oscillateur harmonique simple (exercice 1.5.2).

Il n'est pas difficile de généraliser au cas d'un mouvement à trois dimensions. En effet, comme $A_z = 0$, il suffit de rajouter au hamiltonien un terme en $P_z^2/(2m)$ dont les valeurs propres sont $p_z^2/(2m)$. L'énergie totale est une fonction de n et de p_z

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (11.122)$$

Si le mouvement vertical de la particule est limité par $0 \leq z \leq L_z$, le nombre de niveaux de Landau dans $[p_z, p_z + \Delta p_z]$ est

$$g = \frac{L_z}{2\pi\hbar} \frac{|q|B}{2\pi\hbar} \mathcal{S} \Delta p_z \quad (11.123)$$

11.5 Exercices

11.5.1 Éléments de matrice de Q et de P

1. Calculer les éléments de matrice $\langle n|Q|m\rangle$ et $\langle n|P|m\rangle$ des opérateurs Q et P dans la base $|n\rangle$.
2. Calculer la valeur moyenne $\langle n|Q^4|n\rangle$ de Q^4 dans l'état $|n\rangle$. Suggestion : calculer

$$|\varphi_n\rangle = (a + a^\dagger)^2 |n\rangle$$

et $||\varphi_n||^2$.

11.5.2 Propriétés mathématiques

1. Montrer les relations de commutation

$$[N, a^p] = -pa^p \quad \text{et} \quad [N, a^{\dagger p}] = pa^{\dagger p}$$

En déduire que les seules fonctions de a et de $a^\dagger$ qui commutent avec N sont des fonctions de N , et que les valeurs propres de N sont non dégénérées.

2. Soit $\mathcal{H}'$ le sous-espace de $\mathcal{H}$ sous-tendu par les vecteurs $|n\rangle$ et $\mathcal{H}'_\perp$ l'espace orthogonal : $\mathcal{H} = \mathcal{H}' \oplus \mathcal{H}'_\perp$. On appelle $\mathcal{P}'$ le projecteur sur $\mathcal{H}'$. Montrer que $\mathcal{P}'$ commute avec a et $a^\dagger$ et en déduire, en utilisant le théorème de von Neumann du § 8.3.2, que soit $\mathcal{P}' = 0$, soit $\mathcal{P}' = I$. La première possibilité étant exclue, $\mathcal{P}' = I$ et les vecteurs $|n\rangle$ forment une base de $\mathcal{H}$.

11.5.3 États cohérents

1. Calculer $\langle z|P^2|z\rangle$ et $\langle z|H^2|z\rangle$ et en déduire les dispersions (11.39).
2. On se propose de rechercher les états $|\varphi(t)\rangle$ tels que les valeurs moyennes de a et de H aient des propriétés identiques aux propriétés classiques. En premier lieu, si $\langle a\rangle(t) = \langle \varphi(t)|a|\varphi(t)\rangle$, montrer que

$$i \frac{d}{dt} \langle a\rangle(t) = \hbar\omega \langle a\rangle(t)$$

et $\langle a\rangle(t)$ vérifie donc la même équation différentielle (11.29) que $z(t)$. On définit le nombre complexe z_0 par

$$z_0 = \langle a\rangle(t=0) = \langle \varphi(0)|a|\varphi(0)\rangle$$

et on aura donc comme solution de l'équation différentielle pour $\langle a\rangle(t)$

$$\langle a\rangle(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

3. La deuxième condition concerne la valeur moyenne du hamiltonien. On exige, en suivant (11.30) et en ajoutant l'énergie de point zéro

$$\langle \varphi(0) | H | \varphi(0) \rangle = \hbar\omega \left(|z_0|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

ou, de façon équivalente

$$\langle a^\dagger a \rangle = \langle \varphi(0) | a^\dagger a | \varphi(0) \rangle = |z_0|^2$$

Soit l'opérateur $b(z_0) = a - z_0$. Montrer que

$$\langle \varphi(0) | b^\dagger(z_0) b(z_0) | \varphi(0) \rangle = 0$$

et en déduire

$$a | \varphi(0) \rangle = z_0 | \varphi(0) \rangle$$

L'état $|\varphi(0)\rangle$ est donc l'état cohérent $|z_0\rangle$.

4. Soit $D(z)$ l'opérateur unitaire (le vérifier !)

$$D(z) = \exp(-z^* a + z a^\dagger)$$

En utilisant (2.55), montrer que

$$D(z) = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \exp(z a^\dagger) \exp(-z^* a) \quad D(z)|0\rangle = |z\rangle$$

5. *Fonction d'onde d'un état cohérent.* Exprimer $D(z)$ en fonction des opérateurs P et Q et calculer la fonction d'onde $\psi_z(q) = \langle q | z \rangle$. Suggestion : écrire $D(z)$ sous la forme

$$D(z) = f(z, z^*) \exp[c(z - z^*)Q] \exp[ic'(z + z^*)P]$$

déterminer les constantes c et c' et utiliser le fait que P est le générateur infinitésimal des translations (cf. § 9.1.1)

$$\exp\left(-i\frac{Pl}{\hbar}\right)|q\rangle = |q+l\rangle$$

Exprimer $\psi_z(q)$ en fonction de la fonction d'onde $\varphi_0(q)$ (11.23) de l'état fondamental.

6. Montrer qu'un opérateur A est entièrement déterminé par ses « éléments diagonaux » $\langle z | A | z \rangle$. Suggestion : utiliser

$$\langle z | A | z \rangle = e^{-|z|^2} \sum_{n,m} A_{nm} z^n z^{*m}$$

11.5.4 Couplage à une force classique

Les états cohérents permettent de traiter simplement la version quantique de l'oscillateur harmonique forcé. En mécanique classique élémentaire, l'action d'une force externe $F(t)$ sur un oscillateur harmonique

$$m\ddot{q}(t) = -m\omega^2 q + F(t)$$

se traduit dans le hamiltonien par un couplage $-qF(t)$ entre l'élongation q et la force $F(t)$. Dans la version quantique, au hamiltonien de l'oscillateur harmonique simple (11.9) s'ajoute un terme de couplage entre l'élongation Q et la force externe

$$W(t) = -Q \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} f(t) \quad (11.124)$$

où le facteur multiplicatif de $f(t)$ est choisi de façon à simplifier des formules ultérieures. Dans cette expression, Q est un opérateur, mais $f(t)$ est un nombre, ayant avec notre définition (11.124) la dimension d'une énergie, que l'on appelle conventionnellement *force classique* ou aussi *source classique*. Nous noterons H_0 le hamiltonien (11.9) de l'oscillateur harmonique simple et $H(t)$ le hamiltonien total

$$H(t) = H_0 + W(t) \quad (11.125)$$

1. Le problème est très semblable à celui rencontré au § 9.6.3 (cf. (9.156)), et nous pourrions tenter de le traiter par une méthode de perturbations. Cependant, il se trouve que l'on peut calculer exactement l'évolution temporelle définie par (11.125). Montrer que

$$H(t) = H_0 - (a + a^\dagger) f(t)$$

Réécrivons l'opérateur d'évolution $U(t) = U(t, t_0 = 0)$ (4.14) sous la forme

$$U(t) = U_0(t)U_I(t)$$

où $U_0(t) = \exp[-iH_0 t/\hbar]$. Afin de simplifier les notations, nous avons choisi le temps de référence $t_0 = 0$ et nous écrivons $U(t)$ au lieu de $U(t, 0)$. Montrer que $U_I(t)$ vérifie l'équation différentielle

$$i\hbar \frac{dU_I}{dt} = U_0^{-1} W(t) U_0 U_I = W_I(t) U_I \quad (11.126)$$

L'opérateur $W_I(t)$

$$W_I(t) = U_0^{-1} W(t) U_0 = e^{iH_0 t/\hbar} W(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (11.127)$$

est la perturbation dans le *point de vue de Dirac* ou *point de vue interaction*, d'où l'indice I ; ce point de vue est intermédiaire entre celui de Schrödinger et celui de Heisenberg (cf. § 4.2.5). Les résultats (11.126) et (11.127) sont

tout à fait généraux et ne dépendent pas de la forme spécifique de H_0 et de $W(t)$. En fait nous avons reformulé dans un langage opératoire la méthode suivie au § 9.6.3.

2. Montrer que l'opérateur a dans le point de vue interaction est donné par

$$a_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} a e^{-iH_0 t/\hbar} = a e^{-i\omega t}$$

étant donné que $f(t)$ est un nombre, et non un opérateur. Suggestion : cf. (11.67). En déduire l'équation différentielle pour $U_I(t)$

$$i\hbar \frac{dU_I}{dt} = - (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}) f(t) U_I(t) = W_I(t) U_I(t) \quad U_I(0) = I \quad (11.128)$$

Nous avons déjà remarqué en (4.19) que (11.126) ne s'intègre pas simplement en

$$U_I(t) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t W_I(t') dt' \right)$$

parce qu'en général le commutateur $[W_I(t'), W_I(t'')] \neq 0$. Dans le cas présent, ce commutateur n'est pas nul, mais c'est un multiple de l'identité, ce qui va permettre d'intégrer (11.128). Déduire de l'identité (2.55) de l'exercice 2.4.11 valable si $[A_i, A_j] = c_{ij} I$

$$e^{A_n} e^{A_{n-1}} \dots e^{A_1} = e^{A_n + \dots + A_1} e^{\frac{1}{2} \sum_{j>i} [A_j, A_i]}$$

3. Divisant l'intervalle $[0, t]$ en n intervalles infinitésimaux Δt et partant de

$$U_I(t) \simeq \prod_{j=1}^n \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} W_I(t_j) \Delta t \right) \right]$$

déduire

$$U_I(t) \simeq \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{j=1}^n W_I(t_j) \right) \exp \left(-\frac{(\Delta t)^2}{2\hbar^2} \sum_{t_j > t_i} [W_I(t_j), W_I(t_i)] \right)$$

Que vaut le commutateur $[W_I(t'), W_I(t'')] ?$ Montrer que l'on obtient $U_I(t)$ en passant à la limite $\Delta t \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \Delta t \sum_{j=1}^n W_I(t_j) &\rightarrow \int_0^t dt' W_I(t') = - \int_0^t dt' (a e^{-i\omega t'} + a^\dagger e^{i\omega t'}) f(t') \\ &= -\hbar a z^*(t) - \hbar a^\dagger z(t) \end{aligned}$$

où le nombre complexe $z(t)$ est défini par

$$z(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega t'} f(t')$$

4. Évaluer la limite $\Delta t \rightarrow 0$ de

$$(\Delta t)^2 \sum_{t_j > t_i} [W_I(t_j), W_I(t_i)]$$

et montrer que

$$U_I(t) = \exp \left[i \left(a z^*(t) + a^\dagger z(t) \right) \right] \exp \left[-\frac{X}{2\hbar^2} \right]$$

$$X = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{-i\omega(t'-t'')} f(t') f(t'') \varepsilon(t' - t'')$$

où $\varepsilon(t)$ est la fonction signe : $\varepsilon(t) = 1$ si $t > 0$, $\varepsilon(t) = -1$ si $t < 0$.

5. On peut récrire ce résultat sous une forme plus commode. Montrer que

$$\exp \left[i \left(a z^*(t) + a^\dagger z(t) \right) \right] = \exp \left[i a^\dagger z(t) \right] \exp \left[i a z^*(t) \right] \exp \left[-\frac{1}{2} z(t) z^*(t) \right]$$

et en déduire, en remarquant que $2\theta(t) - \varepsilon(t) = 1$, où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside

$$U_I(t) = e^{i a^\dagger z(t)} e^{i a z^*(t)} e^{-Y/\hbar^2} \quad (11.129)$$

$$Y = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{-i\omega(t'-t'')} f(t') f(t'') \theta(t' - t'') \quad (11.130)$$

Vérifier par un calcul explicite que (11.129)–(11.130) obéit bien à l'équation différentielle de départ (11.128).

6. On examine le cas où l'état initial à $t = 0$ est un état propre $|n\rangle$ de H_0 en supposant que la force agit seulement pendant un intervalle de temps fini $[t_1, t_2]$, et en choisissant d'observer l'oscillateur à un temps $t > t_2$: $0 < t_1 < t_2 < t$. Définissant la transformée de Fourier $\tilde{f}(\omega)$ de $f(t)/\hbar$

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega t'} f(t') = \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt' e^{i\omega t'} f(t')$$

et utilisant la représentation de Fourier de la fonction θ

$$\theta(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2i\pi} \frac{e^{itE}}{E - i\eta} \quad \text{et} \quad \frac{1}{E - i\eta} = \mathbf{P} \frac{1}{E} + i\pi\delta(E) \quad (11.131)$$

où $\mathbf{P}$ désigne une partie principale, montrer que Y est donné par

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} Y &= \mathbf{P} \int \frac{dE}{2i\pi E} |\tilde{f}(E - \omega)|^2 + \frac{1}{2} |\tilde{f}(\omega)|^2 \\ &= i\phi + \frac{1}{2} |\tilde{f}(\omega)|^2 \end{aligned}$$

7. Montrer que le résultat final pour $U_I(t)$ est indépendant de t pour $t > t_2$

$$U_I(t) = \exp\left(ia^\dagger \tilde{f}(\omega)\right) \exp\left(ia\tilde{f}^*(\omega)\right) \exp(-i\phi) \exp\left(-\frac{1}{2}|\tilde{f}(\omega)|^2\right) \quad (11.132)$$

Montrer que si l'oscillateur est dans son état fondamental au temps $t = 0$, le vecteur d'état final est un état cohérent

$$U_I(t)|0\rangle = e^{-i\phi} |i\tilde{f}(\omega)\rangle \quad (11.133)$$

Montrer que la probabilité d'observer un état final $|m\rangle$ est donnée par une loi de Poisson (11.34)

$$p(m) = \frac{\left(|\tilde{f}(\omega)|^2\right)^m \exp\left(-|\tilde{f}(\omega)|^2\right)}{m!} \quad (11.134)$$

8. Généraliser les résultats précédents au couplage (11.88) d'un champ électromagnétique quantifié à une source classique $\vec{j}_{\text{em}}(\vec{r}, t)$ en écrivant la perturbation sous la forme (voir la note 17)

$$W(t) = - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{A}_{\vec{k}} \cdot \vec{j}_{\text{em}}(\vec{k}, t)$$

11.5.5 États comprimés

En remplaçant a et $a^\dagger$ par leur expression (11.100) en fonction de b et $b^\dagger$, calculer

$$\langle \tilde{z} | (a + a^\dagger) | \tilde{z} \rangle = \tilde{z}(\lambda^* - \mu^*) + \tilde{z}^*(\lambda - \mu)$$

et

$$\langle \tilde{z} | (a + a^\dagger)^2 | \tilde{z} \rangle = \langle \tilde{z} | (a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + I) | \tilde{z} \rangle$$

En déduire

$$(\Delta_{\tilde{z}} Q)^2 = \frac{1}{4} (1 + 2|\mu|^2 - \lambda^* \mu - \lambda \mu^*) = \frac{1}{4} |\lambda - \mu|^2$$

Calculer également $\Delta_{\tilde{z}} P$. En écrivant

$$\lambda = \text{ch } \theta \quad \mu = \text{sh } \theta e^{i\phi}$$

montrer que

$$|\lambda - \mu|^2 |\lambda + \mu|^2 = \text{ch}^4 \theta - 2 \text{ch}^2 \theta \cos 2\phi + \text{sh}^4 \theta$$

et en déduire

$$\Delta_{\tilde{z}} Q \Delta_{\tilde{z}} P = \frac{1}{4}$$

si $\phi = 0$ ou $\phi = \pi$.

11.5.6 Énergie de point zéro du modèle de Debye

1. Dans le modèle de Debye, on suppose que la loi de dispersion $\omega(k) = c_s|k|$ est valable pour tout $k \leq k_D$. En utilisant

$$\frac{L}{2\pi} dk = \frac{L}{2\pi c_s} d\omega$$

montrer que $0 \leq \omega \leq \omega_D$, avec $\omega_D = c_s k_D = 2\pi c_s/l$: ω_D est appelé *fréquence de Debye*. En déduire l'énergie de point zéro

$$E_0 = \frac{1}{4} N \hbar \omega_D$$

2. Généraliser à trois dimensions et montrer que dans ce cas

$$E_0 = \frac{9}{8} N \hbar \omega_D$$

11.5.7 Potentiels scalaire et vecteur en jauge de Coulomb

On écrit formellement la relation (11.76) donnant le potentiel de Coulomb instantané

$$\bar{V} = -\frac{1}{\varepsilon_0} (\nabla^2)^{-1} \rho_{\text{em}}$$

qui est la relation inverse de $\nabla^2 \bar{V} = -\rho_{\text{em}}/\varepsilon_0$. Utiliser la seconde équation de Maxwell (11.71) sous la forme

$$c^2 \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \bar{V} \right) + \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}_{\text{em}}$$

pour montrer que $\vec{A}$ vérifie

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \vec{j}_{\text{em}}^T$$

où le « courant électromagnétique transverse » $\vec{j}_{\text{em}}^T$ vaut

$$\vec{j}_{\text{em}}^T = \vec{j}_{\text{em}} - \vec{\nabla} \cdot [(\nabla^2)^{-1} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{\text{em}})]$$

11.5.8 Relations de commutation et hamiltonien du champ électromagnétique

1. En se plaçant à $t = 0$, évaluer le commutateur (11.85)

$$[A_i(\vec{r}), -\varepsilon_0 E_j(\vec{r}')] = i\hbar \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j \right) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}$$

Montrer que ces relations sont aussi valables pour le commutateur à temps égaux

$$[A_{Hi}(\vec{r}, t), -\varepsilon_0 E_{Hj}(\vec{r}', t)]$$

2. En déduire les relations de commutation entre E_{Hi} et B_{Hj} .

3. Exprimer le hamiltonien (11.78) où $\vec{E} \rightarrow \vec{E}$ et $\vec{B} \rightarrow \vec{B}$ en fonction des opérateurs $a_{\vec{k}s}$ et $a_{\vec{k}s}^\dagger$ à $t = 0$. Suggestion : écrire pour une polarisation s

$$\begin{aligned} \vec{E}_s &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\omega_k} \left(a_{\vec{k}s} \vec{e}_s - a_{-\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^* \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &= \sum_{\vec{k}} \vec{E}_{\vec{k}s} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \end{aligned}$$

et utiliser la relation de Parseval

$$\int d^3r \vec{E}_s^2 = \mathcal{V} \sum_{\vec{k}} \vec{E}_{\vec{k}s} \cdot \vec{E}_{-\vec{k}s}$$

Procéder de même pour $\vec{B}$ en remarquant que

$$(\vec{e}_s \times \hat{k}) \cdot (\vec{e}_s \times \hat{k}) = 1$$

11.5.9 Quantification dans une cavité

1. On considère le champ scalaire classique $\varphi(\vec{r}, t)$ du § 11.3.2 dans le cas à trois dimensions, et on suppose que ce champ est enfermé dans une cavité. Soit ω_j une fréquence propre de la cavité et

$$\varphi_j(\vec{r}, t) = \varphi_j(\vec{r}) \cos(\omega t - \phi)$$

le champ correspondant, qui obéit à l'équation d'onde (11.59) avec des conditions aux limites appropriées, par exemple d'annulation sur les parois de la cavité : $\varphi_j(\vec{r}) = 0$ sur les parois. Les fonctions propres $\varphi_j(\vec{r})$ sont supposées réelles et forment un système orthogonal complet

$$\int d^3r \varphi_j(\vec{r}) \varphi_k(\vec{r}) = \delta_{jk} \quad \sum_j \varphi_j(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Montrer que le champ quantifié dans le point de vue de Heisenberg

$$\Phi_H(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu}} \sum_j \sqrt{\frac{1}{\omega_j}} \left(a_j e^{-i\omega t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right) \varphi_j(\vec{r}) \quad (11.135)$$

vérifie les relations de commutation à temps égaux

$$[\Phi_H(\vec{r}, t), \Pi_H(\vec{r}', t)] = [\Phi_H(\vec{r}, t), \mu \dot{\Phi}_H(\vec{r}', t)] = i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') I$$

si les opérateurs a_j et $a_j^\dagger$ obéissent aux relations de commutation $[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}I$.

2. Application à la dimension $d = 1$. Le champ est contenu dans l'intervalle $[0, L]$, avec les conditions aux limites d'annulation $\varphi(x=0) = \varphi(x=L) = 0$. Montrer que dans ce cas les modes propres sont étiquetés par un vecteur d'onde k

$$\varphi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin kx \quad k = \frac{\pi j}{L} \quad j = 1, 2, \dots$$

Vérifier les relations d'orthogonalisation et de fermeture

$$\frac{2}{L} \int_0^L dx \sin kx \sin k'x = \delta_{kk'} \quad \frac{2}{L} \sum_k \sin kx \sin kx' = \delta(x - x')$$

En déduire l'expression de $\Phi_H(x, t)$.

3. Champ électromagnétique. On se place dans une géométrie à trois dimensions en supposant le champ enfermé dans une cavité parallélépipédique de côtés L_x, L_y, L_z , de volume $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$. Montrer que l'on a au lieu de (11.82)

$$\begin{aligned} \vec{E}_H(\vec{r}, t) = & i\sqrt{\frac{4\hbar}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\omega_k} \left[a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k}) e^{-i\omega_k t} - a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\hat{k}) e^{i\omega_k t} \right] \sin(xk_x) \sin(yk_y) \sin(zk_z) \end{aligned} \quad (11.136)$$

avec

$$\vec{k} = \left(\frac{\pi}{L_x} n_x, \frac{\pi}{L_y} n_y, \frac{\pi}{L_z} n_z \right) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots$$

11.5.10 Conservation du courant en présence d'un champ magnétique

En utilisant l'équation de Schrödinger dans un champ magnétique, montrer que le courant $\vec{j}$ (11.107) obéit à l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

11.5.11 Transformations de jauge non abéliennes

Les interactions fondamentales sont toutes fondées sur les théories de jauge non abéliennes, que nous allons définir dans un cas élémentaire en généralisant la transformation de jauge (11.104). En omettant la dépendance par rapport au temps afin de simplifier la discussion, nous allons supposer que la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ est un vecteur à deux composantes $\Phi(\vec{r}) = [\varphi_1(\vec{r}), \varphi_2(\vec{r})]$ dans un

espace de Hilbert complexe à deux dimensions, et qu'il existe dans cet espace une opération de symétrie, dite de *symétrie interne*, qui laisse la physique invariante,

$$\Phi(\vec{r}) \rightarrow \Phi'(\vec{r}) = \Omega \Phi \quad \text{ou} \quad \varphi'_\alpha = \sum_{\beta=1}^2 \Omega_{\alpha\beta} \varphi_\beta$$

généralisant (11.103). Ω est une matrice 2×2 unitaire et de déterminant unité, ou en d'autres termes une matrice du groupe $SU(2)$. La symétrie est appelée *symétrie de jauge* et le groupe $SU(2)$ est le *groupe de jauge*. En général le groupe de jauge est un groupe de Lie compact. Le groupe de jauge de l'électromagnétisme est le groupe des transformations de phase (11.103), noté $U(1)$, qui est abélien : l'électromagnétisme est une théorie de jauge abélienne. Lorsque le groupe de jauge est non abélien, la théorie de jauge sera dite non abélienne. Les groupes de jauge du modèle standard de la physique des particules élémentaires sont le groupe produit $SU(2) \times U(1)$ pour les interactions électrofaibles et $SU(3)$ pour la chromodynamique quantique, qui sont des groupes non abéliens.

Suivant les résultats de l'exercice 3.3.6, la matrice Ω peut s'écrire en fonction des matrices de Pauli

$$\Omega = \exp \left(-i \frac{q}{2} \sum_{a=1}^3 \Lambda_a \sigma_a \right)$$

Lorsque les fonctions Λ_a sont indépendantes de $\vec{r}$, on a affaire à une symétrie de jauge *globale*, et si les Λ_a sont fonction de $\vec{r}$, à une symétrie de jauge *locale*. Afin d'alléger les notations, on se placera dans un système d'unités où $\hbar = m = 1$.

1. L'analogue du potentiel vecteur de l'électromagnétisme est un champ vectoriel de composantes $\vec{A}_a$ dans l'espace de symétrie interne. On définit la matrice $\vec{\mathbf{A}}$ par

$$\vec{\mathbf{A}} = \sum_{a=1}^3 \vec{A}_a \sigma_a$$

$\vec{\mathbf{A}}$ possède à la fois des composantes ordinaires $i = (x, y, z)$ et des composantes a dans l'espace de symétrie interne : $\vec{\mathbf{A}} = \{A_{ia}\}$. L'expression du courant $\vec{j}$ généralise (11.113)

$$\vec{j} = \text{Re} \left[\Phi^\dagger (-i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}}) \Phi \right] = \text{Re} \left[\Phi^\dagger (-i\vec{\mathbf{D}}) \Phi \right]$$

où

$$\vec{\mathbf{D}} = -i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}}$$

est la dérivée covariante. Montrer que la transformation de jauge $\Phi \rightarrow \Phi'$ laisse $\vec{j}$ invariant si cette transformation de jauge est globale à condition de transformer aussi $\vec{\mathbf{A}}$ en $\vec{\mathbf{A}}'$

$$\vec{\mathbf{A}}' = \Omega \vec{\mathbf{A}} \Omega^{-1}$$

Si la transformation de jauge est locale, montrer que l'invariance du courant

$$\vec{j} = \vec{j}' = \text{Re} \left[\Phi'^{\dagger} (-i\vec{\nabla} - q\vec{A}') \Phi' \right]$$

implique la loi de transformation $\vec{A} \rightarrow \vec{A}'$

$$\vec{A}' = \Omega \vec{A} \Omega^{-1} - \frac{i}{q} (\vec{\nabla} \Omega) \Omega^{-1}$$

Retrouver la loi de transformation (11.74) dans le cas abélien.

2. On choisit une transformation de jauge infinitésimale : $|q\Lambda_a(\vec{r})| \ll 1$. En déduire la loi de transformation de $\vec{A}_a$

$$\delta \vec{A}_a = \vec{A}'_a - \vec{A}_a = -\vec{\nabla} \Lambda_a - q \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \Lambda_b \vec{A}_c$$

La différence (cruciale !) avec le cas abélien est que le *champ de jauge* $\vec{A}_a$ dépend de façon non triviale de l'indice de symétrie interne a du groupe de jauge²⁶. En électromagnétisme les photons ne transportent pas de charge, mais les bosons de jauge d'une théorie non abélienne sont « chargés » : ils transportent les nombres quantiques de la symétrie interne.

3. Montrer que si Φ obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{1}{2} \left(-i\nabla - q\vec{A} \right)^2 \Phi = \frac{1}{2} (-i\hbar\vec{D})^2 \Phi = E\Phi$$

il en est alors de même pour Φ' à condition d'utiliser le champ $\vec{A}'$.

11.5.12 Effet Casimir

En raison des fluctuations quantiques du champ électromagnétique, il existe une force attractive entre deux plaques conductrices parallèles distantes de L , même si ces deux plaques sont disposées dans le vide et sont électriquement neutres : c'est *l'effet Casimir*²⁷. On suppose que les dimensions des plaques sont très grandes par rapport à L .

1. Par un argument dimensionnel, montrer que la force P sur une plaque par unité de surface est de la forme

$$P = A \frac{\hbar c}{L^4}$$

26. Comme le champ $\vec{A}$ est un champ vectoriel, les particules associées sont, comme le photon, des particules de spin 1, appelées *bosons de jauge* : bosons Z^0 et $W^{\pm}$ pour les interactions électro-faibles, gluons pour la chromodynamique.

27. Cet exercice est adapté d'une présentation de B. Duplantier, Séminaire H. Poincaré, mars 2002.

où A est un coefficient numérique. La surprise est que $A \neq 0$!

2. Les deux plaques sont des rectangles parallèles au plan xOy distants de L , de côtés L_x et L_y , de surface $S = L_x L_y$ avec $L_x, L_y \gg L$. On choisira des conditions périodiques suivant les axes Ox et Oy et on définira le vecteur d'onde $\vec{k}$ de xOy par

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

où n_x et n_y sont des entiers strictement ≥ 1 . Montrer que si les plaques sont des conducteurs parfaits, les valeurs possibles des fréquences des ondes stationnaires sont de la forme

$$\omega_n(\vec{k}) = c \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + \vec{k}^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

On rappelle que pour un conducteur parfait la composante transverse du champ électrique s'annule à la surface du métal²⁸. Expliquer pourquoi pour $n = 0$ il n'existe qu'un seul mode de polarisation possible.

3. Montrer que l'énergie de point zéro (11.87) est

$$E_0(L) = \frac{\hbar}{2} \left(2 \sum'_{n, \vec{k}} \omega_n(\vec{k}) \right)$$

où

$$\sum'_{n, \vec{k}} = \frac{1}{2} \sum_{n=0, \vec{k}} + \sum_{n \geq 1, \vec{k}}$$

4. On doit tenir compte de ce que le conducteur n'est jamais parfait : l'approximation du conducteur parfait est excellente à basse fréquence, mais à haute fréquence tout conducteur réel devient transparent. On doit donc modifier l'énergie de point zéro en tenant compte d'un facteur de coupure $\chi(\omega/\omega_c)$, $\chi(0) = 1$ et $\lim_{u \rightarrow \infty} \chi(u) = 0$: $\chi(u)$ est une fonction régulière, décroissante de la valeur un à $u = 0$ à la valeur zéro pour $u \rightarrow \infty$. En déduire

$$\begin{aligned} E_0(L) &= \frac{\hbar S}{(2\pi)^2} \sum'_{n=0} \int d^2 k \omega_n(\vec{k}) \chi \left(\frac{\omega_n(\vec{k})}{\omega_c} \right) \\ &= \frac{\hbar}{\pi c^2} \sum'_{n=0} \int_{\omega_n}^{\infty} d\omega \omega^2 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right) \quad \omega_n = \frac{\pi c n}{L} \end{aligned}$$

Grâce au facteur de coupure, cette énergie est finie.

5. Calculer la pression exercée sur la plaque de droite

$$P_{\text{int}} = -\frac{1}{S} \frac{dE_0}{dL} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \sum'_{n} g(n)$$

28. Voir par exemple Jackson[2001], section 8.1.

où

$$g(n) = n^3 \chi \left(\frac{\omega_n}{\omega_c} \right)$$

Pour obtenir la pression totale sur cette plaque, il faut retrancher la pression en sens contraire exercée par le vide à l'extérieur de l'espace entre les deux plaques. Calculer l'énergie correspondante et en déduire la pression

$$P_{\text{ext}} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \int_0^\infty dn g(n)$$

La pression totale sur la plaque est $P_{\text{tot}} = P_{\text{int}} - P_{\text{ext}}$. Utiliser la formule d'Euler-Mac Laurin

$$\sum_{n=0}^{\infty} g(n) - \int_0^\infty g(n) dn = -\frac{1}{12} g'(0) + \frac{1}{6!} g'''(0) + \dots$$

pour montrer que le résultat à la limite où le facteur de coupure devient égal à un est

$$P_{\text{tot}} = -\frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{L^4}$$

Cette pression est attractive, et surtout elle est finie ! En tenant compte soigneusement de tous les effets physiques, nous avons déduit d'une quantité *a priori* infinie, l'énergie de point zéro, une *quantité finie et mesurable*²⁹.

11.6 Bibliographie

La diagonalisation du hamiltonien de l'oscillateur harmonique à une dimension par une méthode algébrique est classique et se trouve dans tous les manuels de mécanique quantique. La théorie des états cohérents est développée par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément G_V. Les applications des phonons à la thermodynamique se trouvent par exemple dans Diu *et al.* [1990], chapitre 4, ou Le Bellac et Mortessagne [2001], chapitre 4. Pour des compléments sur la quantification du champ scalaire et celle du champ électromagnétique, on pourra se reporter à C. Itzykson et J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory*, Mc Graw Hill, New-York (1980), chapitre 3, Le Bellac [1988], chapitre 9, Grynberg *et al.* [1997], chapitre V ou Weinberg [1995], chapitre 8. Les fluctuations du champ électromagnétique et les états comprimés sont traitées par Grynberg *et al.* chapitre V et complément V.1, par Mandel et Wolf, chapitres 10, 11 et 12, ou par A. Laverne, *Rayonnement quantique*, chapitre V, disponible sur le WEB de l'Université de Paris VII. Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 21,

29. Une référence récente est U. Mohiden et A. Roy, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4549 (1998). La précision des mesures de l'effet Casimir est actuellement de l'ordre de 1 %, et les mesures confirment la validité de la formule théorique.

donnent une discussion physique de la différence entre la vitesse et $\vec{p}/m$ en présence d'un champ électromagnétique. Les niveaux de Landau sont traités dans Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément E_{VI} et les applications à la physique du solide par K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley, New-York (1963), chapitre 11.

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Chapitre 12

Théorie élémentaire de la diffusion

JUSQU'À PRÉSENT, nous avons étudié principalement les états liés, et les états de diffusion n'ont été examinés que dans le cas à une dimension (section 9.4). Cependant des informations essentielles sur les interactions entre particules, atomes, molécules, etc., ainsi que sur la structure des objets composés, peuvent être obtenues par des expériences de diffusion¹ (ou de collision). Les états liés ne donnent que des informations partielles sur ces interactions — et parfois ils n'existent même pas —, tandis qu'il est pratiquement toujours possible de réaliser des expériences de collision. Nous allons nous limiter dans ce chapitre à la diffusion par un potentiel, qui permet de décrire les collisions élastiques de deux particules de masses m_1 et m_2 . En effet, en se plaçant dans le référentiel du centre de masse², on se ramène au cas d'une particule de masse $m = (m_1 m_2)/(m_1 + m_2)$ dans un potentiel (exercice 8.5.6).

Les sections 12.1 et 12.2 développent le formalisme élémentaire de la théorie de la diffusion élastique, en mettant l'accent sur la limite de basse énergie, qui joue un rôle très important en pratique. La section 12.3 généralise le formalisme au cas inélastique, ou plus exactement décrit la répercussion des voies inélastiques sur la diffusion élastique. Enfin la section 12.4 est consacrée à des développements plus formels.

1. La terminologie française prête à confusion : diffusion a deux significations, soit collision d'une particule sur une autre, soit mouvement régi par une équation de diffusion, souvent relié à une marche aléatoire. Cette ambiguïté n'existe pas en anglais : collision est traduit par « scattering » et diffusion par « diffusion ».

2. Dans les anneaux de collision comme le LEP (Large Electron-Positron), anneau de collision $e^+ - e^-$ mis en service au CERN en 1990 et fermé en 2000, le référentiel du centre de masse est identique à celui du laboratoire.

12.1 Section efficace et amplitude de diffusion

12.1.1 Sections efficaces différentielle et totale

Le schéma d'une expérience de diffusion est donné dans la figure 12.1. Un faisceau de particules de masse m_1 et d'impulsion bien définie dirigée suivant l'axe Oz entre en collision avec une cible de particules de masse m_2 . Pour simplifier la discussion, on supposera $m_1 \ll m_2$, et on négligera le recul de la cible dans la collision. Dans le cas général, il faut passer du référentiel du laboratoire au référentiel du centre de masse par une transformation cinématique simple (exercice 8.5.6). Une fraction des particules incidentes est déviée par la collision avec la cible et les particules qui ont subi une collision sont enregistrées par des détecteurs placés dans une direction d'angles polaires (θ, ϕ) , appelés *angles de diffusion*, notés collectivement Ω . Soit ΔS la surface d'un détecteur placé à une distance r de la cible. Ce détecteur est vu de la cible sous un angle solide $\Delta\Omega \simeq \Delta S/r^2$. On suppose que la densité n_c de particules cibles est suffisamment faible pour que les collisions multiples puissent être négligées. Dans ces conditions, le nombre $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ de particules ayant subi une collision et enregistrées par le détecteur est proportionnel, par unité de temps et par unité de volume de la cible,

- au flux $\mathcal{F}$ de particules incidentes, c'est-à-dire au nombre de particules traversant une surface unité perpendiculaire à Oz par unité de temps : $\mathcal{F} = n_i v$, où n_i est la densité de particules incidentes et v leur vitesse ;
- à la densité n_c de particules cibles ;

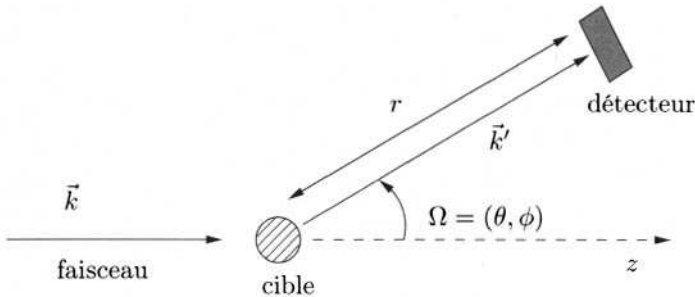


FIG. 12.1 – Schéma d'une expérience de diffusion.

- à l'angle solide $\Delta\Omega$ sous lequel est vu le détecteur depuis la cible (figure 12.1). Par la suite nous supposons cet angle solide infinitésimal : $\Delta\Omega \rightarrow d\Omega$.

Nous avons donc

$$d\mathcal{N}(\Omega) = \mathcal{F} n_c \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (12.1)$$

Le facteur de proportionnalité, $d\sigma/d\Omega$, est appelé *section efficace différentielle de diffusion*, ou *section efficace différentielle de collision*. L'analyse dimensionnelle montre que $d\sigma/d\Omega$ a les dimensions d'une surface et se mesure en $\text{m}^2/\text{stéradian}$. En intégrant sur Ω , on obtient la *section efficace totale* σ_{tot}

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (12.2)$$

Le produit $\mathcal{F}n_c\sigma_{\text{tot}}$ est égal au nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience pour une cible de volume unité. La section efficace totale est *a priori* une fonction de la vitesse v de la particule incidente, ou de façon équivalente de son énergie. La section efficace différentielle est une fonction de l'énergie et des angles θ et ϕ . Lorsque le problème physique est invariant par rotation³ autour de l'axe Oz la section efficace différentielle ne dépend que de θ .

Donnons une illustration intuitive de la notion de section efficace en examinant en mécanique classique la collision de deux boules de billard de rayons R_1 et R_2 . Supposons d'abord que les particules incidentes (ici les boules de billard) ont un rayon R et que les particules cibles sont ponctuelles. En une seconde, une particule incidente balaie un volume $\pi R^2 v$, et elle rencontre donc $n_c \pi R^2 v$ particules cibles. Le nombre de collisions enregistrées par seconde dans l'expérience est $n_i n_c \pi R^2 v = \mathcal{F} n_c \pi R^2$, d'où la section efficace totale $\sigma_{\text{tot}} = \pi R^2$. C'est géométriquement la surface d'un disque de rayon R . Cette section efficace est aussi celle de la diffusion de particules ponctuelles par des cibles de rayon R , et dans ce cas l'origine géométrique de πR^2 est claire : c'est l'aire que présente la cible à une particule incidente. La section efficace totale lorsque les particules incidentes ont un rayon R_1 et les particules cibles un rayon R_2 se déduit du résultat précédent : le nombre de collisions est le même que si les particules incidentes étaient ponctuelles et les particules cibles avaient un rayon $(R_1 + R_2)$. La section efficace totale est donc

$$\sigma_{\text{tot}} = \pi(R_1 + R_2)^2 \quad (12.3)$$

La section efficace différentielle s'obtient aisément dans le cas de particules incidentes ponctuelles (figure 12.2) arrivant sur des cibles de rayon R . Le *paramètre d'impact* b de la collision est la plus petite distance entre la trajectoire incidente en l'absence de collision et le centre de la cible. La figure 12.2 montre que le paramètre d'impact et l'angle de diffusion θ sont reliés par

$$b = R \cos \frac{\theta}{2}$$

tandis que

$$d\sigma = 2\pi b db = \pi R^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = \frac{1}{2} \pi R^2 d(\cos \theta)$$

3. Cette invariance n'est pas valable par exemple si le potentiel n'est pas invariant par rotation ou si les particules cibles ont un spin polarisé suivant un axe perpendiculaire à Oz avec une diffusion dépendant du spin.

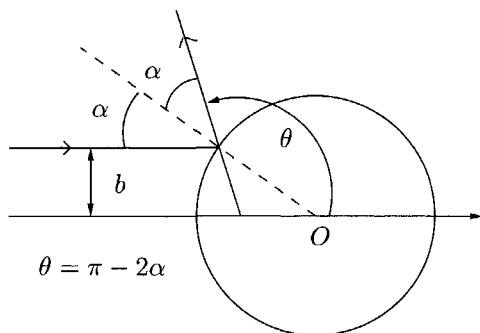


FIG. 12.2 – Collision classique d'une particule ponctuelle sur une sphère de rayon R .

d'où la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{d\sigma}{d\cos\theta} = \frac{1}{4} R^2 \quad (12.4)$$

car l'intégration sur ϕ donne un facteur 2π . Cette section efficace, appelée *section efficace de diffusion par une sphère dure*, est donc indépendante de l'angle de diffusion, ou isotrope. On vérifie que l'intégration sur Ω redonne bien πR^2 .

12.1.2 Amplitude de diffusion

Venons-en maintenant à la description quantique de la diffusion par un potentiel V que nous supposons à symétrie sphérique : $V(r)$. Nous reviendrons à un potentiel général $V(\vec{r})$ à partir du § 12.3.2. Nous ignorons les éventuels degrés de liberté de spin, sauf au § 12.2.4. La diffusion est un processus dépendant du temps : une particule incidente décrite par un paquet d'ondes $\varphi(\vec{r}, t)$ part de $z = -\infty$, se propage le long de l'axe Oz et rencontre le potentiel à un temps $t \sim 0$. Ce paquet d'ondes a une certaine probabilité d'être diffusé dans la direction θ , et le détecteur placé dans cette direction a une certaine probabilité d'enregistrer la particule. La description quantique correcte ne peut se faire qu'en utilisant des paquets d'ondes. Toutefois cette description est un peu délicate, et nous allons dans un premier temps la simplifier en considérant un processus stationnaire ; nous reviendrons ultérieurement (§ 12.4.2) sur l'utilisation des paquets d'ondes. Nous partirons d'une onde plane incidente de vecteur d'onde $\vec{k} = (0, 0, k)$ parallèle à Oz

$$\varphi(\vec{r}) = A e^{ikz} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (12.5)$$

où m est la masse des particules incidentes, E leur énergie et $|A|^2 = n_i$ leur densité. Le courant $\vec{j}$ associé à l'onde plane (12.5) est donné par (9.141)

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\varphi^* \vec{\nabla} \varphi - (\vec{\nabla} \varphi)^* \varphi \right) = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A|^2 \vec{v} \quad (12.6)$$

Le flux de particules incidentes $\mathcal{F} = |\vec{j}| = |A|^2 v$. L'onde plane $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en l'absence de potentiel ($V(r) = 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (12.7)$$

Lorsque $V(r) \neq 0$, pour une même valeur de l'énergie E , nous montrerons au § 12.4.1 qu'il existe des solutions de l'équation de Schrödinger $\psi_k^{(+)}(\vec{r})$ indicées par le vecteur d'onde $\vec{k}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi_k^{(+)}(\vec{r}) = E \psi_k^{(+)}(\vec{r}) \quad (12.8)$$

se comportant pour $r \rightarrow \infty$ comme

$$\boxed{\psi_k^{(+)}(\vec{r}) = A \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right)} \quad (12.9)$$

où f est une fonction complexe de Ω — dans notre cas uniquement de θ en raison de l'invariance par rotation autour de Oz —, appelée *amplitude de diffusion*. Le premier terme de (12.9) est l'onde plane incidente $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp(ikz)$, et le deuxième représente une *onde sphérique sortante*, ce que nous allons montrer dans un instant. Il est essentiel de remarquer que ce sont les valeurs absolues k et r qui figurent dans ce deuxième terme. L'expression (12.9) est valable pourvu que le potentiel $V(r)$ décroisse suffisamment vite pour $r \rightarrow \infty$. Elle n'est pas valable pour un potentiel coulombien, dont la décroissance en $1/r$ est trop lente. Il existe aussi des solutions de l'équation de Schrödinger avec un terme d'onde sphérique entrante

$$\psi_k^{(-)}(\vec{r}) = A \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \quad (12.10)$$

utiles pour certaines discussions, mais nous n'aurons pas à nous en servir.

Calculons le courant total pour la fonction d'onde asymptotique (12.9). Ce courant se compose du courant de l'onde plane, de celui de l'onde sphérique et d'un terme d'interférences. C'est ici que nous devons faire appel à un argument physique, car l'extension transverse de l'onde plane est en fait limitée, et non infinie (figure 12.3), et sauf dans la région de recouvrement du paquet d'ondes incident et de l'onde sphérique, nous devons négliger le

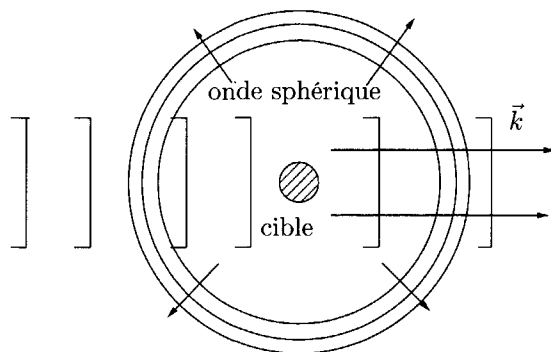


FIG. 12.3 – Limitation de l'onde plane incidente.

terme d'interférences⁴. Dans une direction $\theta \neq 0$, c'est-à-dire en dehors de la direction de l'onde incidente $\theta = 0$, il est toujours possible de placer le détecteur suffisamment loin de la cible pour que le terme d'interférences soit négligeable, et il suffit donc de calculer le courant de l'onde sphérique. En utilisant $\vec{\nabla}g(r) = \hat{r} g'(r)$ on obtient

$$\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} f(\Omega) \right) = ik\hat{r} \frac{e^{ikr}}{r} f(\Omega) + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

En effet

$$\left| \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right| \propto \frac{1}{r^2} \quad \text{et} \quad |\vec{\nabla} f(\Omega)| \propto \frac{1}{r}$$

et l'expression finale de $\vec{j}$ est

$$\vec{j} = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} |f(\Omega)|^2 \frac{\hat{r}}{r^2} = |A|^2 v |f(\Omega)|^2 \frac{\hat{r}}{r^2} \quad (12.11)$$

Si l'on trace autour de la cible une sphère de rayon r très grand, le courant associé au deuxième terme de (12.10) sur la surface de cette sphère est dirigé suivant $\vec{r}$ et vers l'extérieur, et ce terme représente bien une onde sortante. Le courant associé à un terme en $\exp(-ikr)/r$ serait dirigé vers l'intérieur et correspondrait au contraire à une onde sphérique entrante. Le nombre de particules $\Delta\mathcal{N}(\Omega)$ enregistrées par le détecteur par unité de temps est égal à l'intégrale du courant sur la surface du détecteur $\Delta S \simeq r^2 \Delta\Omega$

$$\Delta\mathcal{N}(\Omega) = \int_{\Delta S} \vec{j} \cdot d\vec{S} = r^2 \int_{\Delta\Omega} \vec{j} \cdot \hat{r} d\Omega$$

le détecteur étant placé à une distance r de la cible, ce qui donne pour $\Delta\Omega$ infinitésimal

$$d\mathcal{N}(\Omega) = |A|^2 v |f(\Omega)|^2 d\Omega = \mathcal{F} |f(\Omega)|^2 d\Omega$$

4. Ce terme d'interférences est essentiel pour comprendre le théorème optique (12.54) : cf. Lévy-Leblond et Balibar [1984], chapitre 5.

C'est bien sûr le comportement en $1/r$ du terme d'onde sphérique sortante qui assure que le flux dans un angle solide donné $\Delta\Omega$ est indépendant de r . La définition (12.1) de la section efficace différentielle permet l'identification pour $n_c = 1$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2} \quad (12.12)$$

12.2 Ondes partielles et déphasages

12.2.1 Développement en ondes partielles

Nous avons exposé au § 10.4.1 une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel $V(r)$ est à symétrie sphérique. La méthode utilisée consiste à développer la fonction d'onde en harmoniques sphériques suivant (10.77)

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l, m_l} \frac{u_l(r)}{r} Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

La symétrie cylindrique autour de Oz du présent problème permet de se limiter aux termes indépendants de ϕ : $m_l = 0$, et compte tenu de la proportionnalité (10.62) entre les harmoniques sphériques $m_l = 0$ et les polynômes de Legendre, nous pouvons nous contenter de⁵

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (12.13)$$

où $u_l(r)$ est solution de l'équation radiale (10.78)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E_l u_l(r) \quad (12.14)$$

avec la condition aux limites $u_l(0) = 0$, ou de façon plus précise suivant (10.82)

$$r \rightarrow 0 : u_l(r) \propto r^{l+1} \quad (12.15)$$

Comme les polynômes de Legendre forment une base pour les fonctions définies sur l'intervalle $[-1, +1]$, on peut écrire le développement suivant de $f(\theta)$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta) \quad f_l = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} f(\theta) P_l(\cos \theta) d \cos \theta \quad (12.16)$$

Le développement (12.16) est appelé *développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion*.

5. Nous avons modifié la normalisation de $u_l(r)$ d'un facteur sans importance $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$ en passant d'une équation à l'autre.

Si $V(r)$ tend vers zéro suffisamment vite⁶ pour $r \rightarrow \infty$, on peut négliger dans (12.14) $V(r)$ et le terme de barrière centrifuge. Le comportement asymptotique de $u_l(r)$ sera alors

$$r \rightarrow \infty : u_l(r) \propto \sin(kr + \hat{\delta}_l)$$

Comparons ce comportement avec celui d'une onde plane. Une onde plane $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta)$ est une solution à symétrie cylindrique de l'équation de Schrödinger lorsque $V(r) = 0$. On peut donc écrire pour $\exp(ikz)$ un développement en polynômes de Legendre du type (12.13). Les coefficients de ce développement sont calculés à partir de (12.16) et sont appelés *fonctions de Bessel sphériques* $j_l(kr)$

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (12.17)$$

Les fonctions de Bessel sphériques s'expriment en fonction de sinus et de cosinus et on montre qu'elles sont données par la récurrence

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l j_0(x) \quad (12.18)$$

Lorsque $r \rightarrow 0$, $r j_l(kr) \propto (kr)^{l+1}$, ce qui est un cas particulier du comportement (12.15) puisque $r j_l(kr)$ est solution de l'équation de Schrödinger radiale avec $V(r) = 0$, tandis que si $r \rightarrow \infty$, on montre⁷

$$r \rightarrow \infty : j_l(kr) \simeq \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{1}{2} l\pi \right) \quad (12.19)$$

La comparaison avec le comportement de $u_l(r)$ conduit à définir

$$\delta_l = \hat{\delta}_l + \frac{1}{2} l\pi$$

ce qui permet d'écrire le comportement asymptotique de $u_l(r)$

$$r \rightarrow \infty : u_l(r) \simeq a_l \sin \left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \delta_l \right) \quad (12.20)$$

Le nombre δ_l est le *déphasage* dans l'onde partielle l , et c'est une fonction de k : $\delta_l(k)$. Afin d'exprimer $f(\theta)$ en fonction des déphasages, il suffit de

6. Cette qualification du potentiel mériterait d'être précisée. Tous les résultats de ce chapitre sont valides si $V(r)$ est de portée finie ($V(r) = 0$ si $r > R$) ou décroît à l'infini plus vite que toute puissance. Si $V(r)$ décroît à l'infini comme $r^{-\alpha}$, certains des résultats ne sont valides que si $\alpha \geq \alpha_0$. La discussion de ce problème est assez technique, et nous renvoyons le lecteur aux ouvrages cités en référence.

7. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément A_{VIII}.

comparer les développements asymptotiques $r \rightarrow \infty$ de (12.9) et de (12.13) en choisissant $A = 1$. Compte tenu de (12.17), le développement (12.9) s'écrit

$$e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} X_l(r) P_l(\cos \theta)$$

$$X_l(r) = (2l+1) i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r}$$

La forme asymptotique (12.19) de j_l donne

$$i^l j_l(kr) \simeq \frac{1}{2ikr} [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}]$$

et on en déduit

$$X_l = \frac{2l+1}{2ikr} \left[(-1)^{l+1} e^{-ikr} + \left(1 + \frac{2ik}{2l+1} f_l \right) e^{ikr} \right] \quad (12.21)$$

La fonction $X_l(r)$ doit être asymptotiquement égale à $u_l(r)/r$ qui vaut, d'après (12.20)

$$\frac{u_l(r)}{r} \simeq \frac{a_l}{2ir} [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}] \quad (12.22)$$

L'égalité de (12.21) et (12.22) n'est possible que si

$$e^{2i\delta_l} = 1 + \frac{2ik}{2l+1} f_l$$

soit

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (12.23)$$

Cette équation donne l'expression recherchée de $f(\theta)$ en fonction des déphasages

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (12.24)$$

On déduit la section efficace différentielle de (12.12) et la section efficace totale par intégration sur les angles, en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre déduite de (10.62) et de l'orthogonalité (10.55) des harmoniques sphériques.

$$\int d\Omega P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Le résultat pour σ_{tot} s'écrit

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (12.25)$$

La fonction

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (12.26)$$

où nous avons explicité la dépendance en k , est appelée *élément de matrice S dans l'onde partielle l* , et joue un rôle important, que l'on peut comprendre en comparant les comportements (12.21) et (12.22) de l'onde sphérique libre $j_l(kr)$ et de la fonction d'onde en présence d'un potentiel

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\propto [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}] \\ u_l(r) &\propto [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}] \end{aligned}$$

L'effet du potentiel est de multiplier la partie onde sphérique sortante par le facteur de phase $S_l = \exp(2i\delta_l)$, l'onde entrante n'étant pas affectée, ce qui résulte des conditions aux limites imposées. En effet, l'onde plane incidente est composée d'une onde sphérique entrante et d'une onde sphérique sortante. La partie sortante est modifiée par la diffusion, car les particules sont diffusées par la cible et divergent à partir de celle-ci, mais ce n'est pas le cas de l'onde entrante qui n'est pas modifiée par l'interaction avec la cible. Nous montrerons au § 12.3.1 que la condition $|S_l| = 1$ rend compte du fait que le nombre de particules entrantes dans une sphère de grand rayon tracée autour de la cible est égal à celui des particules sortantes lorsque la diffusion est élastique.

Chaque terme de (12.25) correspond à la section efficace de diffusion dans l'onde partielle l . Évidemment l'identification de la contribution de chaque onde partielle n'est possible que pour la section efficace totale, car les diverses ondes partielles interfèrent dans la section efficace différentielle. On remarque que la contribution à la section efficace totale de chaque onde partielle est bornée

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \leq \sigma_l^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (12.27)$$

Donnons une interprétation semi-classique de ce résultat. Classiquement le moment angulaire hl et le paramètre d'impact sont reliés par $l = kb$ et par conséquent

$$\frac{l}{k} \leq b \leq \frac{l+1}{k}$$

La section efficace classique maximale est l'aire comprise entre les cercles de rayons l et $l+1$

$$\sigma_l \leq \frac{\pi}{k^2} [(l+1)^2 - l^2] = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) = \frac{1}{4} \sigma_l^{\max}$$

La section efficace *classique* est au maximum le quart de la section maximale quantique. Supposons le potentiel de portée limitée : $V(r) = 0$ si $r > R$. Alors, d'un point de vue classique, une particule incidente ne pourra interagir que si son paramètre d'impact est inférieur à R : $b > R$, et seules les ondes partielles telles que $l \lesssim kR$ vont contribuer. On voit que la méthode des déphasages sera performante si l'énergie est faible, car dans ce cas seul un

nombre limité de déphasages vont contribuer. En particulier seule l'onde s ($l = 0$) va donner une contribution appréciable lorsque $k \rightarrow 0$. Une version plus précise de cet argument consiste à remarquer que la probabilité de présence $\propto r^2 j_l^2(kr)$ d'une onde sphérique libre est négligeable pour $kr \lesssim [l(l+1)]^{1/2}$ et cette onde ne pénètre pas dans les régions où le potentiel est important pour les petites valeurs de k , sauf si $l = 0$, auquel cas $r^2 j_0^2(kr) \propto \text{cste}$ si $r \rightarrow 0$. On montre rigoureusement⁸ que pour un potentiel de portée limitée le déphasage δ_l se comporte comme

$$\delta_l(k) \propto (kR)^{2l+1} \quad (12.28)$$

lorsque $k \rightarrow 0$, ou $l \rightarrow \infty$.

12.2.2 Diffusion à basse énergie

Lorsque le potentiel est de portée limitée, l'onde s sera la seule à contribuer de façon appréciable à la section efficace de basse énergie, et celle-ci sera par conséquent isotrope. Jusqu'à la fin de cette section, nous prendrons en compte uniquement l'onde $l = 0$ et nous utiliserons les notations $\delta_{l=0} = \delta(k)$, $S_{l=0}(k) = S(k)$, $f_{l=0}(k) = f(k)$, $u_{l=0}(r) = u(r)$. Compte tenu du comportement (12.28) pour $l = 0$, $\delta(k) \propto k$, on définit la *longueur de diffusion* a par

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(k)}{k} \quad (12.29)$$

Le signe $(-)$ est conventionnel et cette convention sera justifiée ci-dessous.

Comme exemple de calcul de déphasage et de longueur de diffusion, nous allons traiter le cas du puits sphérique (figure 12.4)

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ V(r) &= 0 & r > R \end{aligned}$$

Ce puits sphérique décrit approximativement la diffusion neutron-proton avec les paramètres suivants (exercices 10.7.8 et 12.5.3)

$$R \simeq 2 \text{ fm} \quad V_0 \simeq 26 \text{ MeV}$$

L'équation de Schrödinger radiale s'écrit

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right) u(r) = \frac{2m}{\hbar^2} E u(r) \quad (12.30)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} r > R & : \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) u(r) = 0 \\ r < R & : \left(\frac{d^2}{dr^2} + k'^2 \right) u(r) = 0 \end{aligned}$$

8. Voir par exemple Messiah [1959], chapitre X.

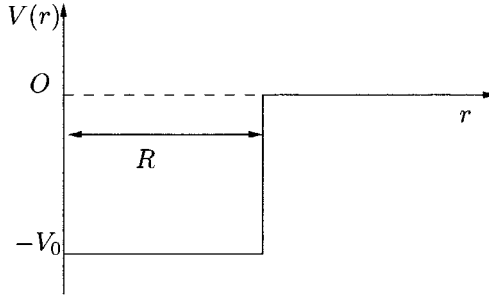


FIG. 12.4 – Puits sphérique.

avec $k^2 = 2mE/\hbar^2$ et $k'^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$, d'où, en tenant compte de la condition $u(r=0) = 0$

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = C \sin(kr + \delta) \\ r < R & : u(r) = D \sin k'r \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée logarithmique de $u(r)$ à $r = R$ impose

$$k' \cot k'R = k \cot(kR + \delta) \quad (12.31)$$

L'équation

$$\cot x = i \frac{e^{2ix} + 1}{e^{2ix} - 1}$$

permet de déterminer l'élément de matrice S , $S(k)$; après un calcul sans difficulté on trouve

$$S(k) = e^{2i\delta(k)} = e^{-2ikR} \frac{\cos k'R + i \frac{k}{k'} \sin k'R}{\cos k'R - i \frac{k}{k'} \sin k'R} \quad (12.32)$$

L'expression donnant $S(k)$ est bien de module unité. Évidemment le déphasage n'est déterminé qu'à π près : pour avoir la « vraie » valeur du déphasage, il faudrait faire croître le potentiel de 0 à V_0 et suivre l'évolution de δ entre zéro et sa valeur finale.

Comme dans le cas unidimensionnel (cf. § 9.4.3), il existe une relation remarquable entre la matrice S et les états liés. Posons en effet $k = i\kappa$ (on verra dans un instant qu'il faut choisir $k = i\kappa, \kappa > 0$, et non $k = -i\kappa$). La fonction $S(k)$ a des pôles pour

$$\cos k'R + \frac{\kappa}{k'} \sin k'R = 0 \quad (12.33)$$

mais cette équation est précisément celle qui détermine les états liés. En effet la fonction d'onde d'un état lié d'énergie $E = -B < 0$ est donnée par

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = Ce^{-\kappa r} \\ r < R & : u(r) = D \sin k' r \end{aligned}$$

avec $\kappa = (2mB/\hbar^2)^{1/2}$, $k' = [2m(V_0 - B)]^{1/2}/\hbar$, et la continuité de la dérivée logarithmique à $r = R$ s'écrit

$$-\kappa = k' \cot k' R \quad (12.34)$$

ce qui est exactement l'équation donnant les pôles de $S(k)$. Le résultat est général pour les potentiels décroissant suffisamment vite à l'infini et il est valable pour toute onde partielle : les pôles de $S_l(k)$ pour $k = i\kappa$ donnent la position des états liés dans l'onde partielle l .

Il est facile de déduire la longueur de diffusion de (12.31) ; cette équation s'écrit aussi

$$\tan(kR + \delta) = \frac{k}{k'} \tan k' R$$

Dans la limite $k \rightarrow 0$, $kR \rightarrow 0$, $\delta \rightarrow 0$ et $k' \rightarrow k_0 = (2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$, d'où

$$kR + \delta(k) \simeq \frac{k}{k_0} \tan k_0 R$$

soit

$$\delta(k) \simeq -k \left(R - \frac{\tan k_0 R}{k_0} \right)$$

ce qui donne d'après la définition (12.29)

$$a = R \left(1 - \frac{\tan k_0 R}{k_0 R} \right) \quad (12.35)$$

Un autre cas particulier intéressant est celui de la diffusion par une sphère dure : $V(r) = 0$ si $r > R$ et $V(r) = +\infty$ si $r < R$. La fonction d'onde radiale $u(r)$ doit s'annuler à $r = R$

$$\begin{aligned} r > R & : u(r) = C \sin(kR + \delta) \\ r < R & : u(r) = 0 \end{aligned}$$

En conséquence $kR + \delta = n\pi$ et pour k suffisamment petit on obtient

$$\delta = -kR \quad a = R \quad (12.36)$$

Le signe $(-)$ dans la définition (12.29) a été choisi de sorte que la longueur de diffusion d'une sphère dure soit $+R$ et non $-R$. L'étude qualitative du comportement de $u(r)$ dans la figure 12.5 montre que $a > 0$ pour tout potentiel répulsif. La situation est plus complexe pour un potentiel attractif. Lorsqu'il

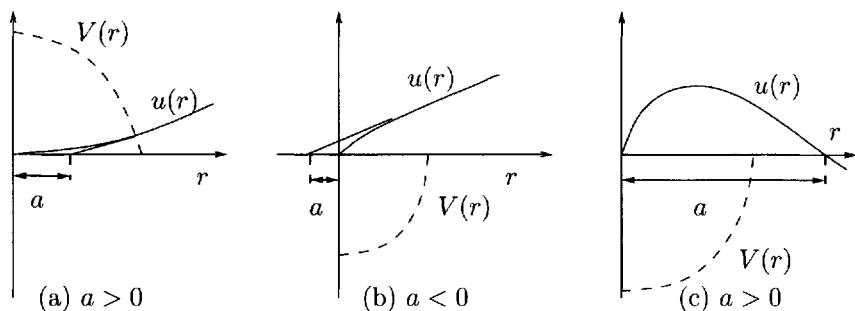


FIG. 12.5 – Comportement de la fonction d'onde et de la longueur de diffusion pour différents potentiels. (a) Potentiel répulsif (b) Potentiel attractif sans état lié (c) Potentiel attractif avec un seul état lié.

n'existe pas d'état lié, un potentiel attractif donne une longueur de diffusion négative. L'apparition d'un état lié change le signe de a , qui devient positif. Le signe change à nouveau avec l'apparition d'un second état lié, etc. Ceci est confirmé par (12.35) : la condition d'apparition d'un premier état lié est $k_0 R = \pi/2$ et la longueur de diffusion est négative pour $k_0 R < \pi/2$. Elle devient infinie lorsque $k_0 R = \pi/2$, positive lorsque $k_0 R > \pi/2$ et le reste pour $\pi/2 < k_0 R < 3\pi/2$. L'apparition d'un second état lié correspond à $k_0 R = 3\pi/2$, et la longueur de diffusion devient à nouveau négative au-delà de cette valeur après être passée à nouveau par une valeur infinie. Une longueur de diffusion grande et positive signale la présence d'un état lié de faible énergie et si elle est grande et négative, elle signale la proximité de l'apparition d'un état lié : on dit parfois qu'il existe un état anti-lié ou virtuel.

La section efficace de basse énergie est isotrope d'après (12.12), et la section efficace totale est

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2 \quad (12.37)$$

Il est intéressant de remarquer que la section efficace quantique d'une sphère dure ($a = R$) est quatre fois la section efficace classique πR^2 . La mesure de la section efficace totale ne donne que la valeur absolue de a . Or le signe de la longueur de diffusion est une donnée importante : par exemple le potentiel effectif que nous allons définir au paragraphe suivant est attractif pour $a < 0$ et répulsif pour $a > 0$, ce qui a des conséquences directes par exemple sur la possibilité de former des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux. Un autre cas important est celui de la diffusion neutron-proton (§ 12.2.4).

La forme de basse énergie $\delta(k) \simeq -ka$ est en fait le premier terme d'un développement du déphasage en fonction de k^2 . L'exercice 12.5.3 montre que la fonction $k \cot \delta(k)$ est une fonction analytique⁹ de k^2 dont on peut écrire

9. Si $V(r)$ décroît au moins aussi vite que $\exp(-\mu r)$. L'équation (12.38) est valable pourvu que $V(r)$ décroisse au moins comme r^{-5} .

le développement de Taylor pour $k^2 \rightarrow 0$

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4) \quad (12.38)$$

La longueur r_0 est appelée *portée effective*. On utilise souvent la forme de basse énergie de l'amplitude de diffusion

$$f(k) = \frac{e^{2i\delta(k)} - 1}{2ik} = \frac{1}{k[\cot \delta(k) - i]}$$

soit, en exprimant $\cot \delta(k)$ en fonction de a si $r_0 k \ll 1$

$$\boxed{f(k) = \frac{-a}{1 + ika}} \quad (12.39)$$

Cette forme peut être rendue plus précise si l'on utilise l'approximation de portée effective (12.38)

$$f(k) = \frac{-a}{1 + ika - \frac{1}{2} r_0 a k^2} \quad (12.40)$$

12.2.3 Potentiel effectif

La longueur de diffusion permet d'introduire la notion très utile de potentiel effectif. Lorsque l'on considère un système de particules de basse énergie, il est très commode de pouvoir remplacer le potentiel réel $V(r)$ par un potentiel $V_{\text{eff}}(r)$ plus simple, appelé *potentiel effectif*, qui donne les mêmes résultats pour la diffusion de basse énergie. Ce potentiel effectif est utilisé par exemple dans le traitement théorique de la diffusion de neutrons de basse énergie ou des condensats de Bose-Einstein atomiques gazeux. Nous allons montrer que la diffusion de basse énergie est reproduite en choisissant un potentiel effectif proportionnel à une fonction δ

$$V_{\text{eff}}(r)\psi(r) = g\delta(\vec{r}) \frac{d}{dr} (r\psi(r)) \quad (12.41)$$

où g est une constante à déterminer. Pour justifier ce potentiel et déterminer g , examinons l'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde $\psi(r) = u(r)/r$. L'expression du laplacien appliquée à une fonction de r

$$\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf(r)) \quad (12.42)$$

n'est valable que pour une fonction $f(r)$ régulière à $r = 0$, tandis que pour $f(r) \propto 1/r$ on utilise l'équation familière en électrostatique

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r}) \quad (12.43)$$

Examinons l'équation de Schrödinger en prenant comme potentiel (12.41)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \frac{u(r)}{r} + V_{\text{eff}}(r) \frac{u(r)}{r} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{u(r)}{r}$$

et écrivons le terme d'énergie cinétique

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{u(r)}{r} &= \nabla^2 \left[\frac{u(r) - u(0)}{r} \right] + u(0) \nabla^2 \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \left[\frac{u(r) - u(0)}{r} \right] - 4\pi u(0) \delta(\vec{r}) = \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - 4\pi u(0) \delta(\vec{r}) \end{aligned}$$

où nous avons remarqué que $[u(r) - u(0)]/r$ est une fonction régulière à $r = 0$. Nous avons donc

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{u(r)}{r} = \left[-\frac{4\pi\hbar^2}{2m} u(0) - g u'(0) \right] \delta(\vec{r})$$

Les deux membres de l'équation précédente doivent s'annuler séparément, ce qui implique, pour le membre de gauche

$$u(r) = C \sin(kr + \delta(k)) \quad r > 0$$

et donc $u'(0)/u(0) = k \cot \delta(k)$. L'annulation du coefficient de $\delta(\vec{r})$ impose

$$-\frac{2\pi\hbar^2}{m} = gk \cot \delta(k)$$

et la limite $k \rightarrow 0$ de cette équation permet de relier¹⁰ g et a

$$\boxed{g = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \quad V_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r}) \frac{d}{dr} r} \quad (12.44)$$

Le potentiel effectif dépend d'un seul paramètre, la longueur de diffusion a , que l'on prend bien sûr égale à celle d'un potentiel plus réaliste ou tout simplement de l'expérience. Examinons aussi les états liés du potentiel effectif. La fonction d'onde radiale de cet état lié doit être de la forme

$$u(r) = C e^{-\kappa r}$$

et par conséquent $u'(0)/u(0) = -\kappa$. On en déduit une relation entre l'énergie de liaison B et la longueur de diffusion

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mB}{\hbar^2}} = \frac{2\pi\hbar^2 g}{m} = \frac{1}{a} \quad (12.45)$$

10. Il faut se rappeler que si l'on considère la diffusion de particules identiques de masse M , la masse réduite $m = M/2$ et

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a$$

L'état lié du potentiel effectif est unique, et on retrouve le fait que $a > 0$ si l'on veut un état lié et un seul. En résumé, un potentiel effectif tel que $a > 0$ correspond aussi bien à une sphère dure qu'à un potentiel attractif possédant un seul état lié. Ces deux potentiels donneront le même comportement pour un ensemble de particules de basse énergie, alors que le comportement sera différent si $a < 0$: c'est le *signe* de la longueur de diffusion qui est crucial. La fonction $k \cot \delta(k)$ est une constante

$$k \cot \delta(k) = -\frac{2\pi\hbar^2}{mg} = -\frac{1}{a}$$

et l'amplitude de diffusion du potentiel effectif est donnée *exactement* par (12.39)

$$f_{\text{eff}}(k) = \frac{-a}{1 + ika}$$

12.2.4 Diffusion neutron-proton à basse énergie

La diffusion neutron-proton à basse énergie fournit une illustration d'une grande importance pratique du formalisme que nous venons de développer. Le proton et le neutron sont des particules de spin $1/2$, et comme la diffusion dépend du spin, nous devons généraliser les résultats précédents pour en tenir compte. Dans la diffusion à basse énergie, le spin total $\vec{S}_{\text{tot}}$ est conservé. En effet le moment angulaire orbital est nul, puisque la diffusion se fait dans l'onde s , et la conservation du moment angulaire total est équivalente à celle du spin total. L'amplitude de diffusion peut s'écrire comme un opérateur $\hat{f}$ agissant dans l'espace $\mathcal{H}$ à quatre dimensions, produit tensoriel des espaces des états des deux spins $1/2$, en fonction des projecteurs $\mathcal{P}_s = \mathcal{P}_0$ et $\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_1$ sur les états singulet (spin total zéro) et triplet (spin total un) donnés en (10.128)

$$\hat{f}(k) = f_s(k)\mathcal{P}_s + f_t(k)\mathcal{P}_t$$

Cette écriture de $\hat{f}$ assure que le spin total est inchangé dans la diffusion : un état singulet reste singulet et un état triplet reste triplet. Nous allons nous limiter au cas $ka \ll 1$, et d'après (12.39)

$$f_s(k) = -a_s \quad f_t(k) = -a_t$$

où a_s et a_t sont les longueurs de diffusion dans l'état singulet et l'état triplet. Lorsque la condition $ka \ll 1$ n'est pas satisfaite, il est possible d'utiliser des expressions analogues à (12.39), ou mieux (12.40), pour $f_s(k)$ et $f_t(k)$, en faisant intervenir les portées effectives r_{0s} et r_{0t} . En résumé, à l'approximation où $ka \ll 1$

$$\hat{f} = -a_s\mathcal{P}_s - a_t\mathcal{P}_t \quad (12.46)$$

ou encore, en introduisant les matrices de Pauli $\vec{\sigma}_p$ et $\vec{\sigma}_n$ agissant dans l'espace des états de spin du proton et du neutron

$$-\hat{f} = \hat{a} = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)\vec{\sigma}_p \cdot \vec{\sigma}_n \quad (12.47)$$

La section efficace différentielle est isotrope et la section efficace totale pour un état de spin initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$ est

$$\sigma_{fi} = 4\pi |\langle f|\hat{a}|i\rangle|^2 \quad (12.48)$$

Si on ne mesure pas les spins finaux et si l'état initial est un mélange où l'on connaît seulement la probabilité p_i de trouver les spins initiaux dans l'état $|i\rangle$, il faut sommer sur les états $|f\rangle$ et les probabilités p_i

$$\begin{aligned} \sigma &= 4\pi \sum_i p_i \sum_f |\langle i|\hat{a}|f\rangle \langle f|\hat{a}|i\rangle| \\ &= 4\pi \sum_i p_i \langle i|\hat{a}^2|i\rangle = 4\pi \text{Tr}(\rho_{\text{init}} \hat{a}^2) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture dans $\mathcal{H}$, $\sum_f |f\rangle \langle f| = I$, et la définition de l'opérateur densité de l'état initial

$$\rho_{\text{init}} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$$

Le cas le plus fréquent est celui où l'état initial est non polarisé : les états $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $| - + \rangle$ et $|--\rangle$ ont la même probabilité. Dans ce cas $\rho_{\text{init}} = I/4$ et

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{non pol}} &= \pi \text{Tr} \hat{a}^2 = \pi \text{Tr} (a_s^2 \mathcal{P}_s + a_t^2 \mathcal{P}_t) \\ &= 4\pi \left(\frac{1}{4} a_s^2 + \frac{3}{4} a_t^2 \right) = \frac{1}{4} \sigma_s + \frac{3}{4} \sigma_t \end{aligned} \quad (12.49)$$

L'interprétation physique est immédiate : si l'état initial est non polarisé, la probabilité d'avoir un état singulet est de 1/4 et celle d'avoir un état triplet de 3/4, ce qui donne les poids 1/4 et 3/4 aux sections efficaces singulet et triplet dans (12.49).

La section efficace non polarisée ne donne accès qu'à la combinaison $a_s^2 + 3a_t^2$ des longueurs de diffusion. Une information supplémentaire vient de l'existence d'un état lié dans l'état triplet, le deutéron, ce qui permet de déterminer approximativement a_t . Une relation précise entre les paramètres du deutéron et ceux de la diffusion à basse énergie dans l'état triplet est établie dans l'exercice 12.5.3, à l'approximation de la portée effective. Une relation approchée est obtenue en remarquant que la fonction d'onde du deutéron s'étend très au-delà de la portée du potentiel, $\kappa^{-1} \gg R$, ce qui permet d'utiliser un potentiel effectif et la relation (12.45). Compte tenu de $B \simeq 2.22$ MeV, on trouve $\kappa^{-1} \simeq 4.2$ fm, alors que la valeur exacte de a_t est de 5.4 fm, mais l'argument suffit pour déterminer le signe de a_t : $a_t > 0$.

La connaissance de a_t à partir des paramètres du deutéron et la mesure de la section efficace non polarisée permettent de déterminer le module $|a_s|$ de la longueur de diffusion dans l'état singulet, mais pas son signe. Une méthode

possible pour déterminer le signe de a_s est la diffusion de neutrons sur une molécule d'hydrogène, étudiée à l'exercice 12.5.2, qui montre que la longueur de diffusion a_s est négative, en accord avec le fait qu'il n'existe pas d'état lié singulet. Les valeurs expérimentales des longueurs de diffusion et des portées effectives sont

$$a_t = 5.40 \text{ fm} \quad r_{0t} = 1.73 \text{ fm} \quad a_s = -23.7 \text{ fm} \quad r_{0s} = 2.5 \text{ fm}$$

On constate que a_s est grande et négative, et le système neutron-proton dans l'état singulet est très proche de la formation d'un état lié : il existe un état virtuel.

12.3 Diffusion inélastique

12.3.1 Théorème optique

En règle générale, dans une collision, les particules peuvent non seulement être diffusées élastiquement, mais aussi inélastiquement ; par exemple la diffusion d'un photon sur un atome A dans son état fondamental E_0 peut laisser l'atome dans un niveau excité A^* d'énergie E_1

$$\gamma + A \rightarrow \gamma' + A^*$$

le photon final ayant perdu une énergie ($E_1 - E_0$) par rapport au photon initial (si l'on néglige le recul de l'atome). Il est même possible que les particules finales soient différentes des particules initiales, comme dans

$$\pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda$$

ou

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^- + \pi^0 + p$$

Dans le cas de la diffusion élastique, nous avons vu que $|S_l(k)| = 1$. Nous allons montrer qu'il est possible de généraliser l'expression de l'amplitude de diffusion $f(\Omega)$ au cas inélastique à condition d'admettre que $|S_l(k)| \leq 1$. Cette condition découle de ce que le module de l'amplitude de l'onde sortante doit être plus petit que celui de l'onde entrante : le nombre de particules N_{in} entrant dans une sphère de grand rayon r tracée autour de la cible doit être inférieur à celui N_{out} qui en sort, puisque les particules incidentes peuvent seulement *disparaître* dans la diffusion inélastique. Comme nous le montrons ultérieurement, cette inégalité vaut pour toute onde partielle : $N_{\text{out}}^l \leq N_{\text{in}}^l$, car l'intégration sur la surface de la sphère élimine les interférences entre ondes partielles. Si la diffusion est purement élastique dans l'onde l , $N_{\text{in}}^l = N_{\text{out}}^l$ et $|S_l(k)| = 1$. Évaluons N_{in}^l et N_{out}^l en revenant à l'expression asymptotique $r \rightarrow \infty$ (12.22) de la fonction d'onde. Comme dans la diffusion élastique, seul le terme d'onde sortante peut être modifié

$$\frac{e^{ikr}}{r} \rightarrow S_l(k) \frac{e^{ikr}}{r}$$

d'où le comportement asymptotique de $\psi(\vec{r})$

$$\psi \simeq \frac{iA}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr}]$$

ce qui donne pour $f(\theta)$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (S_l - 1)$$

La section efficace élastique totale vaut

$$\sigma_{el} = \int d\Omega |f(\theta)|^2$$

et le résultat de l'intégration sur Ω généralise (12.25)

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_l|^2 \quad (12.50)$$

Calculons le nombre de particules entrantes dans l'onde partielle l , N_{in}^l , en intégrant le courant entrant sur la surface d'une sphère de rayon $r \rightarrow \infty$ autour de la cible. Comme les polynômes de Legendre sont orthogonaux, il n'y a pas de termes d'interférences entre les différentes ondes partielles. On trouve

$$N_{in}^l = \left[\frac{(2l+1)^2 |A|^2}{4k^2} \right] \left[\frac{2}{2l+1} \right] \left[\frac{\hbar k}{m} \right] [2\pi] = \frac{\pi \hbar (2l+1) |A|^2}{mk}$$

Le premier terme vient de la normalisation de $|\psi|^2$, le second de la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre, le troisième de l'expression du courant de l'onde entrante et le dernier de l'intégration sur ϕ . Un calcul analogue donne N_{out}^l

$$N_{out}^l = \frac{\pi \hbar (2l+1) |A|^2}{mk} |S_l|^2$$

La condition $N_{out}^l \leq N_{in}^l$ implique que $|S_l| \leq 1$. La section efficace inélastique dans l'onde partielle l n'est autre, au facteur de flux $\mathcal{F} = \hbar k |A|^2 / m$ près, que la différence entre le nombre de particules entrantes et celui de particules sortantes

$$\sigma_{inel}^l = \frac{1}{\mathcal{F}} (N_{in}^l - N_{out}^l) = \frac{\pi \hbar (2l+1) |A|^2}{k^2} (1 - |S_l|^2)$$

et la section efficace inélastique totale vaut

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |S_l|^2) \quad (12.51)$$

Si $N_{\text{in}}^l = N_{\text{out}}^l$, le nombre de particules sortantes est égal au nombre de particules entrantes, la diffusion est élastique dans l'onde partielle l et $|S_l(k)| = 1$, $S_l(k) = \exp[2i\delta_l(k)]$. La condition $|S_l| \leq 1$ entraîne comme il se doit $\sigma_{\text{inel}}^l \geq 0$. La somme des sections efficaces élastique et inélastique est la section efficace totale

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - \text{Re } S_l) \quad (12.52)$$

La présence de voies inélastiques implique que $(1 - S_l) \neq 0$, et on ne peut donc pas avoir en physique quantique de diffusion purement inélastique, alors qu'en physique classique des particules peuvent être envoyées sur des cibles parfaitement absorbantes, sans diffusion élastique. Si l'absorption est totale dans une onde partielle l , ce qui correspond à $N_l^{\text{out}} = 0$ et donc à $S_l = 0$, alors

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{inel}}^l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \quad (12.53)$$

Par comparaison, la section efficace élastique maximale est

$$\sigma_{\text{el,max}}^l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$$

Une conséquence importante de l'intrication entre diffusions élastique et inélastique est le théorème optique. Calculons la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant¹¹, $\text{Im}f(\theta=0)$ en utilisant $P_l(1) = 1$

$$\text{Im}f(\theta=0) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - \text{Re}S_l)$$

et si l'on compare avec l'expression (12.52) de σ_{tot}

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(\theta=0) \quad (12.54)$$

Cette relation est le *théorème optique*, qui relie la section efficace totale à la partie imaginaire de la diffusion vers l'avant. La démonstration du théorème met en évidence qu'il découle de la conservation de la probabilité.

12.3.2 Potentiel optique

On peut rendre compte de la diffusion inélastique en introduisant un potentiel complexe dans l'équation de Schrödinger. En effet, si l'on reprend

11. Cette quantité ne peut pas être mesurée directement, car vers l'avant on trouve principalement les particules incidentes qui n'ont pas subi de collision. Il faut prendre la limite $\theta \rightarrow 0$ de $f(\theta)$. Voir aussi la note 4.

la démonstration du § 9.2.2 de l'équation de continuité du courant $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ dans le cas d'une onde stationnaire $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, on s'aperçoit que cette équation n'est pas satisfaite si le potentiel est complexe et que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \quad (12.55)$$

On retrouve naturellement le résultat $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ dans le cas du potentiel réel utilisé au § 9.2.2. Le nombre de particules absorbées par unité de temps est égal au flux incident multiplié par la section efficace inélastique. Pour calculer le nombre de particules absorbées, entourons la cible par une sphère de grand rayon et calculons le flux de $\vec{j}$ à travers la surface $\mathcal{S}$ de cette sphère

$$- \int_{\mathcal{S}} \vec{j} \cdot d\vec{S} = - \int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3r = - \frac{2}{\hbar} \int_{\mathcal{V}} \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r$$

où $\mathcal{V}$ est le volume de la sphère et le signe $(-)$ correspond au fait que $d\vec{S}$ est orienté vers l'extérieur. On a donc

$$\sigma_{\text{in}} = - \frac{2m}{\hbar^2 k} \int \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r \quad (12.56)$$

où nous avons intégré sur tout l'espace car le potentiel est supposé de portée finie ou s'annulant suffisamment vite à l'infini. Dans cette section, et jusqu'à la fin du chapitre, le potentiel $V(\vec{r})$ est quelconque : il n'est pas nécessairement invariant par rotation. L'équation (12.56) implique que la partie imaginaire de $V(r)$ doit être négative : $\operatorname{Im} V(\vec{r}) \leq 0$. Le potentiel complexe de partie imaginaire négative $V(\vec{r})$ est appelé *potentiel optique*. Ce potentiel est utile lorsque l'on ne s'intéresse pas aux détails des processus élastiques, mais seulement à leur répercussion sur les processus inélastiques. Il est en particulier très largement utilisé dans la diffusion neutron-noyau. À basse énergie, on pourra représenter ce potentiel complexe par un potentiel effectif du type (12.41) avec une longueur de diffusion complexe $a = a_1 + ia_2$, $a_2 < 0$. Dans ces conditions $\operatorname{Im} f = -a_2$ et la section efficace totale est très grande par rapport à la section efficace élastique

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq \sigma_{\text{in}} \simeq \frac{4\pi}{k} |a_2| \gg \sigma_{\text{el}} = 4\pi a_1^2$$

La proportionnalité de σ_{in} à $1/k$, ou bien à $1/v$, où v est la vitesse des neutrons incidents, est un résultat d'une très grande importance : la *section efficace d'absorption des neutrons lents croît en $1/v$ quand $v \rightarrow 0$* . Ceci entraîne par exemple que l'on doit ralentir les neutrons pour obtenir des sections efficaces importantes de fission de l'uranium dans un réacteur nucléaire. Un autre exemple est l'utilisation du cadmium pour absorber les neutrons : la longueur de diffusion est complexe, avec $a_1 = -3.8$ fm et $a_2 = -1.2$ fm.

Récrivons le théorème optique en utilisant (12.56)

$$\operatorname{Im} f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \int |f(\Omega)|^2 d\Omega - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \operatorname{Im} V(\vec{r}) |\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r \quad (12.57)$$

Cette équation peut être généralisée¹². Définissons l'amplitude de diffusion $f(k\hat{r}, \vec{k})$ à partir de la solution (12.9) $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Comme le potentiel n'est pas supposé invariant par rotation, l'amplitude de diffusion dépend de $\hat{r}$ et de $\vec{k}$, et pas uniquement de k et de l'angle entre $\hat{r}$ et $\vec{k}$. On montre alors la *relation d'unitarité*

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i} \left[f(\vec{k}', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}') \right] &= \frac{k}{4\pi} \int f^*(k\hat{r}, \vec{k}') f(k\hat{r}, \vec{k}) d^3\hat{r} \\ &\quad - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \text{Im } V(\vec{r}) [\psi_{\vec{k}'}^{(+)}(\vec{r})]^* \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) d^3r \quad (12.58) \end{aligned}$$

L'invariance par reversement du sens du temps implique $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}')$ et celle par parité $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}', -\vec{k})$. Si ces deux invariances sont valides, $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\vec{k}, \vec{k}')$ et

$$\frac{1}{2i} \left[f(\vec{k}', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}') \right] = \text{Im } f(\vec{k}', \vec{k})$$

dans (12.58). On retrouve alors (12.57) en prenant $\vec{k}' = \vec{k}$.

12.4 Développement formels

12.4.1 Équation intégrale de la diffusion

Nous allons reprendre dans cette section quelques points que nous avons laissés dans l'ombre jusqu'à présent, afin de clarifier certains des arguments précédents. Nous allons d'abord démontrer une équation, l'équation intégrale de la diffusion, qui nous permettra de justifier l'expression asymptotique (12.10), mais qui se révèle également utile dans d'autres développements de la théorie de la diffusion. La démonstration repose sur l'expression des *fonctions de Green* $G(\vec{r})$ de l'équation de Schrödinger lorsque $V = 0$, qui vérifient

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad (12.59)$$

De façon générale, les fonctions de Green G d'une équation d'onde $\mathcal{L}\psi = 0$ sont définies par $\mathcal{L}G = \delta(\vec{r})$. La solution de ce type d'équation n'est pas unique et la forme précise de la fonction de Green que l'on doit utiliser pour un problème donné est fixée par des conditions aux limites. Nous aurons besoin des fonctions de Green $G^{(\pm)}(\vec{r})$ ayant un comportement d'onde sphérique

12. Voir par exemple Landau et Lifschitz[1966], § 124.

sortante pour $G^{(+)}(\vec{r})$ et entrante pour $G^{(-)}(\vec{r})$. Ces fonctions de Green sont données par ¹³

$$G^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (12.60)$$

La vérification de (12.59) est immédiate

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \nabla^2 \left[\frac{e^{\pm ikr} - 1}{r} \right] + \nabla^2 \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} e^{\pm ikr} - 4\pi \delta(\vec{r}) \\ &= -k^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} - 4\pi \delta(\vec{r}) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que la fonction $(\exp(ikr) - 1)/r$ est régulière à $r = 0$ et (12.42).

Examinons le comportement de la fonction $G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}')$ lorsque $r \rightarrow \infty$ tandis que r' reste fini. Dans cette limite

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + O\left(\frac{r'^2}{r}\right)$$

et nous obtenons, en définissant $\vec{k}' = k\hat{r}$

$$G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi r} = -\frac{e^{ikr} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{4\pi r} + O\left(k \frac{r'^2}{r^2}\right) \quad (12.61)$$

ce qui montre que $G^{(+)}$ a bien un comportement d'onde sphérique sortante. La fonction $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ définie de façon implicite par

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int G^{(+)}(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3 r'} \quad (12.62)$$

obéit à l'équation de Schrödinger. En effet, en utilisant (12.59)

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

L'équation (12.62) est appelée *équation intégrale de la diffusion*. Le point essentiel est que $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ a bien le comportement asymptotique (12.9). En effet, en utilisant (12.61) et (12.62) pour $r \rightarrow \infty$

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3 r' \quad (12.63)$$

13. Toute combinaison $\lambda G^{(+)} + (1 - \lambda) G^{(-)} + G_h$, où G_h est solution de l'équation d'ondes homogène, vérifie également (12.59).

On identifie immédiatement l'amplitude de diffusion $f(\Omega)$ à partir de (12.9)

$$f(\Omega) = f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') d^3r' \quad (12.64)$$

Cette équation est *exacte*, mais bien sûr il faut connaître $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$, et on ne peut pas se dispenser de la résolution de l'équation de Schrödinger ! On peut résoudre (12.63) de façon approchée par itération, la première itération étant

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

En reportant dans (12.64) on obtient $f(\vec{k}', \vec{k})$ à l'*approximation de Born*

$$f_B(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d^3r \quad (12.65)$$

Le vecteur $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ est le transfert de vecteur d'onde, $\hbar\vec{q}$ le *transfert d'impulsion* et f_B est la transformée de Fourier du potentiel par rapport à $\vec{q}$. On note que

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

et que f_B ne dépend que de la combinaison $k \sin(\theta/2)$ de k et de θ si le potentiel est à symétrie sphérique. Cette particularité est bien sûr spécifique de l'approximation de Born. Les critères de validité de l'approximation de Born sont délicats à énoncer de façon précise : pour simplifier, il faut que l'énergie soit grande ou que le potentiel soit faible. Dans le cas de la diffusion coulombienne, l'approximation de Born donne le résultat exact pour la *section efficace* (mais non pour l'amplitude !) à toute énergie, très en dehors de son domaine théorique de validité (exercice 12.5.4).

12.4.2 Diffusion d'un paquet d'ondes

Un deuxième point qu'il est nécessaire de justifier est l'utilisation d'un formalisme stationnaire, alors que la diffusion d'une particule est fondamentalement un processus dépendant du temps ; il nous faut donc étudier la diffusion d'un paquet d'ondes. Nous supposons le paquet d'ondes centré autour d'une impulsion $\hbar\vec{k}_0$ avec une dispersion $\Delta k \ll k_0$, et nous supposons aussi que la dimension $\Delta r \sim 1/\Delta k$ du paquet d'ondes est très petite par rapport aux distances caractéristiques de l'expérience, par exemple la distance cible-détecteur. Le paquet d'ondes libre s'écrit sous une forme qui généralise (9.41) à trois dimensions

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) \exp \left[i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t \right] \quad (12.66)$$

avec $\omega_k = \hbar k^2/(2m)$, la fréquence moyenne étant $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$. Nous avons montré au § 9.1.4 que si la condition $(\Delta k)^2 \hbar t/m \ll 1$ était vérifiée (ce qui est pratiquement toujours le cas) on pouvait alors négliger l'étalement du paquet d'ondes et (12.66) sous la forme (9.48) généralisée à trois dimensions (avec les changements de notations $\vec{k} \rightarrow k_0$, $v_g \rightarrow v_0$) devient

$$\varphi(\vec{r}, t) \simeq e^{i\omega_0 t} \varphi(\vec{r} - \vec{v}_0 t, t = 0) \quad (12.67)$$

où la vitesse de groupe $\vec{v}_0 = \hbar \vec{k}_0/m$. Ceci implique que $|\varphi(\vec{r}, t)|$ est négligeable si $|\vec{r} - \vec{v}_0 t| \gg \Delta r$, c'est-à-dire si $|\vec{r} - \vec{v}_0 t|$ est grand par rapport à l'extension Δr du paquet d'ondes. La fonction d'onde dépendant du temps $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t)$ en présence du potentiel $V(\vec{r})$ s'obtient en remplaçant dans l'expression (12.66) du paquet d'ondes l'onde plane $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$. L'expression ainsi obtenue est en effet solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps en présence du potentiel $V(\vec{r})$, avec un comportement d'onde sphérique sortante. Décomposons la fonction d'onde $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t)$ en une partie libre et une partie diffusée

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) + \psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t)$$

Lorsque le paquet d'ondes est loin de la cible, on peut remplacer $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ par sa forme asymptotique (12.63)

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

et donc

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) f(k\hat{r}, \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\omega_k t}$$

Supposons que $f(k\hat{r}, \vec{k})$ varie suffisamment lentement¹⁴ avec $\vec{k}$. Dans ces conditions

$$f(k\hat{r}, \vec{k}) \simeq f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)$$

et la partie diffusée est

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} A(\vec{k}) \exp[i(kr - \omega_k t)] \quad (12.68)$$

On remarque ensuite que

$$k = [(\vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0))^2]^{1/2} = k_0 + \hat{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right) = \hat{k}_0 \cdot \vec{k} + O\left(\frac{(\Delta k)^2}{k_0}\right)$$

Comme le temps caractéristique $t \sim r/v_0 = mr/(\hbar k_0)$

$$\frac{(\Delta k)^2 r}{k_0} \simeq \frac{(\Delta k)^2 \hbar t}{m} \ll 1$$

14. En présence d'une résonance, il peut arriver que cette condition ne soit pas vérifiée.

et on peut remplacer kr dans (12.68) par $r\hat{k}_0 \cdot \vec{k}$ ce qui donne

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi(r\hat{k}_0, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi[(r - v_0t)\hat{k}_0, 0] e^{i\omega_0 t}$$

Lorsque t est grand et négatif, $|(r - v_0t)| \gg \Delta r$ et comme $\varphi(r', 0)$ est négligeable pour $r' \gg \Delta r$, $\psi_{\text{diff}} \rightarrow 0$ et le paquet d'ondes tend vers un paquet d'ondes libre : tant que le paquet d'ondes n'a pas de recouvrement avec le potentiel, ψ_{diff} est pratiquement nul

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t)$$

Le paquet d'ondes interagit avec la cible pour $t \sim 0$ et lorsque $t \rightarrow +\infty$

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t) \simeq \frac{f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)}{r} \varphi[(r - v_0t)\hat{k}_0, 0] e^{i\omega_0 t}$$

On retrouve le paquet d'ondes dans une direction différente de la direction initiale, modulé par l'amplitude de diffusion $f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)$ et se propageant radialement avec une vitesse v_0 .

Nous pouvons maintenant calculer la probabilité dp de déclenchement d'un détecteur de surface $dS = r^2 d\Omega$ placé dans la direction $\vec{r}$. Comme le courant à l'instant t est $v_0 |\psi_{\text{diff}}|^2 \hat{r}$, la probabilité de déclencher le détecteur est

$$\begin{aligned} dp &= v_0 r^2 d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{\text{diff}}(\vec{r}, t)|^2 dt \\ &= v_0 d\Omega |f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0t)\hat{k}_0, 0]|^2 dt \end{aligned}$$

Par ailleurs, la probabilité pour que la particule incidente traverse une surface unité perpendiculaire au faisceau incident est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi[(r - v_0t)\hat{k}_0, 0]|^2 dt$$

et on déduit de la définition (12.1) de la section efficace

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k_0\hat{r}, \vec{k}_0)|^2 = |f(\Omega)|^2 \quad (12.69)$$

ce qui complète la justification de (12.12).

12.5 Exercices

12.5.1 Pic de Gamow

1. On se propose d'évaluer la section efficace de la réaction



à l'intérieur d'une étoile où règne une température de l'ordre de 10^7 K. Cette réaction particulière a été choisie pour fixer les idées, mais ce qui suit s'applique à toute réaction nucléaire dans une étoile. Montrer que l'énergie cinétique des noyaux incidents ${}^2\text{H}$ et ${}^3\text{H}$ est de l'ordre du keV. Pourquoi les atomes sont-ils complètement ionisés ? En physique nucléaire la relation suivante est souvent utile : dans un système d'unités où $\hbar = c = 1$, la relation entre le fermi et le MeV s'écrit

$$1 \text{ fm}^{-1} \simeq 200 \text{ MeV}$$

Vérifier cette relation. Le potentiel $V(r)$ entre les deux noyaux incidents est le potentiel coulombien répulsif $V(r) = e^2/r$ pour $r > R$ et un potentiel nucléaire attractif pour $r \leq R$, avec $R \simeq 1 \text{ fm}$. Montrer que e^2/R est très grand par rapport à l'énergie cinétique E des noyaux incidents.

2. Montrer qu'en physique classique les deux noyaux ne peuvent pas s'approcher à une distance plus faible que $r_0 = e^2/E$, et la réaction nucléaire (12.70) ne peut se produire. En physique quantique, la réaction est possible grâce à l'effet tunnel. En utilisant (9.106), montrer que la probabilité d'effet tunnel est

$$p_T(E) = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_0} dr \left[2\mu \left(\frac{e^2}{r} - E \right) \right]^{1/2} \right)$$

où μ est la masse réduite : $E = \mu v^2/2$, v étant la vitesse relative des deux noyaux. Montrer que $\mu \simeq (6/5)m_p$, où la masse du proton $m_p \simeq 940 \text{ MeV}/c^2$. Pour calculer $p_T(E)$, on pourra faire le changement de variables

$$u^2 = \frac{e^2}{r} - E$$

On donne l'intégrale indéfinie

$$\int \frac{u^2 du}{(u^2 + a^2)^2} = \frac{1}{2a} \tan^{-1} \frac{u}{a} - \frac{u}{2(u^2 + a^2)}$$

En déduire

$$p_T(E) \simeq \exp \left(-\sqrt{\frac{E}{E_B}} \right) \quad E_B = 2\pi^2 \alpha^2 \mu c^2$$

avec $\alpha = e^2/(\hbar c) \simeq 1/137$. Donner la valeur de E_B en MeV.

3. Justifier la forme approchée de la section efficace de la réaction (12.70)

$$\sigma(E) \sim \frac{4\pi}{k^2} p_T(E)$$

en admettant que la réaction nucléaire se produit dès que les noyaux entrent en contact ; k est le vecteur d'onde $E = \hbar^2 k^2 / (2\mu)$.

4. D'après (12.1), le nombre de réactions nucléaires (12.70) par unité de temps est $n_i n_c v \sigma(v)$, où n_i et n_c sont les densités de noyaux incidents et de noyaux cibles. Cependant les vitesses n'ont pas une valeur fixée, et pour obtenir le taux de réaction dans l'étoile, il faut moyenner sur la distribution de Maxwell des vitesses

$$p_M(v) = \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T} \right)$$

La quantité physiquement pertinente est la moyenne $\langle v \sigma \rangle$. En intégrant sur les angles, montrer que

$$\langle v \sigma \rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v^3 \sigma(v) \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T} \right)$$

En déduire, en effectuant le changement de variables $v \rightarrow E$

$$\langle v \sigma \rangle = \frac{16\pi^2 \hbar^2}{\mu^3} \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dE e^{-E/(k_B T)} e^{-\sqrt{E_B/E}} \quad (12.71)$$

Montrer que l'intégrand dans (12.72) exhibe un pic aigu pour une valeur $E = E_0$ de l'énergie, avec

$$E_0 = \left(\frac{1}{2} k_B T \sqrt{E_B} \right)^{2/3}$$

et que la largeur ΔE de ce pic est donnée par

$$\Delta E \propto E_B^{1/6} (k_B T)^{5/6}$$

Ce pic est appelé *pic de Gamow*, et il détermine l'énergie E_0 pour laquelle la réaction (12.70) a une probabilité maximale : le taux de réaction dans l'étoile est contrôlé par E_0 . Estimer numériquement la position du pic et sa largeur.

12.5.2 Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène

1. On considère dans un premier temps la diffusion d'une particule par les deux noyaux 1 et 2 supposés différents d'une molécule diatomique, sans tenir compte du spin. Le centre de la molécule est situé à l'origine des coordonnées, et le détecteur à une distance r de la cible. Les noyaux 1 et 2 sont situés aux points $\vec{R}/2$ et $-\vec{R}/2$, avec $R \ll r$. Montrer que l'amplitude de diffusion par la molécule est

$$f = a_1 \exp \left(-\frac{i}{2} \vec{q} \cdot \vec{R} \right) + a_2 \exp \left(\frac{i}{2} \vec{q} \cdot \vec{R} \right)$$

où $\vec{k}$ est le vecteur d'onde des particules incidentes, $\vec{k}' = k\hat{r}$, $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k})$ le transfert d'impulsion, tandis que a_1 et a_2 sont les longueurs de diffusion sur les noyaux 1 et 2. Tracer la section efficace en fonction de l'angle θ entre $\vec{k}'$ et $\vec{k}$ lorsque $qR \sim 1$.

2. On se place dans le cas de la diffusion de neutrons par une molécule d'hydrogène en tenant compte du spin du neutron et des protons. On suppose l'énergie suffisamment basse pour que $qR \ll 1$. Quelle doit être la valeur de l'énergie en eV pour que cette condition soit réalisée ? Si les neutrons sont produits dans un réacteur, à quelle température doivent-ils être refroidis (cf. § 1.4.2) ? On définit le spin total $\vec{S}$ de la molécule

$$\hbar\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

$\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ sont les matrices de Pauli décrivant les spins des deux protons. Montrer que l'amplitude de diffusion s'écrit dans l'espace des spins en fonction des longueurs de diffusion a_s et a_t

$$\hat{f} = \frac{1}{2}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{2}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{S})$$

3. Si l'on traite l'interaction neutron-proton au moyen d'un potentiel effectif (12.41), la constante g est fixée par les caractéristiques du potentiel. En déduire qu'en raison d'un effet de masse réduite, on doit utiliser $4a/3$ comme longueur de diffusion sur les protons liés dans une molécule d'hydrogène, si a est la longueur de diffusion d'un neutron sur un proton libre. La section efficace est donc à multiplier par un facteur $16/9$: c'est l'effet de liaison chimique. Cet effet de masse réduite est présent pourvu que l'énergie du neutron soit suffisamment faible pour ne pas pouvoir exciter les niveaux de vibration de la molécule.

4. La molécule d'hydrogène peut exister dans deux états de spin : le parahydrogène de spin zéro et l'orthohydrogène de spin un. Quelle est la section efficace totale neutron-parahydrogène ? Est-elle sensible au signe de a_s ?

5. Calculer la section efficace totale neutron-orthohydrogène en supposant la molécule non polarisée. Suggestion : démontrer l'identité

$$\text{Tr}(A \otimes B)^2 = (\text{Tr } A^2)(\text{Tr } B^2)$$

12.5.3 Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton

L'objectif de cet exercice est de relier les propriétés des états liés et des résonances à l'amplitude de diffusion. On se limitera à l'onde s . On négligera

la différence de masse neutron-proton et on définira $M \simeq m_p \simeq m_n$: la masse réduite est donc $M/2$. On néglige tout effet lié au spin.

1. Soit $u(r)$ la fonction d'onde radiale (réelle) d'un état lié, en l'occurrence le deutéron. Elle est caractérisée par son comportement asymptotique et sa normalisation N

$$r \rightarrow \infty : \quad u(r) \simeq N e^{-\kappa r} \quad \text{avec} \quad \int_0^\infty u^2(r) dr = 1$$

Montrer que dans le cas du puits sphérique de la figure 12.4, de portée R et de profondeur V_0

$$N^2 = \frac{2\kappa k'^2 e^{2\kappa R}}{(\kappa^2 + k'^2)(1 + \kappa R)}$$

avec $\hbar k' = \sqrt{M(V_0 - B)}$, $\hbar \kappa = \sqrt{MB}$, B étant l'énergie de liaison. Tracer qualitativement $u(r)$.

2. Soit $g(k, r)$ une solution de l'équation radiale se comportant asymptotiquement comme

$$r \rightarrow \infty : \quad g(k, r) \propto e^{-ikr} \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{MB}}{\hbar}$$

Montrer que la fonction d'onde $u(k, r)$ est donnée par

$$u(k, r) = g(-k, r)g(k) - g(k, -r)g(-k) \quad g(k) = g(k, r=0)$$

et que l'élément de matrice S , $S(k)$ vaut

$$S(k) = e^{2i\delta(k)} = \frac{g(k)}{g(-k)}$$

3. On prolonge analytiquement $g(k, r)$ à des valeurs complexes de k . Montrer que

$$g^*(k, r) = g(-k^*, r) \quad S^*(k^*) = \frac{1}{S(k)} = S(-k)$$

4. Calculer $g(k)$ et $S(k)$ pour le puits sphérique et montrer que $g(k)$ est une fonction entière de k (c'est-à-dire analytique pour tout k).

5. On peut prouver que pour un potentiel décroissant plus vite que $\exp(-\mu r)$ lorsque $r \rightarrow \infty$, $g(k)$ est analytique dans le demi-plan $\text{Im } k < \mu/2$, et on admettra ce résultat dans la suite de l'exercice. Montrer que si $S(k)$ a un pôle sur l'axe imaginaire, $k = i\kappa$, $0 < \kappa < \mu/2$, alors ce pôle correspond à un état lié du potentiel. Montrer que si $S(k)$ a un pôle à $k = h - ib$, $|b| < \mu/2$, alors nécessairement $b > 0$.

6. Le cas du pôle à $k = h - ib$, $b > 0$, est celui d'une *résonance*. Montrer qu'un choix pour $S(k)$ satisfaisant aux conditions de la question 3 est

$$S(k) = \frac{(k - h - ib)(k + h - ib)}{(k - h + ib)(k + h + ib)} \simeq \frac{k - h - ib}{k - h + ib} \quad \text{pour } k \sim h$$

Supposant $b \ll h$, déterminer le comportement du déphasage $\delta(k)$ en fonction de k en montrant que

$$\cot \delta = \frac{h - k}{b}$$

En déduire que δ passe par $\pi/2$ pour $k = h$ et que la section efficace se met sous la forme dite de *Breit-Wigner*

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{ME} \frac{\hbar^2\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4} \quad (12.72)$$

Relier E_0 et Γ à b et h . Montrer que $h = 0$ correspond à un état virtuel.

7. Démontrer la relation

$$\left[u' \frac{\partial u}{\partial k} - u \frac{\partial u'}{\partial k} \right]_0^r = 2k \int_0^r u^2(r') dr' \quad u' = \frac{\partial u}{\partial r}$$

En étudiant cette relation pour $r \rightarrow 0$ et $r \rightarrow \infty$, montrer qu'au voisinage du pôle $k = i\kappa$

$$S(k) \simeq \frac{-iN^2}{k - i\kappa}$$

8. Montrer que la fonction

$$k \cot \delta(k) = i\kappa \frac{g(k) + g(-k)}{g(k) - g(-k)}$$

est analytique en k au voisinage de $k = 0$, tend vers une constante pour $k \rightarrow 0$ et est une fonction paire de k . En déduire que l'on peut écrire

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4)$$

Démontrer les relations

$$r_0 = \frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1}{\kappa a} \right) \quad N^2 = \frac{2\kappa}{1 - \kappa r_0}$$

qui relient les paramètres (κ, N) du deuteron aux caractéristiques (a, r_0) de la diffusion de basse énergie. Calculer r_0 sachant que $B = 2.22$ MeV et $a = 5.40$ fm, et comparer au résultat expérimental $r_0 = 1.73$ fm.

12.5.4 Approximation de Born

1. Calculer l'amplitude de diffusion $f_B(\vec{q})$, $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$, à l'approximation de Born lorsque le potentiel a la forme dite de Yukawa

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

En déduire $d\sigma/d\Omega$ et σ_{tot} .

2. Examiner la limite $\mu \rightarrow 0$ avec $V_0/\mu \rightarrow e^2 = \text{cste}$: le potentiel de Yukawa tend vers le potentiel coulombien $V(r) = e^2/r$. Montrer que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{16E^2 \sin^4 \theta/2} \quad (12.73)$$

où $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ est l'énergie incidente. Ce résultat a été obtenu par Rutherford en utilisant un raisonnement de mécanique classique (la mécanique quantique n'existait pas encore !), et il est appelé *section efficace de Rutherford*. C'est aussi le résultat obtenu par un traitement rigoureux du potentiel coulombien en mécanique quantique. Il est remarquable que l'approximation de Born, dont la validité est plus que douteuse dans ce cas, donne le résultat correct pour la section efficace (mais non pour l'amplitude $f(\theta)$).

12.5.5 Optique neutronique

1. *Diffusion par une lame mince*. On considère un faisceau de neutrons de basse énergie de vecteur d'onde k dans le vide, qui traverse une lame très mince d'épaisseur δ perpendiculairement à cette lame ; dans un premier temps on néglige les effets liés au spin. Les neutrons sont détectés après leur passage dans la lame en un point d'ordonnée z sur l'axe Oz perpendiculaire à la lame, l'origine O étant choisie au centre de la lame. Si un neutron est diffusé par un noyau de la lame situé à une distance s de O , montrer que l'amplitude de probabilité pour observer le neutron diffusé en z est

$$\varphi_s = -\frac{a}{r} e^{ikr} \quad r = \sqrt{s^2 + z^2}$$

où a est la longueur de diffusion. L'amplitude de probabilité pour trouver un neutron en z est la somme de l'onde incidente $\exp(ikz)$ et de l'onde diffusée par la lame

$$\varphi(z) = e^{ikz} - a \sum \frac{e^{ikr}}{r}$$

où la somme porte sur tous les noyaux de la lame ; en déduire

$$\varphi(z) = e^{ikz} - 2\pi a \rho \delta \left. \frac{e^{ikr}}{ik} \right|_z^\infty$$

où ρ est la densité volumique de noyaux. La limite $r \rightarrow \infty$ donne un résultat nul si l'on moyenne sur les oscillations et on en déduit

$$\varphi(z) = \left(1 - 2i\pi \frac{a\rho\delta}{k}\right) e^{ikz}$$

2. Indice de réfraction. Lorsque les neutrons traversent la lame, celle-ci se comporte comme un milieu d'indice de réfraction n , qui, comme en optique, transforme le vecteur d'onde $k \rightarrow k' = nk$ ou de façon équivalente la longueur d'onde $\lambda \rightarrow \lambda' = \lambda/n$. En comparant avec le résultat de la question 1 lorsque $(n-1)k\delta \ll 1$, déduire

$$n = 1 - \frac{2\pi a\rho}{k^2} = 1 - \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi}$$

Lorsque $n < 1$, un faisceau de neutrons arrivant en incidence quasi-rasante sur la surface plane d'un cristal peut subir une réflexion totale (la différence d'indice entre le vide et l'air est négligeable) : si l'angle d'incidence est $(\pi/2 - \theta)$, $\theta \ll 1$, montrer que l'incidence critique est

$$\theta_c = \lambda \left(\frac{\rho a}{\pi}\right)^{1/2}$$

Estimer numériquement θ_c pour des valeurs typiques : $\lambda = 1 \text{ nm}$, $\rho = 10^{29} \text{ m}^{-3}$ et $a = 10 \text{ fm}$. La propriété de réflexion totale est utilisée pour construire des guides de neutrons, qui font partie des instruments de l'optique neutronique.

3. Effets de spin : noyaux de spin 1/2. Dans les questions suivantes, on étudie les effets liés au spin des neutrons et des noyaux. Reprenant les résultats de l'exercice 3.3.9 et utilisant (12.46), montrer que les amplitudes f_a , f_b et f_c de cet exercice sont données en fonction des longueurs de diffusion triplet a_t et singlet a_s pour des noyaux de spin 1/2 par

$$f_a = -\frac{1}{2}(a_t + a_s) \quad f_b = -\frac{1}{2}(a_t - a_s) \quad f_c = -a_t$$

Montrer que l'intensité diffusée par le cristal est

$$\mathcal{I} = \frac{1}{16}(3a_t + a_s)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{3\mathcal{N}}{16}(a_t - a_s)^2$$

où $\mathcal{N}$ est le nombre de noyaux diffuseurs. Le premier terme de $\mathcal{I}$ correspond à une diffusion cohérente et le second à une diffusion incohérente (exercice 1.6.8). On définit une section efficace cohérente et une section efficace incohérente en intégrant $\mathcal{I}$ sur les angles

$$\sigma_{\text{coh}} = \frac{\pi}{4}(3a_t + a_s)^2 \quad \sigma_{\text{inc}} = \frac{3\pi}{4}(a_t - a_s)^2$$

Dans le cas de la diffusion par l'hydrogène, $a_t = 5.4$ fm et $a_s = -23.7$ fm. Évaluer numériquement σ_{coh} et σ_{inc} et montrer que $\sigma_{\text{inc}} \gg \sigma_{\text{coh}}$. Cette propriété est particulière à l'hydrogène, car en général les deux sections efficaces sont du même ordre de grandeur. Montrer que la longueur de diffusion à utiliser dans le calcul de l'indice de réfraction est celle définie par la diffusion cohérente

$$a_{\text{eff}} = \frac{3}{4} a_t + \frac{1}{4} a_s$$

Quelle est l'interprétation physique des poids 3/4 et 1/4 ? Quel est le signe de a_{eff} pour l'hydrogène ? Peut-on obtenir une réflexion totale des neutrons sur de l'hydrogène liquide ?

4. *Diffusion par des noyaux de spin j .* On suppose que les noyaux diffuseurs ont un spin j ; soit

$$\vec{I} = \vec{J} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

le moment angulaire total du système noyau+neutron, $\hbar\vec{\sigma}/2$ étant l'opérateur de spin du neutron. Montrer que l'amplitude de diffusion noyau+neutron s'écrit dans l'espace des spins en fonction de deux longueurs a et b

$$-\hat{f} = a + \frac{b}{\hbar} (\vec{\sigma} \cdot \vec{J})$$

Soit $a_+ = a_{j+1/2}$ et $a_- = a_{j-1/2}$ les deux longueurs de diffusion correspondant aux diffusions dans les états de moment angulaire total $i = j \pm 1/2$. Montrer que

$$a_+ = a + bj \qquad a_- = a - b(j+1)$$

et inversement

$$a = \frac{1}{2j+1} [(j+1)a_+ + ja_-] \qquad b = \frac{1}{2j+1} [a_+ - a_-]$$

5. *Diffusions cohérente et incohérente.* Si les noyaux et les neutrons ne sont pas polarisés, quelles sont les probabilités que la diffusion ait lieu dans les états $i_+ = j + 1/2$ et $i_- = j - 1/2$? En utilisant les résultats de l'exercice 1.6.8, montrer que les sections efficaces cohérente et incohérente sont données par

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{coh}} &= \frac{4\pi}{(2j+1)^2} [(j+1)a_+ + ja_-]^2 = 4\pi a^2 \\ \sigma_{\text{inc}} &= \frac{4\pi j(j+1)}{(2j+1)^2} [a_+ - a_-]^2 = 4\pi j(j+1)b^2 \end{aligned}$$

Vérifier que l'on retrouve bien les résultats de la question 3 lorsque $j = 1/2$.

12.5.6 Section efficace d'absorption de neutrinos

L'objectif de l'exercice est de calculer la section efficace d'absorption des neutrinos par des neutrons

$$\bar{\nu} + p \rightarrow n + e^+$$

à partir de la vie moyenne du neutron, qui se désintègre suivant la réaction (1.2)

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$$

Ce calcul est possible car l'interaction responsable des deux phénomènes est la même, l'interaction faible, et les deux processus peuvent être reliés. L'élément de matrice de transition pour le calcul de la vie moyenne du neutron peut s'écrire

$$T_{fi} = G_F \mathcal{M}_{fi} \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle$$

où les fonctions d'onde de l'état initial et de l'état final sont des ondes planes normalisées dans un volume $\mathcal{V}$ et de la forme

$$\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

G_F est la constante de Fermi, ou constante de couplage des interactions faibles, $\mathcal{M}_{fi}$ un élément de matrice sans dimensions dépendant des spins¹⁵. On appelle $E_0 = (m_n - m_p)c^2 \simeq 1.2 \text{ MeV}$ l'énergie disponible dans la désintégration (on peut prendre à une excellente approximation $m_\nu = 0$). Soit $\vec{p}_n = 0$ (supposant le neutron immobile), $\vec{P} = \vec{p}_p$, $\vec{p} = \vec{p}_e$ et $\vec{q} = \vec{p}_\nu$ les impulsions dans l'état initial et dans l'état final, $T = P^2/(2m_p)$, E et cq l'énergie cinétique du proton et l'énergie totale de l'électron et du neutrino. La conservation de l'énergie-impulsion s'écrit

$$\vec{P} + \vec{p} + \vec{q} = 0 \quad T + E + cq = E_0$$

Montrer que l'on peut négliger T : $T \ll E, cq$. Soit $d\Gamma/dE$ la probabilité de désintégration du neutron, l'électron ayant une énergie finale E . On peut montrer qu'il n'y a pas de corrélations entre l'impulsion de l'électron et celle du neutrino. Montrer que dans ces conditions la probabilité de transition s'écrit en fonction de la densité d'états $\mathcal{D}$ de l'électron et du neutrino

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma}{dE} &= \frac{2\pi}{\hbar} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \mathcal{V}^{-2} \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_\nu(E - E_0) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{pE}{c^2} \right] \left[\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(E_0 - E)^2}{c^3} \right] \end{aligned}$$

15. $\mathcal{M}_{fi}$ dépend aussi de deux constantes sans dimensions de l'ordre de 1, $g_V = 1$, la constante de couplage vectorielle, et $g_A = 1.25$, la constante de couplage axiale.

$\langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle$ représente la somme sur les spins finaux et la moyenne sur les spins initiaux du module carré de l'élément de matrice de spin. Pour obtenir la vie moyenne $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur E . L'intégrale

$$I(E_0) = \int_{m_e c^2}^{E_0} dE E (E_0 - E)^2 \sqrt{E^2 - m_e^2 c^2}$$

peut se calculer exactement, mais nous nous contenterons d'une approximation ultrarelativiste négligeant la masse de l'électron

$$I(E_0) \simeq \int_0^{E_0} dE E^2 (E_0 - E)^2 = \frac{E_0^5}{30}$$

En déduire l'expression de la vie moyenne

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma \sim \frac{G_F^2 E_0^5}{60\pi^3 \hbar (\hbar c)^6}$$

Quelle est la dimension de $G_F/(\hbar c)^3$? Estimer G_F à partir de la vie moyenne $\tau \simeq 900$ s et comparer avec la valeur précise

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 1.17 \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$$

2. Montrer que la section efficace différentielle d'absorption des neutrinos par les neutrons est donnée par

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar c} G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \frac{Ep}{(2\pi\hbar)^3 c^2}$$

où E est l'énergie du positron e^+ et en déduire

$$\sigma_{\text{tot}} \sim \frac{1}{\pi} \left[\frac{G_F}{(\hbar c)^3} \right]^2 (\hbar c)^2 E^2$$

Vérifier que σ_{tot} a bien les dimensions d'une surface. Estimer numériquement σ_{tot} pour des neutrinos solaires de 8 MeV, et en déduire que le libre parcours moyen des neutrinos solaires dans la Terre se mesure en années-lumière.

3. La théorie de Fermi utilisée dans cet exercice donne une section efficace isotrope : l'interaction a lieu uniquement dans l'onde s , $l = 0$. En utilisant (12.51), montrer que le résultat obtenu pour la section efficace d'absorption ne peut pas être valable à très haute énergie et estimer l'énergie au-delà de laquelle la théorie de Fermi doit être modifiée. Cette modification est connue, c'est la théorie électro-faible de Glashow-Salam-Weinberg, composante du modèle standard qui unifie interactions faibles et électromagnétiques, et où la constante de Fermi est reliée à la charge de l'électron et à la masse des bosons $W^\pm$ et Z^0 : $G_F \sim e^2/M_W^2$.

12.6 Bibliographie

On trouvera un exposé de la théorie des collisions plus complet que celui de ce chapitre dans Merzbacher [1970], chapitres 11 et 19, Messiah [1959], chapitres X et XIX ou Landau et Lifschitz [1966], chapitres XVII et XVIII. La théorie de la diffusion à basse énergie est exposée par H. Bethe et Ph. Morrison, *Elementary Nuclear Theory*, John Wiley (1956), chapitres IX à XI, ou dans le cours 1998/99 du Collège de France de C. Cohen-Tannoudji.

Chapitre 13

Particules identiques

13.1 Bosons et fermions

13.1.1 Symétrie ou antisymétrie du vecteur d'état

Considérons un état $|\Psi\rangle$ de deux particules différentes, par exemple un atome d'oxygène ^{16}O et un atome d'oxygène ^{18}O dans leur état fondamental, et soit $|a_1\rangle$ et $|b_2\rangle$ deux états de la particule 1 et de la particule 2 respectivement. Les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont par exemple des états propres des opérateurs $\vec{P}, \vec{J}, \dots$ étiquetés par l'impulsion $\vec{p}$ de l'atome, la composante j_z de son spin¹,...

$$|a\rangle = |\vec{p}, j_z, \dots\rangle \quad |b\rangle = |\vec{p}', j'_z, \dots\rangle$$

On notera $|a_1 \otimes b_2\rangle$ l'état à deux particules où la particule 1 (^{16}O) est dans l'état $|a\rangle$ et la particule 2 (^{18}O) dans l'état $|b\rangle$ par exemple², $|a_1 \otimes b_2\rangle = |\vec{p}_1 \otimes \vec{p}'_2\rangle$. Pour la clarté de la discussion, on peut supposer que les particules ont interagi dans un passé lointain et qu'elles se trouvent dans un état intriqué $|\Psi\rangle$. Les tests effectués sur les particules 1 et 2 sont bien individualisés, les deux tests s'effectuant dans des régions d'espace très éloignées, comme dans les expériences discutées au § 6.2.1. Deux détecteurs D_1 et D_2 permettent de déterminer $\vec{p}, j_z, \dots$ pour chacune des deux particules : D_1 détecte l'atome de ^{16}O avec une impulsion $\vec{p}$, D_2 détecte l'atome de ^{18}O avec une impulsion $\vec{p}'$ (figure 13.1a), ce qui permet d'effectuer un test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ sur l'état $|\Psi\rangle$. La probabilité pour que l'état $|\Psi\rangle$ passe le test $|a_1 \otimes b_2\rangle$ est

$$p_{\Psi \rightarrow [a_1, b_2]} = |\langle a_1 \otimes b_2 | \Psi \rangle|^2 \quad (13.1)$$

1. Les atomes de ^{16}O et de ^{18}O ont un spin 2 (état 3P_2) et l'état fondamental est cinq fois dégénéré. Si nécessaire, on peut lever cette dégénérescence par effet Zeeman dans un champ magnétique.

2. La notation n'est pas idéale. Elle veut dire que la particule 1 est dans l'état d'impulsion $\vec{p}$, et non $\vec{p}_1$! Cette notation ne présente aucune ambiguïté dans le cas de deux spins : $|+1 \otimes -2\rangle$, comme dans (13.14).

On peut aussi envisager la configuration inverse et mesurer la probabilité que le détecteur D_1 enregistre l'atome de ^{18}O et D_2 l'atome de ^{16}O (figure 13.1b), qui est *différente* de (13.1) : cette probabilité correspond au test $|a_2 \otimes b_1\rangle$, où l'atome de ^{18}O a une impulsion $\vec{p}$ et l'atome de ^{16}O une impulsion $\vec{p}'$, et sauf cas particulier

$$p_{\Psi \rightarrow [a_2, b_1]} \neq p_{\Psi \rightarrow [a_1, b_2]}$$

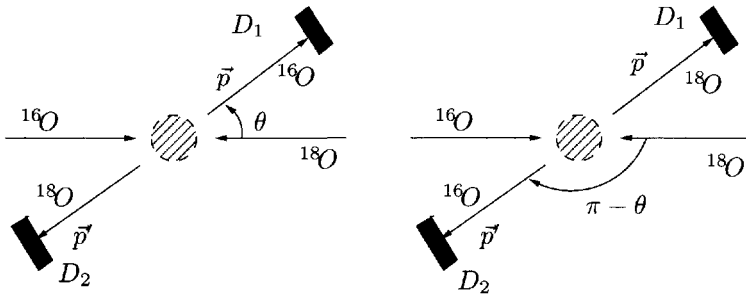


FIG. 13.1 – Diffusion $^{16}\text{O} - ^{18}\text{O}$. (a) Angle de diffusion θ . (b) Angle de diffusion $(\pi - \theta)$.

Supposons maintenant les particules 1 et 2 identiques, deux atomes d' ^{16}O par exemple. Si les énergies mises en jeu dans l'interaction entre les deux particules sont de quelques eV, rien ne distingue *a priori* ce cas du cas précédent, car les interactions $^{16}\text{O} - ^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O} - ^{16}\text{O}$ sont strictement identiques. Ce n'est qu'à des énergies de l'ordre du MeV que des différences dues aux noyaux pourraient se faire sentir, et pourtant *les deux cas vont différer de façon radicale*, même à basse énergie. Lorsque les deux particules sont identiques, cela n'a plus de sens de parler du test $|a_1 \otimes b_2\rangle$: il peut être commode de numérotter formellement les deux particules, et donc de parler des tests $|a_1 \otimes b_2\rangle$ ou $|a_1 \otimes b_2\rangle$, mais une telle numérotation n'a pas de signification physique. Il n'est pas physiquement acceptable d'écrire un état de la forme $|a_1 \otimes b_2\rangle$ (sauf éventuellement si $a \equiv b$), car on ne peut pas affirmer que la particule 1 est dans l'état a et la particule 2 dans l'état b ou l'inverse, étant donné que l'on ne peut pas les distinguer. Le problème se pose donc de la définition correcte de l'état $|a \otimes b\rangle$. Cet état doit être physiquement identique à $|b \otimes a\rangle$ et ne peut en différer que par une phase, qui dépend éventuellement de a et de b

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle &= e^{i\theta_{ab}} |b \otimes a\rangle \\ |b \otimes a\rangle &= e^{i\theta_{ba}} |a \otimes b\rangle \end{aligned} \quad (13.2)$$

On en déduit³

$$e^{i\theta_{ba}} e^{i\theta_{ab}} = 1 \quad (13.3)$$

Définissons les nouveaux vecteurs

$$\begin{aligned} |a \otimes b\rangle' &= e^{i\theta_{ab}/2} |a \otimes b\rangle \\ |b \otimes a\rangle' &= e^{i\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle \end{aligned} \quad (13.4)$$

Nous avons au lieu de (13.2)

$$\begin{aligned} |b \otimes a\rangle' &= e^{-i\theta_{ba}/2} |b \otimes a\rangle = e^{i\theta_{ba}/2} |a \otimes b\rangle \\ &= e^{i(\theta_{ab} + \theta_{ba})/2} |a \otimes b\rangle' = \pm |a \otimes b\rangle' \end{aligned}$$

car d'après (13.3)

$$e^{i(\theta_{ab} + \theta_{ba})/2} = \pm 1$$

On peut donc toujours choisir les phases des vecteurs $|a \otimes b\rangle$ et $|b \otimes a\rangle$ de telle sorte que ces vecteurs soient symétriques ou antisymétriques dans la permutation $a \leftrightarrow b$

$$\bullet \text{ symétrique} \quad |a \otimes b\rangle = + |b \otimes a\rangle \quad (13.5)$$

$$\bullet \text{ antisymétrique} \quad |a \otimes b\rangle = - |b \otimes a\rangle \quad (13.6)$$

Il en résulte que les amplitudes $\langle a \otimes b | \Psi \rangle$ sont aussi, soit symétriques, soit antisymétriques

$$\bullet \text{ symétrique} \quad \langle a \otimes b | \Psi \rangle = \langle b \otimes a | \Psi \rangle \quad (13.7)$$

$$\bullet \text{ antisymétrique} \quad \langle a \otimes b | \Psi \rangle = - \langle b \otimes a | \Psi \rangle \quad (13.8)$$

Cette propriété de symétrie ou d'antisymétrie est caractéristique du couple de particules identiques considérées. Elle ne peut pas dépendre des états $|\Psi\rangle$ ou $|a \otimes b\rangle$. Supposons en effet que pour le même couple de particules on ait une amplitude symétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle$ et une amplitude antisymétrique si $|\Psi\rangle = |\Phi_2\rangle$

$$\begin{aligned} \langle a \otimes b | \Phi_1 \rangle &= \langle b \otimes a | \Phi_1 \rangle \\ \langle a \otimes b | \Phi_2 \rangle &= - \langle b \otimes a | \Phi_2 \rangle \end{aligned}$$

La linéarité de la mécanique quantique nous permet aussi de choisir un état combinaison linéaire de $|\Phi_1\rangle$ et de $|\Phi_2\rangle$

$$|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1 | \Psi \rangle + |\Phi_2\rangle \langle \Phi_2 | \Psi \rangle$$

3. On admet souvent que θ_{ab} est indépendant de a et b : $\theta_{ab} = \theta_{ba} = \theta$, et il en découle directement $\exp(2i\theta) = 1$, $\exp(i\theta) = \pm 1$. Les phases sont cruciales lorsque l'on cherche à réaliser physiquement l'opération de permutation en déplaçant les particules dans l'espace pour échanger leurs positions, ce qui n'est pas *a priori* la même chose que de permuter leurs numéros. À trois dimensions les deux opérations sont équivalentes, mais à deux dimensions le facteur de phase autorise l'existence de « statistiques fractionnaires », les particules correspondantes étant appelées *anyons*.

où l'on a supposé $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = 0$. On aurait alors

$$\langle a \otimes b | \Psi \rangle = \langle a \otimes b | \Phi_1 \rangle \langle \Phi_1 | \Psi \rangle + \langle a \otimes b | \Phi_2 \rangle \langle \Phi_2 | \Psi \rangle$$

Cette amplitude de probabilité n'est ni symétrique, ni antisymétrique dans l'échange $a \leftrightarrow b$ et elle est physiquement inacceptable. Il est nécessaire que $\langle \Phi_1 | \Psi \rangle = 0$, ou que $\langle \Phi_2 | \Psi \rangle = 0$, pour tous les états $|\Psi\rangle$. Si $\langle \Phi_2 | \Psi \rangle = 0$, les transitions $\Psi \rightarrow \Phi_2$ sont interdites et $|\Phi_2\rangle$ n'appartient pas à l'espace des états à deux particules. En ce qui concerne leur comportement dans l'échange de deux états, il existe donc deux classes de particules quantiques identiques, et deux seulement, correspondant à deux types d'amplitudes :

- les amplitudes symétriques (13.7) : les particules sont alors appelées des *bosons* ;
- les amplitudes antisymétriques (13.8) : les particules sont alors appelées des *fermions*.

Le caractère bosonique ou fermionique d'une espèce de particules est appelé sa *statistique*. Ainsi que nous allons le voir dans un instant, les électrons sont un exemple de fermions, et on dit aussi que les électrons *obéissent à la statistique de Fermi (ou Fermi-Dirac)*, tandis que les photons, qui sont des bosons, *obéissent à la statistique de Bose (ou Bose-Einstein)*.

Nous avons déjà remarqué qu'il est commode de numéroter artificiellement les particules : 1, 2, ... La relation (13.7) implique alors que le vecteur d'état d'un système de deux bosons doit être symétrique dans un échange des numérotations $1 \leftrightarrow 2$

$$|a \otimes b\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a_1 \otimes b_2\rangle + |a_2 \otimes b_1\rangle \right) \quad (13.9)$$

et (13.8) que celui de deux fermions doit être antisymétrique

$$|a \otimes b\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a_1 \otimes b_2\rangle - |a_2 \otimes b_1\rangle \right) \quad (13.10)$$

Si les particules n'ont pas de degrés de liberté internes (spin, etc.), l'état des particules peut être caractérisé par leur fonction d'onde $\varphi_a(\vec{r}) = \langle \vec{r} | a \rangle$ et $\varphi_b(\vec{r}) = \langle \vec{r} | b \rangle$, et la fonction d'onde du système est dans le cas de bosons

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_a(\vec{r}_1) \varphi_b(\vec{r}_2) + \varphi_a(\vec{r}_2) \varphi_b(\vec{r}_1) \right) \quad (13.11)$$

et dans le cas de fermions

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_a(\vec{r}_1) \varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_a(\vec{r}_2) \varphi_b(\vec{r}_1) \right) \quad (13.12)$$

Nous venons d'écrire le vecteur d'état, ou la fonction d'onde, de deux particules identiques sans spin *indépendantes*. En présence d'interactions,

la fonction d'onde sera une combinaison linéaire de fonctions d'onde du type (13.11) ou (13.12), mais même en l'absence d'interactions, le vecteur d'état, ou la fonction d'onde, ne sont pas de simples produits tensoriels.

L'espace des états pour un couple de particules identiques n'est donc pas l'intégralité de $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, mais seulement le sous-espace formé des vecteurs symétriques dans un échange des numérotations s'il s'agit de deux bosons, et antisymétriques s'il s'agit de deux fermions. Ces deux espaces sont invariants par l'évolution temporelle, car le hamiltonien doit être invariant dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$: $[H, P_{12}] = 0$, où P_{12} est l'opérateur de permutation des numéros.

Ces résultats se généralisent immédiatement au cas d'un nombre arbitraire N de bosons ou de fermions identiques : la fonction d'onde de N bosons (fermions) doit être symétrique (antisymétrique) dans l'échange de deux quelconques des numéros de deux particules. Dans le cas des fermions, la fonction d'onde s'écrit donc comme un déterminant. Écrivons explicitement le cas de trois fermions identiques indépendants

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 | a \otimes b \otimes c \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\vec{r}_1) & \varphi_a(\vec{r}_2) & \varphi_a(\vec{r}_3) \\ \varphi_b(\vec{r}_1) & \varphi_b(\vec{r}_2) & \varphi_b(\vec{r}_3) \\ \varphi_c(\vec{r}_1) & \varphi_c(\vec{r}_2) & \varphi_c(\vec{r}_3) \end{vmatrix} \quad (13.13)$$

Dans le cas de fermions, si par exemple $\varphi_a = \varphi_b$, la fonction d'onde s'annule. Ceci est appelé *principe de Pauli*, bien que ce « principe » découle en fait de l'antisymétrisation. On énonce souvent ce principe sous la forme : *il est impossible de mettre deux fermions ou plus dans le même état*. Cet énoncé suppose implicitement que l'on ait affaire à des fermions indépendants.

13.1.2 Spin et statistique

Dans les équations (13.11) à (13.13), nous avons supposé les particules sans degré de liberté interne, et en particulier sans spin. Lorsque l'on tient compte des degrés de liberté internes, l'échange des numérotations doit se faire sur *tous* les nombres quantiques caractérisant l'état des particules. En particulier, on doit effectuer cet échange sur les degrés de liberté de spin. Il est remarquable que spin et statistique soient intimement reliés par le *théorème spin-statistique*, qui énonce que les particules de spin entier ($0, \hbar, 2\hbar, \dots$) sont des bosons, tandis que les particules de spin demi-entier ($\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$) sont des fermions. Ainsi les photons, particules de spin 1, sont des bosons, et les électrons, neutrinos, protons et neutrons, particules de spin $1/2$, sont des fermions. La preuve du théorème spin-statistique utilise la théorie quantique relativiste, ou théorie des champs quantifiés relativistes, mais elle nécessite un arsenal mathématique important et la maîtrise de concepts difficiles ; il n'est malheureusement pas possible d'en donner ici une idée, même intuitive. Il est

frustrant de constater qu'il n'existe aucun argument élémentaire justifiant ce résultat fondamental, dont l'énoncé est pourtant tout à fait simple⁴.

Après cet énoncé fondamental, revenons sur les vecteurs d'état (13.11) et (13.12). Comme nous venons de le voir, des bosons de spin zéro peuvent parfaitement exister (mésons π , atomes d' ^4He , ...) et un vecteur d'état du type (13.11) représente sans problème l'état d'un système de deux bosons de spin zéro. En revanche, pour un système de deux fermions, le spin ne peut être nul et on doit en tenir compte dans l'écriture du vecteur d'état. Le cas le plus courant et le plus important en pratique est celui des fermions de spin $1/2$: électrons, protons, neutrons, ... Suivant les résultats du § 10.6.1, on peut former avec deux spins $1/2$ soit un moment angulaire un, dont les trois vecteurs de base $|jm\rangle$, notés collectivement χ_t , sont

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |+_1 \otimes +_2\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_1 \otimes -_2\rangle + |-_1 \otimes +_2\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |-_1 \otimes -_2\rangle \end{aligned} \quad (13.14)$$

et un moment angulaire zéro

$$\chi_s = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_1 \otimes -_2\rangle - |-_1 \otimes +_2\rangle) \quad (13.15)$$

Il est évident sur (13.14) et (13.15) que les trois états χ_t sont symétriques dans l'échange $1 \leftrightarrow 2$ et χ_s antisymétrique dans ce même échange. Rappelons que ces états sont appelés respectivement triplet et singulet, d'où la notation χ_t et χ_s . Les vecteurs d'état totalement antisymétriques d'un système de deux fermions sont donc, soit antisymétriques d'espace et symétriques de spin

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)) \chi_t \quad (13.16)$$

soit au contraire symétriques d'espace et antisymétriques de spin

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | a \otimes b \rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) + \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)) \chi_s \quad (13.17)$$

Comme application, supposons les deux fermions de spin $1/2$ dans un état de moment angulaire orbital l dans le référentiel de leur centre de masse. La partie angulaire de la fonction d'onde de la particule relative est l'harmonique sphérique $Y_l^m(\hat{r})$, où $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ est le vecteur joignant les positions des deux fermions. L'échange des numérotations est équivalent à $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, soit aussi $\hat{r} \rightarrow -\hat{r}$. Or, d'après (10.71), la parité des harmoniques sphériques est $(-1)^l$

$$Y_l^m(-\hat{r}) = (-1)^l Y_l^m(\hat{r}) \quad (13.18)$$

4. On peut faire le rapprochement avec l'énoncé très élémentaire du théorème de Fermat et la complexité de la preuve d'A. Wiles.

Dans le référentiel de leur centre de masse, un système de deux fermions de spin $1/2$ se trouvera dans un état de moment angulaire orbital l pair si son état de spin est singulet, et dans un état de moment angulaire orbital l impair si son état de spin est triplet. On note habituellement S le spin total, L le moment angulaire orbital total, J le moment angulaire total et $^{2S+1}L_J$ l'état des deux fermions. Par exemple un état 3P_2 correspond à $S = 1, L = 1, J = 2$ et un état 1D_2 à $S = 0, L = 2, J = 2$. Le cas de deux bosons de spin zéro est encore plus simple : seuls les états de moment angulaire orbital pair sont permis.

Les propriétés de symétrie du vecteur d'état de deux spins $1/2$ se généralisent au cas de l'addition de deux spins $\vec{S}$ quelconques, pour former un spin total $\vec{F} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2, 0 \leq F \leq 2s$. La propriété de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan⁵

$$C_{j_2 j_1; m_2 m_1}^{j m} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C_{j_1 j_2; m_1 m_2}^{j m}$$

montre que les états de spin total $2F, 2F - 2, \dots$ sont symétriques dans l'échange des numérotations, tandis que les états $2F - 1, 2F - 3, \dots$ sont antisymétriques dans cet échange. Comme application, montrons que ces propriétés de symétrie affectent le spectre de rotation d'une molécule diatomique homonucléaire, c'est-à-dire une molécule dont les deux noyaux sont strictement identiques, appartenant au même isotope, par exemple la molécule $^1H-^1H = H_2$, par opposition à la molécule hétéronucléaire $^1H-^2H$ ou $H-D$, où un proton est remplacé par un deutéron $D = ^2H$: le deutéron est un isotope de l'hydrogène, noyau atomique formé d'un proton et d'un neutron. La dynamique des noyaux est celle d'un rotateur sphérique (cf. § 10.3.1) dont les fonctions d'onde sont les harmoniques sphériques $Y_j^m(\hat{r})$, où $\vec{r}$ est le vecteur joignant les deux noyaux. Les niveaux de rotation, ou le spectre de rotation, sont donnés en fonction de j par (10.54)

$$E_j = \frac{j(j+1)}{2I}$$

où I est le moment d'inertie.

Si l'on choisit l'origine des coordonnées au milieu de la droite joignant les noyaux, le hamiltonien H des électrons est invariant dans l'opération parité $\Pi, \vec{r} \rightarrow -\vec{r} : [\Pi, H] = 0$ (cf. § 8.3.3). On peut donc diagonaliser simultanément Π et H . Soit $|\psi_{el}\rangle$ un vecteur propre de l'état électronique commun à H et Π . Comme $\Pi^2 = I$, les valeurs propres de Π sont $\pm 1, \Pi|\psi_{el}\rangle = \pm|\psi\rangle$ (cf. (8.52)). Dans la majorité des cas, et en particulier dans celui de la molécule d'hydrogène, l'état fondamental électronique correspond au signe $+$, ce que nous allons admettre dans la discussion qui suit. L'opération d'échange des numérotations des deux noyaux correspond à $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, et dans cette opération la fonction d'onde des noyaux est multipliée par la parité de

5. Voir par exemple Cohen-Tannoudji *et al.*[1973], complément B_X.

l'harmonique sphérique, $(-1)^j$. Si les deux noyaux ont un spin s , le moment angulaire total F va de zéro à $2s$. Le vecteur d'état *total* de la molécule doit être symétrique (antisymétrique) dans l'échange des numérotations des deux noyaux si ces noyaux sont des bosons (fermions), et lorsque les deux noyaux sont des bosons (s entier), deux cas sont possibles :

- F pair et j pair ;
- F impair et j impair.

Le résultat est identique lorsque les deux noyaux sont des fermions (s demi-entier). La situation inverse prévaut bien sûr dans les rares cas où la parité de $|\psi_{el}\rangle$ est négative. Dans le cas de la molécule d'hydrogène, le spin des protons est $s = 1/2$, et $F = 0$ (para-hydrogène) ou $F = 1$ (ortho-hydrogène). La valeur de F fixe la parité de j : $F = 1$ correspond à des valeurs de j impaires, et $F = 0$ à des valeurs de j paires. Il n'y a pas de restrictions sur j dans le cas de la molécule $H - D$.

Une autre conséquence importante de la statistique est l'apparition de *forces d'échange*, qui sont en particulier responsables du magnétisme. Le magnétisme macroscopique correspond à l'alignement d'un nombre macroscopique de spins électroniques dans une même direction, et cet alignement construit un moment magnétique macroscopique. Si l'alignement est produit par un champ magnétique externe et disparaît en l'absence de ce champ, on a affaire à un matériau *paramagnétique*. Si l'alignement persiste en l'absence de champ, on a affaire à un matériau *ferromagnétique* (fer, cobalt, nickel...). L'aimantation disparaît au-dessus d'une certaine température, appelée *température de Curie* T_C . Il existe un autre type de magnétisme, l'*antiferromagnétisme*, où les spins sont ordonnés, mais l'ordre est alterné, de sorte que l'aimantation est nulle. Cet ordre antiferromagnétique disparaît aussi au-dessus d'une certaine température, la *température de Néel* T_N . Pour obtenir un matériau ferromagnétique ou antiferromagnétique, il faut une interaction entre les spins suffisamment intense pour les aligner ou construire un ordre alterné selon le cas. En l'absence d'une telle interaction, l'agitation thermique tend à favoriser un état où l'orientation des spins est aléatoire et l'aimantation nulle. L'origine de cette interaction ne réside pas dans le couplage entre les moments magnétiques des électrons : un calcul simple d'ordre de grandeur montre que la température de Curie, qui est de l'ordre de 10^3 K, ne dépasserait pas 1 K dans cette hypothèse. L'interaction à l'origine du magnétisme provient de la répulsion coulombienne entre électrons combinée avec l'antisymétrisation du vecteur d'état, qui a comme conséquence une compétition énergie cinétique-énergie potentielle (coulombienne). Considérons une paire d'électrons : si les électrons sont dans un état triplet de spin, leur fonction d'onde spatiale est antisymétrique, ce qui entraîne une répulsion coulombienne faible, car la fonction d'onde s'annule lorsque les deux électrons sont voisins. En revanche, l'énergie cinétique est importante, car la fonction d'onde doit varier rapidement au voisinage du

point où elle s'annule. La situation inverse prévaut lorsque l'état de spin est singulet. S'il est plus intéressant de minimiser l'énergie potentielle, les deux électrons auront tendance à aligner leur spins, ce qui implique une interaction de type ferromagnétique. Si au contraire l'énergie cinétique l'emporte, on obtiendra une interaction de type antiferromagnétique avec un ordre alterné des spins.

Le théorème spin-statistique a pour conséquence que des particules de spin zéro comme ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$, ... sont des bosons, mais ces particules sont composées, et une question intéressante est de vérifier la cohérence avec le théorème spin-statistique, à partir de leur composition en constituants élémentaires (ou plus élémentaires). Naturellement, la question n'a de sens que si la particule reste intacte dans les réactions qu'on lui fait éventuellement subir, par exemple parce que les énergies mises en jeu ne sont pas suffisantes pour la dissocier en ses constituants. Plutôt que de raisonner en toute généralité, nous allons nous contenter d'examiner un cas particulier, celui du deutéron. Soit $|A\rangle$ le vecteur d'état du deutéron et $\langle a \otimes b | A \rangle = \langle ab | A \rangle$ l'amplitude pour trouver dans le deutéron le proton dans l'état $|a\rangle$ et le neutron dans l'état $|b\rangle$, où nous avons supprimé le produit tensoriel pour alléger les notations. Introduisons un second deutéron $|A_2\rangle$ en supposant pour l'instant qu'un nombre quantique distingue le proton et le neutron de ce noyau de ceux du précédent. En nous inspirant de la chromodynamique quantique, imaginons que nous puissions attribuer une couleur aux protons et aux neutrons, verte pour le premier noyau et rouge pour le second. Nous aurons donc une seconde amplitude $\langle a'_2 b'_2 | A'_2 \rangle$, le prime indiquant qu'il s'agit de neutrons et de protons rouges, tandis que l'amplitude correspondante pour le proton et le neutron verts est notée $\langle a_1 b_1 | A_1 \rangle$. Formons l'état à deux deutérons $|A_1 A'_2\rangle$. L'amplitude pour trouver le proton et le neutron verts dans les états a_1 et b_1 , le proton et le neutron rouges dans les états a'_2 et b'_2 est, en utilisant les propriétés du produit tensoriel

$$\langle a_1 b_1 a'_2 b'_2 | A_1 A'_2 \rangle = \langle a_1 b_1 | A_1 \rangle \langle a'_2 b'_2 | A'_2 \rangle$$

Mais on ne peut pas peindre les protons et les neutrons en rouge ou en vert, et il nous faut revenir au cas réel, où l'amplitude est $\langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle$. Comme le proton et le neutron sont des fermions, cette amplitude doit être *antisymétrique* dans les échanges de numérotation $a_1 \leftrightarrow a_2$ et $b_1 \leftrightarrow b_2$

$$\begin{aligned} \langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle &= \langle a_1 b_1 | A_1 \rangle \langle a_2 b_2 | A_2 \rangle - \langle a_2 b_1 | A_1 \rangle \langle a_1 b_2 | A_2 \rangle \\ &\quad - \langle a_1 b_2 | A_1 \rangle \langle a_2 b_1 | A_2 \rangle + \langle a_2 b_2 | A_1 \rangle \langle a_1 b_1 | A_2 \rangle \end{aligned}$$

Cette amplitude est *symétrique* dans l'échange $A_1 \leftrightarrow A_2$

$$\langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_1 A_2 \rangle = \langle a_1 b_1 a_2 b_2 | A_2 A_1 \rangle \quad (13.19)$$

et le deutéron est donc un boson. De façon générale, une particule composée d'un nombre pair de fermions est un boson, et c'est un fermion si ce nombre est impair. Ainsi le proton, formé de trois quarks de spin $1/2$, est un fermion,

tandis que le méson π , formé d'un quark et d'un antiquark, est un boson. L'atome d' ${}^4\text{He}$, formé de deux protons, deux neutrons et deux électrons, est un boson, alors que son isotope, l'atome d' ${}^3\text{He}$, formé de deux protons, un neutron et deux électrons, est un fermion, ce qui induit des comportements totalement différents de ces deux isotopes à basse température. On remarque que ces résultats sont compatibles avec le théorème spin-statistique, puisque qu'avec un nombre impair de particules de spin demi-entier on ne peut former qu'une particule de spin demi-entier, un fermion, tandis qu'avec un nombre pair de particules de spin demi-entier on ne peut former qu'une particule de spin entier, un boson.

13.2 Diffusion de particules identiques

Revenons à la figure 13.1 que l'on peut interpréter comme décrivant la diffusion ${}^{16}\text{O}$ - ${}^{18}\text{O}$ dans le référentiel du centre de masse. Nous supposons la dégénérescence du niveau fondamental levée par un champ magnétique : les atomes sont dans le niveau Zeeman le plus bas (cf. § 14.2.3). Soit $f(\theta)$ l'amplitude de diffusion d'un angle θ de la figure 13.1a : les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle θ . L'amplitude de diffusion de la figure 13.1b est alors $f(\pi - \theta)$: les deux atomes d'oxygène sont déviés d'un angle $\pi - \theta$. Supposons, ce qui est le cas le plus plausible, que les détecteurs D_1 et D_2 ne fassent pas la distinction entre les deux isotopes. Le taux de comptage du détecteur D_1 (et aussi celui de D_2) sera alors proportionnel à

$$p(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \quad (13.20)$$

Ce résultat donne aussi la section efficace différentielle (12.12) $d\sigma/d\Omega$. Dans (13.20) nous avons additionné les *probabilités*, car les états finaux [${}^{16}\text{O}$ dans D_1 , ${}^{18}\text{O}$ dans D_2] et [${}^{16}\text{O}$ dans D_2 , ${}^{18}\text{O}$ dans D_1] sont des états finaux *différents* en principe, même si en pratique les détecteurs sont incapables de faire la différence. Dans le calcul de la section efficace totale, il faut prendre garde à ne pas faire de double comptage en multipliant (12.2) par un facteur $1/2$ (ou, de façon équivalente, en restreignant l'intervalle d'intégration sur θ à $0 \leq \theta \leq \pi/2$)

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int d\Omega (|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2) \quad (13.21)$$

Passons maintenant au cas de la diffusion ${}^{16}\text{O}$ - ${}^{16}\text{O}$. Bien que les interactions de physique atomique entre les deux isotopes soient strictement identiques, les résultats sont totalement différents. En effet, les processus de la figure 13.1a et 13.1b ne peuvent plus être distingués, *même en principe*, et il faut donc ajouter les *amplitudes*. L'amplitude de diffusion $f(\theta)$ est définie en attribuant formellement des numéros aux deux particules, les particules 1 et 2 étant déviées de l'angle θ . L'échange des deux atomes correspond à $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. L'amplitude totale s'obtient en additionnant $f(\theta)$ et $f(\pi - \theta)$, le signe + étant

imposé par la symétrie dans l'échange $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$. Au lieu de (13.20), la probabilité de déclencher D_1 est

$$p(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (13.22)$$

et la section efficace totale vaut

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \int d\Omega |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (13.23)$$

L'addition d'amplitudes suggère que la section efficace différentielle pourra exhiber des interférences, et c'est ce qui est effectivement observé dans de nombreux exemples. On remarque que, compte tenu de la parité des polynômes de Legendre $P_l(-u) = (-1)^l P_l(u)$, seules les valeurs de l paires interviennent dans la décomposition en ondes partielle de

$$f_{\text{tot}}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) \quad f_{\text{tot}}(\theta) = f_{\text{tot}}(\pi - \theta)$$

L'exemple ci-dessus est celui la diffusion de deux bosons de spin zéro. La discussion est un peu plus complexe lorsque les particules ont un spin. Limitons-nous à la diffusion de deux fermions identiques de spin 1/2, par exemple deux neutrons. Dans ce cas on peut définir comme au § 12.2.4 une amplitude de diffusion $\hat{f}(\theta)$ qui est une matrice 4×4 dans l'espace produit tensoriel des deux spins. Si $\mathcal{P}_t$ et $\mathcal{P}_s$ sont les projecteurs sur les états triplet et singulet, et si la diffusion ne change pas le spin total, on pourra écrire

$$\hat{f}(\theta) = [f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)]\mathcal{P}_s + [f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)]\mathcal{P}_t \quad (13.24)$$

ce qui assure l'antisymétrie espace+spin de l'amplitude. Si l'on développe suivant (12.16) $[f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)]$ et $[f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)]$ en ondes partielles, la diffusion aura lieu dans les ondes $l = 0, 2, \dots$ (ou ondes $s, d, \dots$) pour des neutrons dans l'état singulet, et dans dans les ondes $l = 1, 3, \dots$ (ou ondes $p, f, \dots$) pour des neutrons dans l'état triplet. La section efficace s'obtient comme au § 12.2.4. Si la polarisation initiale de l'ensemble des deux neutrons est notée α et la polarisation finale β , la section efficace différentielle sera

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = |\langle \beta | \hat{f}(\theta) | \alpha \rangle|^2 \quad (13.25)$$

Si on ne mesure pas la polarisation des neutrons finaux, on doit sommer sur β et si l'état initial est une superposition incohérente d'états de polarisation $|\alpha\rangle$ avec une probabilité p_α

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{f}^\dagger | \beta \rangle \langle \beta | \hat{f} | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \alpha | \hat{f}^\dagger \hat{f} | \alpha \rangle = \text{Tr}(\rho_{\text{in}} \hat{f}^\dagger \hat{f}) \end{aligned} \quad (13.26)$$

où ρ_{in} est l'opérateur densité initial des états de spin

$$\rho_{\text{in}} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

Lorsque les neutrons initiaux ne sont pas polarisés, $\rho_{\text{in}} = I/4$ et

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{non pol}} &= \frac{1}{4} \text{Tr}(\hat{f}^{\dagger} \hat{f}) = \frac{1}{4} \text{Tr} \left[(f_s^{\text{tot}*} \mathcal{P}_s + f_t^{\text{tot}*} \mathcal{P}_t) (f_s^{\text{tot}} \mathcal{P}_s + f_t^{\text{tot}} \mathcal{P}_t) \right] \\ &= \frac{1}{4} \text{Tr} \left[|f_s^{\text{tot}}|^2 \mathcal{P}_s + |f_t^{\text{tot}}|^2 \mathcal{P}_t \right] = \frac{1}{4} |f_s^{\text{tot}}|^2 + \frac{3}{4} |f_t^{\text{tot}}|^2 \\ &= \frac{1}{4} |f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4} |f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)|^2 \end{aligned} \quad (13.27)$$

Les poids 1/4 et 3/4 sont bien sûr reliés au fait qu'il y a un seul état singulet et trois états triplets. La section efficace totale s'obtient par (13.23). Lorsque la diffusion est indépendante du spin, $f_s = f_t = f$, ce qui est le cas de la diffusion coulombienne de deux particules chargées, par exemple deux électrons (exercice 12.5.4)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{non pol}} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}[f(\theta) f^*(\pi - \theta)]$$

et le terme d'interférences est réduit d'un facteur deux par rapport à ce que l'on obtiendrait dans le cas (interdit par le théorème spin-statistique !) de la diffusion de deux fermions de spin zéro.

13.3 États collectifs

La statistique a une influence déterminante sur le comportement d'un système de N particules identiques, $N \gg 1$, que l'on peut appeler le comportement collectif d'un tel système. Commençons par les fermions, en examinant le cas de N fermions sans interactions. On peut par exemple supposer que ces N fermions indépendants se trouvent dans un puits de potentiel dont les niveaux d'énergie ε_{ℓ} pour une particule individuelle sont étiquetés par un indice ℓ . L'indice ℓ représente la *totalité* des nombres quantiques nécessaires pour spécifier l'état ℓ : impulsion, spin... Il peut parfaitement arriver, et c'est même le cas général, que plusieurs niveaux ε_{ℓ} correspondent à la même valeur de l'énergie : autrement dit, les niveaux d'énergie du hamiltonien d'une particule dans le puits de potentiel sont dégénérés. Essayons de construire le niveau d'énergie fondamental de l'ensemble des N fermions. Comme on peut mettre au maximum un fermion dans un état ε_{ℓ} , l'état de plus basse énergie est obtenu en remplissant les niveaux un à un à partir du niveau le plus bas, jusqu'au moment où les N fermions ont trouvé leur place dans un niveau (figure 13.2). L'état de plus grande énergie $\varepsilon_{\ell, \text{max}}$ que l'on a dû utiliser pour placer tous les fermions est

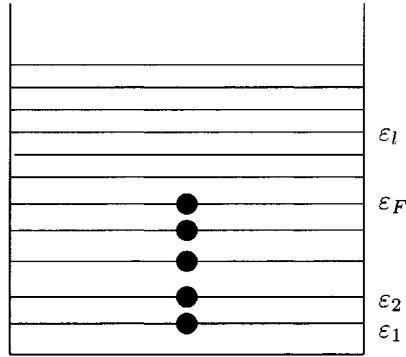


FIG. 13.2 – Remplissage des niveaux du gaz de Fermi.

appelé *niveau de Fermi* et noté ε_F ⁶. Prenons comme puits de potentiel une boîte cubique de volume $\mathcal{V}$: un ensemble de fermions dans une boîte est appelé *gaz de Fermi*. L'état quantique d'un fermion est alors spécifié par la donnée de son impulsion $\vec{p}$ et de la composante m_z de son spin : $\ell = \{\vec{p}, m_z\}$. En l'absence de champ extérieur, l'énergie est purement cinétique, $\varepsilon = \vec{p}^2/(2m)$ et indépendante de m_z . À chaque valeur de $\vec{p}$ correspondent $2s + 1$ états de même énergie et la somme sur ℓ devient d'après (9.52)

$$\sum_{\ell} = \sum_{\vec{p}, m_z} = (2s + 1) \sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{(2s + 1)\mathcal{V}}{h^3} \int d^3p \quad (13.28)$$

À l'énergie de Fermi ε_F correspond une *impulsion de Fermi* p_F

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \text{ ou en général } \varepsilon_F = \sqrt{p_F^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (13.29)$$

souvent appelée *moment de Fermi*. Comme l'énergie est une fonction croissante de p , tous les états $\{\vec{p}, m_z\}$ tels que $p \leq p_F$ auront un nombre d'occupation égal à un. Il est maintenant immédiat de calculer l'impulsion de Fermi

$$N = \frac{(2s + 1)\mathcal{V}}{h^3} \int_{p \leq p_F} d^3p = \frac{(2s + 1)\mathcal{V}}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 \quad (13.30)$$

Si $n = N/\mathcal{V}$ est la densité de fermions

$$p_F = \left[\frac{6\pi^2}{2s + 1} \right]^{1/3} \hbar n^{1/3} \quad (13.31)$$

6. Du point de vue de la thermodynamique, le système de fermions que nous considérons est un système à température nulle $T = 0$. Le niveau de Fermi est aussi le potentiel chimique, puisqu'à température nulle le potentiel chimique est l'énergie nécessaire pour ajouter une particule. À température non nulle, la probabilité d'occupation des niveaux au-dessus du niveau de Fermi est différente de zéro, et le potentiel chimique ne coïncide plus avec le niveau de Fermi.

Cette équation est valable aussi bien dans le régime non relativiste que relativiste. La sphère de rayon p_F est appelée *sphère de Fermi* et sa surface la *surface de Fermi*. Ces notions se généralisent au cas de la physique du solide, où l'on n'a plus la symétrie sphérique, mais une symétrie déterminée par le réseau cristallin : la surface de Fermi, qui acquiert alors une forme plus compliquée que celle d'une sphère, est un objet fondamental dans l'étude des propriétés électromagnétiques des métaux. On déduit de (13.31) l'énergie de Fermi dans le cas non relativiste où $\varepsilon = p^2/(2m)$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \left[\frac{6\pi^2}{2s+1} \right]^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} \quad (13.32)$$

Le cas usuel est $s = 1/2$. L'énergie de Fermi est l'énergie caractéristique d'un système de N fermions dans une boîte de volume $\mathcal{V}$.

Il est utile de donner un ordre de grandeur dans le cas particulier le plus important de gaz de Fermi, celui des électrons de conduction dans un métal. Prenons l'exemple du cuivre, dont la masse volumique est 8.9 g.cm^{-3} et la masse atomique 63.5, ce qui correspond à une densité n de 8.4×10^{28} atomes par m^3 . Le cuivre ayant un électron de conduction par atome, ce chiffre donne aussi la densité d'électrons ; reportant cette valeur dans (13.32) avec $s = 1/2$, on trouve pour le niveau de Fermi $\varepsilon_F \simeq 7.0 \text{ eV}$. Ceci est un ordre de grandeur typique pour les électrons de conduction dans un métal : l'énergie de Fermi est de quelques eV.

Calculons maintenant l'énergie du gaz de Fermi. D'après (13.28) avec $s = 1/2$, on trouve pour l'énergie du gaz

$$E = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{p_F} p^2 dp \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \quad (13.33)$$

où nous avons utilisé l'expression (13.30) de p_F en fonction de N dans le cas $s = 1/2$. Une autre expression intéressante est celle de l'énergie par particule E/N

$$\frac{E}{N} = (3\pi^2)^{2/3} \frac{3\hbar^2}{10m} n^{2/3} \quad (13.34)$$

L'énergie cinétique moyenne d'une particule augmente comme $n^{2/3}$. Dans le cas d'un gaz d'électrons, l'énergie potentielle moyenne est de l'ordre de e^2/d , où $d \propto n^{-1/3}$ est la distance moyenne entre deux électrons. L'énergie potentielle moyenne par particule est donc $\propto n^{1/3}$, et plus un gaz de Fermi est dense, plus l'énergie cinétique $\propto n^{2/3}$ l'emporte sur l'énergie potentielle. Ce résultat est à l'opposé de celui d'un gaz classique, et contrairement à un gaz classique, un gaz de Fermi est d'autant plus proche d'un gaz parfait que sa densité est grande !

On peut donner une image intuitive du gaz de Fermi, en remarquant que la dispersion Δp sur l'impulsion est de l'ordre de p_F , tandis que l'ordre de

grandeur de la dispersion sur la position est $\mathcal{V}^{1/3}$. On tire donc de (13.31)

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar N^{1/3} \quad (13.35)$$

En raison du principe de Pauli, le $\hbar$ de l'inégalité de Heisenberg est transformée en $\hbar N^{1/3}$.

Le cas des bosons est plus complexe que celui des fermions. Il faut distinguer le cas où le nombre de bosons est variable (photons, phonons, ...) et celui où il est fixé (atomes d'hélium). Dans ce dernier cas, à température strictement nulle, on obtient l'état fondamental en mettant tous les bosons dans l'état ε_ℓ le plus bas. Le problème consiste à montrer que si la température n'est pas nulle, une fraction *finie* des bosons reste dans cet état fondamental : c'est ce que l'on appelle la *condensation de Bose-Einstein*. Cette condensation ne se produit pas dans tous les cas de figure, par exemple elle ne se produit pas dans une boîte à deux dimensions, mais on montre qu'elle se produit dans une boîte à trois dimensions. La température où se produit la condensation de Bose-Einstein peut être estimée en écrivant que les deux longueurs caractéristiques du problème, la longueur d'onde thermique λ_T et la distance moyenne entre bosons $d \propto n^{-1/3}$ sont du même ordre de grandeur : $\lambda_T \sim n^{-1/3}$. Un calcul exact confirme cette estimation. Avec⁷

$$\lambda_T = \left(\frac{h}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \quad (13.36)$$

la température de la condensation est donnée par $\lambda_T = 2.61 n^{-1/3}$. La condensation de Bose-Einstein a été observée récemment sur des gaz d'alcalins à très basse température et sur l'hydrogène polarisé. Nous renvoyons le lecteur intéressé à la bibliographie.

13.4 Exercices

13.4.1 Particule Ω^- et couleur

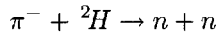
L'hypéron Ω^- (masse 1675 MeV/c²) est une particule de spin 3/2, composée de trois quarks étranges de spin 1/2. Le modèle des quarks requiert que la fonction d'onde spatiale ne s'annule pas. En déduire que les trois quarks ne peuvent pas être tous identiques. Au début des années 1970, cette observation a été un des arguments en faveur de l'introduction du concept de « couleur » (à l'origine de la chromodynamique quantique) permettant de distinguer entre les quarks : les trois quarks du Ω^- ont des couleurs différentes.

7. λ_T est la longueur d'onde de de Broglie d'une particule dont l'énergie $\sim kT$. Le facteur 2π est conventionnel.

13.4.2 Parité du méson π

1. Si l'on envoie des mésons π^- de basse énergie sur une cible de deutérium, ces mésons peuvent être capturés et former des états liés analogues à ceux d'un atome d'hydrogène. Donner l'expression de l'énergie de ces états liés méson π -deutérium, sachant que la masse du méson π est de l'ordre de $139 \text{ MeV}/c^2$ et celle du deutérium de $1875 \text{ MeV}/c^2$. Le méson π est capturé dans un état de nombre quantique principal n élevé et termine sa cascade radiative dans le niveau fondamental⁸ $1s$ après émission de photons. Montrer que l'énergie de ces photons se place dans le domaine des rayons X.

2. Une fois arrivé dans l'état $1s$, le méson π subit une interaction nucléaire qui entraîne la réaction



avec deux neutrons n dans l'état final. Sachant que le spin du noyau de deutérium (ou deutéron) est 1 et que celui du méson π est nul, quel est l'état de moment angulaire initial de la réaction ? Montrer que les deux neutrons finaux ne peuvent être que dans l'état de moment angulaire orbital total $L = 1$ et de spin total $S = 1$, c'est-à-dire dans l'état 3P_1 . Si l'on attribue par convention une parité positive aux nucléons (protons et neutrons), et sachant que le moment angulaire orbital du deutéron est nul⁹ (le deutéron est un état 3S_1), en déduire que le méson π a une parité négative. La parité est conservée dans la réaction.

13.4.3 Fermions de spin 1/2 dans un puits infini

On considère deux fermions identiques de spin 1/2 dans un puits de potentiel cubique infini de côté L . Si ces deux fermions sont sans interaction entre eux, quelles sont les valeurs propres possibles de l'énergie totale et les fonctions d'onde correspondantes (espace et spin) ? On suppose que les deux fermions interagissent via un potentiel

$$V = V_0 \delta^{(3)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

où $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ sont les positions des deux fermions. Montrer que les états triplets ne sont pas affectés par ce potentiel.

13.4.4 Désintégration du positronium

Le positronium est un état lié électron-positron ($e^- - e^+$) ; le positron est une particule ayant la même masse m_e que l'électron et une charge opposée $-q_e$.

8. La réaction nucléaire a aussi une petite probabilité de se produire dans un état ns , $n \neq 1$, c'est-à-dire pour des états où la probabilité de présence est non nulle à l'origine, mais cela ne change pas l'argument.

9. Le deutéron a aussi une petite composante d'onde d , et donc une composante 3D_1 , mais cela n'affecte en rien l'argument.

1. On ne tient pas compte dans cette question du spin des deux particules. Sachant que les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène pour un proton infiniment lourd sont de la forme ($e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$)

$$E_n = \frac{E_0}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

quels sont les niveaux d'énergie du positronium ?

2. L'électron et le positron ont un spin $1/2$. L'état de plus basse énergie, ou état fondamental, $n = 1$, a un moment angulaire orbital $l = 0$ (onde s). Quelles sont les valeurs possibles du moment angulaire total j du positronium dans cet état $n = 1$?

3. Le positronium dans son état fondamental se désintègre en deux¹⁰ photons

$$e^- + e^+ \rightarrow 2\gamma$$

Dans le référentiel où le positronium est au repos, les deux photons partent avec des impulsions opposées. On choisit pour axe Oz la direction de l'impulsion de l'un des photons. En utilisant la conservation du moment angulaire, montrer que les deux photons ont nécessairement la même polarisation circulaire, soit droite, soit gauche. Suggestion : dessiner un schéma de la désintégration.

4. En examinant l'effet d'une rotation de π autour de l'axe Oy et en tenant compte de l'identité des deux photons, montrer que seul un des deux états de moment angulaire j du positronium peut se désintégrer en deux photons¹¹.

5. Soit Π l'opérateur parité, qui agit sur l'état $|A\rangle$ d'une particule A suivant $\Pi|A\rangle = \eta_A|A\rangle$, où η_A est la parité de A . On peut montrer que $\eta_e - \eta_{e^+} = -1$. En déduire que la parité de l'état fondamental du positronium est -1 . On peut écrire les deux états possibles pour les deux photons sous la forme

$$(i) \quad |\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|DD\rangle + |GG\rangle) \quad (ii) \quad |\Phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|DD\rangle - |GG\rangle)$$

où $|D\rangle$ et $|G\rangle$ représentent des états de polarisation circulaire droite et gauche. Lequel des états (i) ou (ii) est obtenu dans la désintégration du positronium¹², sachant que la parité est conservée ?

13.5 Bibliographie

Un excellent exposé sur les particules identiques, accompagné de nombreuses illustrations, est celui de Lévy-Leblond et Balibar [1984],

10. La désintégration $e^- + e^+ \rightarrow \gamma$ est interdite par la conservation de l'énergie-impulsion.

11. L'autre état doit se désintégrer en trois photons.

12. Les corrélations de polarisation des deux photons ont été mesurées par C. Wu et I. Shaknow, *Phys. Rev.* **77**, 136 (1950), qui ont pu vérifier que la parité de l'état fondamental était bien -1 .

chapitre 7. Voir aussi Feynman *et al.* [1965], volume III, chapitre 4, Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], chapitre XIV ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 16. Les statistiques fractionnaires (anyons) sont décrites par A. Comtet, J. Mc Cabe et S. Ouvry, *Images de la Physique*, CNRS (1992), page 21. Pour les états collectifs on pourra consulter Diu *et al.* [1990], chapitre 4 ou Le Bellac et Mortessagne [2001], chapitre 4, qui contient une introduction et des références aux condensats de Bose-Einstein gazeux. On trouvera un exposé très complet sur ces condensats dans le cours 1998/99 du Collège de France de C. Cohen-Tannoudji, disponible sur le WEB du Collège de France.

Chapitre 14

Physique atomique

CE DERNIER CHAPITRE est consacré à une introduction à la physique atomique, qui sera limitée aux atomes à un électron. Après un bref exposé dans la section 1 des méthodes de perturbation et variationnelle, nous discuterons dans la section 2 les structures fine et hyperfine des niveaux d'énergie ainsi que l'effet d'un champ magnétique sur ces niveaux. La section 3 examine le couplage d'un atome avec un champ électromagnétique et des applications importantes de ce couplage comme l'effet photo-électrique ou le taux d'émission spontanée. Enfin nous donnerons dans la section 4 une introduction à un sujet en pleine expansion depuis une vingtaine d'années, la manipulation d'atomes par laser, en traitant du refroidissement Doppler et des pièges magnéto-optiques.

14.1 Méthodes d'approximation

14.1.1 Généralités

En physique classique, il est exceptionnel que l'on puisse résoudre analytiquement les équations de Newton ou celles de Maxwell, étant donné les conditions initiales à un temps $t = t_0$ et les forces dans le premier cas, les sources du champ électromagnétique dans le second cas. En général on doit avoir recours à une méthode de résolution approchée : intégration numérique des équations, méthode de perturbation ou autre. La situation n'est pas différente en physique quantique : il est exceptionnel que l'on sache « résoudre l'équation de Schrödinger » de façon exacte, c'est-à-dire obtenir l'évolution temporelle du vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ en fonction de sa valeur $|\varphi(t_0)\rangle$ à un temps initial $t = t_0$. Dans le cas où le hamiltonien est indépendant du temps, ce qui sera le cas considéré dans cette section, la connaissance de cette évolution temporelle suppose que l'on sache diagonaliser le hamiltonien, c'est-à-dire trouver ses valeurs propres et ses vecteurs propres. Sauf cas très particulier (puits carré, oscillateur harmonique, atome d'hydrogène...), on

ne sait pas diagonaliser exactement le hamiltonien et on doit utiliser des méthodes approchées : intégration numérique de l'équation de Schrödinger, méthode de perturbation ou autre méthode.

Dans cette section, nous allons exposer la méthode des perturbations indépendante du temps. Cette méthode consiste à utiliser comme point de départ un hamiltonien H_0 que l'on sait diagonaliser exactement, et que l'on perturbe en lui ajoutant un terme W afin d'obtenir le hamiltonien « exact » $H = H_0 + W$, dans le cadre d'un domaine d'approximation prédéfini : cf. section 4.3. On écrira

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W \quad (14.1)$$

où l'on a introduit un paramètre réel λ tel que $H = H_0$ si $\lambda = 0$ et $H = H_0 + W$ si $\lambda = 1$. Si $\lambda \rightarrow 0$, on peut espérer que la perturbation λW est en un certain sens¹ « petite » par rapport à H_0 . Il peut arriver que l'on puisse effectivement faire varier λ . Par exemple si λW correspond à l'interaction d'un système atomique avec un champ électromagnétique extérieur, on peut modifier à volonté la valeur de ce champ extérieur et donc λ : $\lambda \rightarrow 0$ si le champ s'annule. Mais en général la perturbation est fixée par des données physiques avec lesquelles on ne peut pas jouer. Dans ce cas λ est un paramètre fictif que l'on fait varier de façon artificielle, en lui donnant à la fin des calculs sa valeur physique $\lambda = 1$. Nous avons déjà eu recours à cet artifice dans l'exposé de la théorie des perturbations dépendant du temps de la section 9.6.3, en écrivant la perturbation sous la forme $\lambda W(t)$ et en rétablissant $\lambda = 1$ à la fin du calcul.

Nous supposons donc connu le spectre de H_0 . Soit $E_0^{(n)}$ ses valeurs propres et $|n, r\rangle$ ses vecteurs propres, r étant un indice de dégénérescence comme au § 2.3.1

$$H_0|n, r\rangle = E_0^{(n)}|n, r\rangle \quad (14.2)$$

Nous cherchons les valeurs propres et vecteurs propres de $H(\lambda)$ sous la forme d'un développement en puissances de λ , appelé *développement perturbatif*. Si $H(\lambda)|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$, nous écrivons les développements du vecteur propre $|\varphi\rangle$ et de l'énergie E

$$|\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle + \lambda|\varphi_1\rangle + \lambda^2|\varphi_2\rangle + \dots \quad (14.3)$$

$$E = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \dots \quad (14.4)$$

Si $\lambda = 0$, $|\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle = |n, r\rangle$ et $E = E_0^{(n)}$. Notre hypothèse implicite est qu'un développement en λ existe avec un rayon de convergence non nul, ou, en d'autres termes, que l'énergie est une fonction analytique de λ au point $\lambda = 0$. Il est nécessaire de distinguer deux cas.

- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de H_0 est simple.

1. Définir rigoureusement qu'un opérateur est « petit » par rapport à un autre est un problème mathématique des plus complexes.

- La valeur propre $E_0^{(n)}$ de H_0 est dégénérée avec une dégénérescence N .

Nous allons traiter successivement ces deux cas, sans entrer dans les détails de la méthode générale du calcul à tous les ordres en λ . Nous nous contenterons de l'ordre non trivial le plus bas en λ , en renvoyant aux ouvrages classiques pour le cas général.

14.1.2 Cas d'une valeur propre simple de H_0

Nous partons de $H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle$ et posons $|\varphi_0\rangle = |n\rangle$ avec $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$, ainsi que $E_0 = E_0^{(n)}$ afin d'alléger les notations. En pratique, nous nous intéressons au développement perturbatif (14.4) de l'énergie et le développement perturbatif (14.3) du vecteur $|\varphi\rangle$ est un auxiliaire de calcul, ce qui nous permet de fixer $|\varphi\rangle$ par une condition commode : $\langle\varphi_0|\varphi\rangle = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$. Avec cette condition, $|\varphi\rangle$ n'est pas en général unitaire, mais il est toujours possible d'en déduire un vecteur unitaire si on le souhaite. Nous avons, à l'ordre λ inclus, d'une part

$$H(\lambda)|\varphi\rangle = H_0|\varphi_0\rangle + \lambda W|\varphi_0\rangle + \lambda H_0|\varphi_1\rangle$$

et d'autre part

$$H(\lambda)|\varphi\rangle = (E_0 + \lambda E_1)|\varphi\rangle = E_0|\varphi_0\rangle + \lambda E_1|\varphi_0\rangle + E_0|\varphi_1\rangle$$

d'où, en identifiant les termes d'ordre λ ,

$$W|\varphi_0\rangle + H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_0\rangle + E_0|\varphi_1\rangle$$

Multipliant à gauche les deux membres de cette équation par le bra $\langle\varphi_0|$ et tenant compte de $\langle\varphi_0|H_0 = E_0\langle\varphi_0|$ nous obtenons²

$$E_1 = \langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle \quad (14.5)$$

ce que l'on peut écrire, en appelant ΔE_1 la différence d'énergie entre le cas $\lambda \neq 0$ et le cas $\lambda = 0$ au premier ordre en λ

$$\Delta E_1 = \lambda \langle\varphi_0|W|\varphi_0\rangle \quad (14.6)$$

Le terme en λ^2 n'est pas très difficile à obtenir (exercice 14.5.1)

$$\Delta E_2^{(n)} = \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}} \quad (14.7)$$

2. La formule (14.5) s'obtient immédiatement à partir du théorème de Feynman-Hellmann, exercice 4.3.3, équation (4.34).

Comme application, calculons le déplacement des niveaux de l'oscillateur harmonique à une dimension sous l'influence d'une perturbation anharmonique en q^4

$$\lambda W = \lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} Q^4 \quad (14.8)$$

Utilisant un résultat de l'exercice 11.4.1 on déduit de (14.6) le déplacement du niveau n à l'ordre λ

$$\Delta E_1^{(n)} = \frac{3}{4} \lambda \hbar \omega (2n^2 + 2n + 1) \quad (14.9)$$

Même si λ est petit, le résultat diverge pour les grandes valeurs de n , car plus n est grand, et plus la fonction d'onde est importante aux grandes valeurs de q , et donc plus l'effet de la perturbation en q^4 se fait sentir : la perturbation en λQ^4 n'est jamais « petite ». Nous avons pris comme hypothèse de départ l'existence d'un développement en puissances de λ avec un rayon de convergence non nul. En pratique cette hypothèse d'analyticité à $\lambda = 0$ n'est pas toujours vérifiée, et l'oscillateur anharmonique que nous venons d'examiner en fournit un exemple. En effet, il est facile de comprendre que $E^{(n)}$ ne peut pas être analytique à $\lambda = 0$, car le hamiltonien change brutalement de nature en ce point. Pour $\lambda > 0$, il est borné inférieurement et les états liés sont présents, mais pour $\lambda < 0$ il n'est plus borné inférieurement et les états liés disparaissent ! Le développement n'a plus de sens pour $\lambda < 0$. En fait le développement perturbatif est dans ce cas un développement asymptotique, qui donne de bons résultats pour $\lambda > 0$ si l'on garde un nombre de termes suffisamment petit, mais qui diverge si on essaie de le pousser trop loin. Ce type de développement est bien connu en mathématiques : un bon exemple en est la formule de Stirling valable pour $n \gg 1$

$$\Gamma(n+1) = n! = \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n} \left(1 + \frac{1}{12n} + \frac{1}{288n^2} + \dots\right) \quad (14.10)$$

qui est un développement asymptotique, non convergent, en puissances de $1/n$. Il existe des méthodes sophistiquées pour sommer ces développements asymptotiques³.

14.1.3 Cas d'un niveau dégénéré

Nous passons maintenant au cas d'un niveau dégénéré, en appelant $\mathcal{H}^{(n)}$ le sous-espace de dimension N de la valeur propre $E_0^{(n)}$; le projecteur $\mathcal{P}^{(n)}$ sur $\mathcal{H}^{(n)}$ s'écrit

$$\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{r=1}^N |n, r\rangle \langle n, r| \quad (14.11)$$

3. Voir par exemple J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford (1989), chapitre 37.

Dans le sous-espace $\mathcal{H}^{(n)}$, l'opérateur W est représenté par une matrice $N \times N$ d'éléments $W_{sr}^{(n)} = \langle n, s | W | n, r \rangle$ que l'on peut diagonaliser. Les vecteurs propres $|\varphi_0^{(n,q)}\rangle$ de W dans $\mathcal{H}^{(n)}$ sont des combinaisons linéaires des $|n, r\rangle$

$$|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = \sum_{r=1}^N c_{qr} |n, r\rangle$$

$$W|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_1^{(n,q)} |\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

Les coefficients c_{qr} sont d'ordre zéro en λ , puisque l'on a diagonalisé W sans toucher à la diagonalisation de H_0 , qui est un multiple de l'identité dans $\mathcal{H}^{(n)}$

$$H_0|\varphi_0^{(n,q)}\rangle = E_0^{(n)} |\varphi_0^{(n,q)}\rangle$$

La diagonalisation de W dans $\mathcal{H}^{(n)}$ donne le résultat correct pour l'énergie à l'ordre λ . On retrouve les résultats du cas non-dégénéré en prenant la dimension de $\mathcal{H}^{(n)}$ égale à un. En résumé, à l'ordre λ , on calcule les niveaux d'énergie et les vecteurs propres comme pour un système à un nombre fini N de niveaux, en diagonalisant la matrice représentative de $H_0 + \lambda W$ dans $\mathcal{H}^{(n)}$. En fait, l'approximation par un système à nombre fini de niveaux est souvent obtenue en négligeant les interactions entre sous-espaces $\mathcal{H}^{(n)}$. Remarquons enfin que les cas quasi-dégénérés sont aussi traités par cette méthode.

14.1.4 Méthode variationnelle

Nous nous limitons à nouveau à l'étude d'un cas simple, la recherche de l'énergie de l'état fondamental, en renvoyant aux traités classiques pour l'application de la méthode variationnelle à d'autres cas. Soit E_0 l'énergie de l'état fondamental d'un hamiltonien H , $|0\rangle$ le vecteur propre correspondant

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle$$

et $|\varphi\rangle$ un vecteur arbitraire unitaire de l'espace de Hilbert des états. Écrivons la valeur moyenne de H dans l'état $|\varphi\rangle$ en décomposant $|\varphi\rangle$ sur la base des états propres $|n\rangle$ de H , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$,

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|H|n\rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

On en déduit

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle - \langle 0|H|0\rangle = \sum_n (E_n - E_0) |c_n|^2 \geq 0 \quad (14.12)$$

où nous avons utilisé $\sum_n |c_n|^2 = 1$ et $E_n \geq E_0$. La méthode variationnelle consiste à se donner un vecteur d'essai $|\varphi(\alpha)\rangle$ dépendant d'un paramètre α , ou

de plusieurs paramètres α_i , que l'on essaie de choisir aussi proche que possible de la forme supposée de $|0\rangle$. Le résultat (14.12) montre que

$$\langle H \rangle(\alpha) = \langle \varphi(\alpha) | H | \varphi(\alpha) \rangle \geq E_0$$

Dans le cadre de la paramétrisation choisie, le meilleur résultat pour E_0 sera obtenu en cherchant le minimum de $\langle H \rangle(\alpha)$

$$\left. \frac{d}{d\alpha} \langle H \rangle(\alpha) \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \quad (14.13)$$

et une borne supérieure sur E_0 est

$$E_0 \leq \langle \varphi(\alpha_0) | H | \varphi(\alpha_0) \rangle \quad (14.14)$$

Pour comparer deux choix différents $|\varphi(\alpha)\rangle$ et $|\tilde{\varphi}(\beta)\rangle$, on compare les deux minima et le meilleur choix est celui qui donne la valeur minimale de $\langle H \rangle$. Il est immédiat de généraliser à un vecteur dépendant de plusieurs paramètres $\alpha_1, \dots, \alpha_p$: on cherche le minimum de $\langle H \rangle$ par

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \langle H \rangle(\alpha_1, \dots, \alpha_p) \right|_{\alpha_j=\alpha_{j0}} = 0$$

À titre d'exemple, examinons le calcul variationnel de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique, en choisissant comme fonction d'onde d'essai une fonction normalisable de norme unité

$$\langle x | \varphi(\alpha) \rangle = \varphi_\alpha(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha^{3/2} \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad (14.15)$$

Les intégrales nécessaires aux calculs ci-dessous se déduisent de

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + \alpha^2} = \frac{\pi}{\alpha} \quad (14.16)$$

en différentiant $I(\alpha)$ par rapport à α^2 . Partant de la forme (11.9) du hamiltonien de l'oscillateur harmonique, on calcule $\langle H \rangle(\alpha)$

$$\begin{aligned} \langle H \rangle(\alpha) &= \frac{1}{2} \hbar \omega \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{d\varphi_\alpha}{dx} \right)^2 + x^2 \varphi_\alpha^2(x) \right] \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\frac{1}{2\alpha^2} + \alpha^2 \right] \end{aligned}$$

Le premier terme du crochet est l'énergie cinétique et le second l'énergie potentielle. $\langle H \rangle(\alpha)$ est minimum pour $\alpha^2 = \alpha_0^2 = 1/\sqrt{2}$ et

$$\langle H \rangle(\alpha_0) = \frac{\hbar \omega}{\sqrt{2}} > E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$$

Pour $\alpha = \alpha_0$, l'énergie cinétique moyenne et l'énergie potentielle moyenne sont égales

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle X^2 \rangle = \frac{\hbar \omega}{2\sqrt{2}}$$

Le choix (14.15) de la fonction d'onde d'essai n'est pas excellent (l'erreur est $\sim 40\%$!), car la décroissance à l'infini de cette fonction d'onde est beaucoup trop lente. Avec une fonction d'onde d'essai gaussienne, on trouverait bien sûr le résultat exact $\hbar \omega/2$.

14.2 Atomes à un électron

14.2.1 Niveaux d'énergie en l'absence de spin

Au chapitre 10, nous avons étudié le spectre de l'atome d'hydrogène, atome à un seul électron ; une généralisation immédiate est donnée par les ions He^+ , Li^{++} , etc. Lorsque le nombre d'électrons est différent de un, il n'existe plus de solution analytique au calcul des niveaux d'énergie. On a recours à des méthodes d'approximation, qui peuvent être très précises dans le cas des atomes légers et en particulier de l'hélium. Un autre cas où l'on peut utiliser une approximation simple est celui des alcalins. En effet, en première approximation, un alcalin est un atome où un électron externe est soumis à un potentiel effectif créé par le noyau atomique et les $(Z - 1)$ autres électrons, appelés électrons des couches internes. Le spectre est alors semblable à celui de l'atome d'hydrogène, avec la différence que l'on n'observe pas de dégénérescence entre des niveaux de moment angulaire orbital différent car le potentiel n'est pas en $1/r$: dans le cas du sodium par exemple le niveau fondamental est un niveau $3s$ et le niveau $3p$ est intermédiaire entre les niveaux $3s$ et $4s$ (figure 10.7).

Les spectres des figures 10.6 et 10.7 sont obtenus en négligeant le spin de l'électron externe ainsi que le spin du noyau atomique. Nous allons traiter successivement les deux modifications introduites par la prise en compte de ces spins : la *structure fine* induite par l'interaction entre le moment angulaire de l'électron et son spin, et la *structure hyperfine* induite par l'interaction du spin nucléaire avec le spin et le moment angulaire orbital de l'électron.

14.2.2 Structure fine

La structure fine est un effet d'origine relativiste dont l'expression correcte s'obtient à partir d'une équation d'onde quantique et relativiste valable pour les particules de spin $1/2$, l'équation de Dirac⁴. Dans le cadre d'une

4. L'équation de Dirac n'est pas la seule équation d'onde quantique et relativiste : une autre équation relativiste importante est l'équation de Klein-Gordon qui décrit les particules de spin zéro. Toutefois aucune de ces deux équations n'est entièrement cohérente : le mariage de la mécanique quantique et de la relativité exige une théorie de champs quantifiés.

description classique, nous allons donner un argument intuitif, mais qui n'est pas entièrement correct, pour justifier l'expression du hamiltonien de la structure fine. Dans le référentiel où le noyau est au repos, ou référentiel du noyau, le champ électromagnétique est le gradient du potentiel électrostatique $V(r)/q_e$ créé par le noyau et les $(Z - 1)$ électrons des couches internes, et l'électron externe se déplace à une vitesse $\vec{v}$ dans ce référentiel. Dans le référentiel où il est au repos, l'électron voit le noyau se déplacer avec une vitesse $-\vec{v}$, et compte tenu des lois de transformation du champ électromagnétique dans un changement de référentiel d'inertie, cet électron voit non seulement un champ électrique, mais aussi un champ magnétique donné en fonction du champ électrostatique $\vec{E}$ dans le référentiel du noyau par⁵

$$\vec{B} \simeq -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \simeq \frac{1}{q_e c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \left(\frac{\vec{p}}{m_e} \times \vec{r} \right) \quad (14.17)$$

Ce champ magnétique interagit avec le moment magnétique $\vec{\mu} = \gamma \vec{s}$ de l'électron externe en donnant une énergie d'interaction

$$W_{so} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \simeq -\frac{q_e}{m_e} \vec{s} \cdot \vec{B} \quad (14.18)$$

car le facteur gyromagnétique $\gamma \simeq q_e/m_e$. Combinant ces deux équations et introduisant le moment angulaire orbital $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$, on en déduit le potentiel spin-orbite

$$W_{so} = \frac{1}{m_e^2 c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \vec{l} \cdot \vec{s} \quad (14.19)$$

Toutefois notre démonstration est critiquable car nous avons utilisé les formules de transformation entre référentiels d'inertie. Or le référentiel de l'électron est un référentiel accéléré par rapport à celui du noyau puisque l'électron tourne autour du noyau. La prise en compte de ce mouvement de rotation se traduit par un phénomène de précession du spin, la précession de Thomas⁶, qui réduit d'un facteur deux le résultat (14.19). En fin de compte, l'expression quantique correcte du potentiel spin-orbite s'obtient en corrigeant (14.19) par un facteur 1/2 et en remplaçant les quantités classiques $\vec{l}$ et $\vec{s}$ par les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{S}$

$$W_{so} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right] \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (14.20)$$

Évaluons l'ordre de grandeur de la correction aux niveaux d'énergie pour l'atome d'hydrogène ; comme $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont d'ordre $\hbar$ et que $V(r) = -e^2/r$,

5. Dans l'expression (14.17), on a utilisé l'approximation $v \ll c$: la formule exacte contient des facteurs $(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$.

6. Voir par exemple E. Taylor et J. Wheeler, *Space-Time Physics*, W. H. Freeman, New-York (1963), § 103, ou Jackson [2001], section 11.8.

nous obtenons dans un état n

$$\langle W_{\text{so}} \rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \sim \frac{\hbar^2 e^2}{2m_e^2 c^2 n^3 a_0^3} = \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{1}{n^3} = \frac{\alpha^2 R_\infty}{n^3}$$

où nous avons introduit le rayon de Bohr a_0 , la constante de structure fine α et la constante de Rydberg R_∞ : voir (1.39)–(1.41). Les corrections aux niveaux d'énergie sont donc de l'ordre de α^2 en valeur relative, ce à quoi l'on s'attend pour des corrections relativistes, car⁷ $(v/c)^2 \sim \alpha^2$.

Examinons l'effet du potentiel (14.20) sur un niveau (nl) , de nombre quantique principal n et de moment angulaire orbital l . Comme l'effet sur les niveaux est faible, $\sim \alpha^2$, on pourra utiliser la théorie des perturbations. Ni le moment angulaire orbital $\vec{L}$ ni le spin $\vec{S}$ ne commutent avec W_{so} . En revanche, l'opérateur scalaire $\vec{L} \cdot \vec{S}$ commute avec le moment angulaire total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ et de plus, comme $[\vec{L}^2, \vec{L}] = 0$ et $[\vec{L}^2, f(r)] = 0$, le potentiel (14.20) commute avec $\vec{L}^2$, ce qui entraîne qu'il ne relie pas des niveaux de l différents. En résumé, le potentiel spin-orbite est diagonal dans une base $|l\ 1/2\ jm_j\rangle$. En l'absence du potentiel spin-orbite, la dégénérescence du niveau (nl) est $2(2l+1)$ et il faudrait en principe appliquer la théorie des perturbations d'un niveau dégénéré. Mais dans le cas présent la situation est très simple, car on connaît déjà la base $|l\ 1/2\ jm_j\rangle$ où W_{so} est diagonal. Le potentiel spin-orbite va partiellement lever la dégénérescence. En effet, deux valeurs $j = l \pm 1/2$ du moment angulaire total sont possibles, et d'après (10.138), en utilisant $\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (14.21)$$

soit

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{S} &= -\frac{\hbar^2}{2} (l+1) & j = l - \frac{1}{2} \\ \vec{L} \cdot \vec{S} &= +\frac{\hbar^2}{2} l & j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (14.22)$$

Les états de moment angulaire total $j = l - 1/2$ et $j = l + 1/2$ ont donc des énergies différentes et le potentiel spin-orbite lève partiellement la dégénérescence. Naturellement chacun des deux niveaux d'énergie correspondants possède encore une dégénérescence $(2j+1)$. Notons que le potentiel spin-orbite n'affecte pas les ondes s ($l = 0$).

Comme cas particulier, examinons le niveau $2p$ ($l = 1$) de l'hydrogène. Les deux valeurs possibles de j sont $j = 1/2$ et $j = 3/2$. Les niveaux correspondants sont notés $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$. La transition $2p \rightarrow 1s$ est dédoublée, ce qui est facilement confirmé en spectroscopie. Dans le cas de l'hydrogène, les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ restent confondus à l'approximation de l'équation

7. Pour un noyau de charge Z et un électron unique $(v/c)^2 \sim (Z\alpha)^2$.

de Dirac. La différence d'énergie avec le niveau $2p_{3/2}$ est $\simeq 4.5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 10 GHz en fréquence. Le calcul d'ordre de grandeur précédent donne pour cette différence d'énergie $\sim \alpha^2 R_\infty / 8 \sim 10^{-4}$ eV, en accord qualitatif avec l'expérience. L'expérience montre que, contrairement à la prédiction de l'équation de Dirac, les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ ne sont pas confondus : le niveau $2p_{1/2}$ est plus bas de $\simeq 5 \times 10^{-5}$ eV, ce qui correspond à environ 1 GHz. Cette différence, appelée déplacement Lamb, s'explique par des effets d'électrodynamique quantique, la théorie quantifiée du champ électromagnétique et du champ électron-positron.

La notation précédente $(nl)_j$ se généralise aux niveaux plus élevés : pour une onde d ($l = 2$) les valeurs possibles de j sont $3/2$ et $5/2$ et les niveaux sont notés $nd_{3/2}$, $nd_{5/2}$. Pour une onde f ($l = 3$) on aura des niveaux $nf_{5/2}$ et $nf_{7/2}$, etc. Un exemple spectroscopique classique est le dédoublement de la raie jaune du sodium, qui correspond à une transition $3p \rightarrow 3s$: les deux raies sont notées D_1 à 589.6 nm et D_2 à 589.0 nm. En général le niveau $j = l + 1/2$ est plus élevé que le niveau $j = l - 1/2$ car la valeur moyenne $\langle dV/dr \rangle > 0$, mais il y a quelques exceptions. Dans le modèle en couches du noyau, où le potentiel spin-orbite joue un rôle crucial, cet ordre est systématiquement inversé.

14.2.3 Effet Zeeman

La dégénérescence $(2j + 1)$ du niveau $(nl)_j$ est levée en plongeant l'atome dans un champ magnétique constant $\vec{B}$: c'est *l'effet Zeeman*. Cet effet provient de l'interaction du champ magnétique avec le moment magnétique orbital dû au mouvement de l'électron sur son orbite, et également avec le moment magnétique associé au spin de cet électron. Le moment magnétique associé à $\vec{L}$ est donné par le facteur gyromagnétique classique (3.30) $\gamma = q_e/(2m_e)$, tandis que le facteur gyromagnétique du spin est $\simeq q_e/m_e$. L'énergie d'interaction se déduit du couplage d'un moment magnétique avec le champ⁸

$$W = -\frac{q_e}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \quad (14.23)$$

On choisit habituellement $\vec{B}$ parallèle à Oz

$$W = -\frac{q_e B}{2m_e} (L_z + 2S_z) \quad (14.24)$$

Lorsque l'énergie Zeeman (14.23) est suffisamment petite par rapport à l'énergie caractéristique de la structure fine du niveau considéré, on peut utiliser la théorie des perturbations dégénérée dans chaque niveau $(nl)_j$. Si tel n'est pas le cas, il faut diagonaliser simultanément le hamiltonien de la

8. Toutefois cet argument ne donne que le terme dominant de l'interaction : voir l'exercice 14.5.5 pour une justification détaillée de (14.23).

structure fine et celui de l'effet Zeeman : exercice 6.4.5. Nous nous plaçons dans le cas où l'effet Zeeman est petit. Les éléments de matrice de la perturbation dans le niveau $(nl)_j$ de (14.24) sont

$$W_{mm'}^{nlj} = -\frac{q_e B}{2m_e} \langle nljm | L_z + 2S_z | nljm' \rangle \quad (14.25)$$

Les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont des opérateurs vectoriels, et d'après le théorème de Wigner-Eckart (10.150) pour ces opérateurs, les éléments de matrice sont donnés, par exemple pour L_z , par

$$\begin{aligned} \langle nljm | L_z | nljm' \rangle &= \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j | (\vec{J} \cdot \vec{L}) | j \rangle \langle nljm | J_z | nljm' \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle (\vec{J} \cdot \vec{L}) \rangle \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Utilisant

$$\vec{S}^2 = (\vec{J} - \vec{L})^2 \quad \text{et} \quad \vec{L}^2 = (\vec{J} - \vec{S})^2$$

pour exprimer $\vec{J} \cdot \vec{S}$ et $\vec{J} \cdot \vec{L}$, on obtient

$$\langle \vec{J} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}) \rangle = \frac{3}{2} \vec{J}^2 + \frac{1}{2} \vec{S}^2 - \frac{1}{2} \vec{L}^2$$

et on en déduit

$$\begin{aligned} \langle nljm | L_z + 2S_z | nljm' \rangle &= \frac{m\hbar}{2j(j+1)} \left[3j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right] \delta_{mm'} \\ &= m\hbar \left[1 + \frac{1}{2j(j+1)} \left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right) \right] \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Le résultat final s'écrit sous la forme

$$W_{mm'}^{nlj} = -g \frac{q_e B}{2m_e} m\hbar \delta_{mm'} \quad (14.26)$$

Dans le cadre de notre approximation, les déplacements des sous-niveaux Zeeman sont linéaires en B . Ils sont contrôlés par le *facteur de Landé* g

$$g = 1 + \frac{1}{2j(j+1)} \left[j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right] \quad (14.27)$$

On interprète physiquement $gq_e/(2m_e)$ comme un facteur gyromagnétique effectif. Pour un électron libre dans un champ magnétique nous avons vu que le facteur de Landé est égal à 2 ; c'est aussi le cas pour une onde s , ainsi qu'on peut le vérifier en posant $l = 0$ dans (14.27).

14.2.4 Structure hyperfine

Un effet encore plus fin, de l'ordre de 10^{-6} en valeur relative, est dû à l'interaction du moment magnétique du noyau atomique avec le moment magnétique orbital et le moment magnétique associé au spin de l'électron externe. L'interaction entre un dipôle magnétique nucléaire et un dipôle magnétique électronique est *a priori* plus faible que l'interaction entre deux dipôles électroniques par un facteur $\sim 10^{-3}$: en effet le magnéton de Bohr nucléaire $\mu_N = q_p \hbar / (2m_p)$ est plus petit que le magnéton de Bohr $\mu_B = |q_e| \hbar / (2m_e)$ par un facteur $m_p/m_e \sim 2000$. Rappelons les expressions des opérateurs moments magnétiques de l'électron et du proton

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{S}_e \simeq -2\mu_B \frac{\vec{S}_e}{\hbar} \quad \mu_p = \gamma_p \vec{S}_p \simeq 5.59\mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar} \quad (14.28)$$

On montre en électrodynamique classique⁹ que le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r})$ d'un dipôle ponctuel $\vec{\mu}_n$ à l'origine des coordonnées vaut

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_n - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})\hat{r}] + \frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_n \delta(\vec{r}) \quad (14.29)$$

On peut écrire comme dans (14.23) l'énergie du moment magnétique orbital et de spin de l'électron externe dans ce champ magnétique. Nous allons nous limiter au cas où l'électron est dans une onde s , cas où seul est à prendre en compte le moment magnétique de spin : dans une onde s , il n'y a pas de contribution du moment angulaire orbital au moment magnétique de l'atome. De plus le terme entre crochets dans (14.29) donne une contribution nulle. En effet, si l'on calcule en théorie des perturbations l'énergie magnétique $\langle W' \rangle = -\langle \vec{\mu}_e \cdot \vec{B} \rangle$ correspondant à l'interaction du moment magnétique électronique dû au spin avec le terme entre crochets de (14.29), on trouve pour une onde s dont la fonction d'onde $\varphi(r)$ dépend seulement de r

$$\begin{aligned} \langle W' \rangle &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3r |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3} [(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3(\vec{\mu}_n \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_e \cdot \hat{r})] \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \left[(\vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e) - 3 \sum_{i,j=1}^3 \mu_{ni} \mu_{ej} I_{ij} \right] \end{aligned}$$

Pour obtenir la deuxième ligne de l'équation précédente, on a découpé la partie radiale de l'intégrale du second terme du crochet de sa partie angulaire en écrivant

$$\int d^3r = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \int \frac{d\Omega}{4\pi}$$

L'intégrale radiale donne

$$4\pi \int_0^\infty r^2 dr |\varphi(r)|^2 \frac{1}{r^3} = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

9. Voir par exemple Jackson [2001], section 5.6.

L'intégrale angulaire I_{ij} vaut

$$I_{ij} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \hat{r}_i \hat{r}_j = \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

En effet, le seul tenseur d'ordre deux invariant par rotation que l'on peut former avec les indices (i, j) est δ_{ij}

$$I_{ij} = c \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \sum_{ij} \delta_{ij} I_{ij} = 1$$

ce qui montre que $c = 1/3$ et que les deux termes de $\langle W' \rangle$ se compensent. Il reste donc uniquement le terme dit de contact

$$\begin{aligned} W_{\text{cont}} &= -\frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_n \cdot \vec{\mu}_e \delta(\vec{r}) \\ &= -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_n \gamma_e (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_e) \delta(\vec{r}) \end{aligned} \quad (14.30)$$

Nous prendrons comme exemple de structure hyperfine celle de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène : $\mu_n \rightarrow \mu_p$, $n = 1$, $l = 0$. Le vecteur d'état est le produit tensoriel d'une fonction d'onde spatiale déduite de (10.94)

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (14.31)$$

et d'une fonction d'onde de spin, produit tensoriel d'un vecteur d'état dans l'espace de spin de l'électron et dans celui du proton. La partie spatiale et la partie de spin sont entièrement découplées. On prend d'abord la moyenne pour la partie spatiale

$$\begin{aligned} \langle W_{\text{cont}} \rangle_{\text{spat}} &= -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_n \gamma_e |\varphi(0)|^2 (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \\ &= \frac{A}{\hbar^2} (\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e) \end{aligned} \quad (14.32)$$

La constante A vaut

$$A = \frac{2\mu_0}{3} (2\mu_B)(5.59\mu_N) \frac{1}{\pi a_0^3} \simeq 5.87 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

Le hamiltonien effectif est donc $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$, qui agit dans l'espace de Hilbert à quatre dimensions produit tensoriel des deux espaces de spin. En l'absence de perturbation hyperfine, le niveau fondamental $1s_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène possède une dégénérescence d'ordre 4. Il faut diagonaliser $A(\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e)/\hbar^2$ dans ce sous-espace, ce qui est immédiat si l'on introduit le spin total $\vec{S} = \vec{S}_p + \vec{S}_e$ et l'identité

$$\vec{S}_p \cdot \vec{S}_e = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \vec{S}_p^2 - \vec{S}_e^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left[s(s+1) - \frac{3}{2} \right] \quad (14.33)$$

Suivant les résultats du § 10.6.1, les deux valeurs possibles de s sont $s = 1$ (état triplet) et $s = 0$ (état singulet). Les valeurs propres du hamiltonien sont

$$\begin{aligned} s = 1 \text{ état triplet} & \quad E_{\text{trip}} = E_0 + \frac{1}{4} A \\ s = 0 \text{ état singulet} & \quad E_{\text{sing}} = E_0 - \frac{3}{4} A \end{aligned}$$

où E_0 est l'énergie en l'absence d'effet hyperfin, et les vecteurs propres sont donnés par (10.125) et (10.126). Les deux niveaux sont distants de $A \simeq 5.87 \times 10^{-6} \text{ eV}$, ce qui correspond à l'émission d'un photon de longueur d'onde de 21 cm quand l'atome passe du niveau triplet au niveau singulet. Bien que la durée de vie du niveau triplet soit très longue : 10^7 années, et qu'elle soit *a priori* difficile à observer, elle est d'une grande importance en astrophysique. Elle a donné des informations fondamentales¹⁰ sur les nuages d'hydrogène atomique interstellaire, qui constituent de 10 à 50 % de la masse de la galaxie, en permettant les mesures des distributions de masse, vitesses, champs magnétiques, etc.

14.3 Interaction atome-champ électromagnétique

14.3.1 Théorie semi-classique

Dans cette section, nous allons examiner l'interaction entre un champ électromagnétique et un atome, modélisé comme précédemment par un électron externe dans un potentiel à symétrie sphérique. Dans un premier temps, nous utiliserons une *approximation semi-classique*, déjà introduite au § 5.2.5 : le champ électromagnétique est décrit classiquement, tandis que l'atome est décrit de façon quantique. Dans la section 5.2, nous avons postulé une interaction phénoménologique entre l'onde électromagnétique et un dipôle électrique, responsable des transitions d'un niveau à un autre. Nous allons compléter les résultats de cette section en justifiant l'approximation dipolaire et en donnant une expression explicite de l'amplitude de transition. À ce point, il vaut la peine de résumer dans la table 14.1 les diverses approximations possibles lorsque l'on étudie l'interaction atome (ou molécule)–champ électromagnétique. En principe, on devrait traiter quantiquement à la fois l'atome et le champ, mais il peut être commode d'utiliser une approximation classique pour l'un ou l'autre des deux systèmes, dans la mesure où l'on peut s'assurer de la validité d'une telle approximation.

Suivant l'approche du § 11.3.3, l'onde électromagnétique classique est décrite dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ par un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$ transverse. Une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fréquence ω peut donc

10. Pour plus de détails, voir par exemple Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 13.

TAB. 14.1 – Différents schémas d'approximation

Champ électro-magnétique	Atome	Exemples
classique	classique	rayonnement classique § 1.5.3
classique	quantique	absorption et émission stimulées § 5.2.5, § 14.3.1 à § 14.3.3, § 14.4.1
quantique	classique	couplage à une source classique exercice 11.5.3
quantique	quantique	émission spontanée § 14.4.4

s'écrire

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad \vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0 \quad (14.34)$$

Rappelons l'action des opérateurs divergence et rotationnel dans l'espace de Fourier

$$\vec{\nabla} \cdot \rightarrow i\vec{k} \cdot \quad \vec{\nabla} \times \rightarrow i\vec{k} \times \quad (14.35)$$

ce qui donne pour les champs électrique et magnétique

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \text{Re} \left[i\omega \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (14.36)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \text{Re} \left[i(\vec{k} \times \vec{A}_0) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (14.37)$$

Le flux d'énergie est donné par le vecteur de Poynting

$$\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{E} \times \vec{B} \quad (14.38)$$

et en moyennant sur le temps, avec $\langle \cos^2(\omega t) \rangle = 1/2$

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \omega^2 |\vec{A}_0|^2 \hat{k} = \mathcal{I}(\omega) \hat{k} \quad (14.39)$$

L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ est reliée au flux de photons $\mathcal{F}$ par

$$\mathcal{I}(\omega) = \hbar \omega \mathcal{F}$$

soit, en appelant n la densité de photons

$$\mathcal{F} = nc = \frac{1}{2\hbar} \varepsilon_0 c \omega |\vec{A}_0|^2 \quad (14.40)$$

Le hamiltonien d'interaction électron + champ s'écrit d'après (11.115)

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{P} - q_e \vec{A}(\vec{R}, t) \right)^2 + V(\vec{R}) \quad (14.41)$$

$V(\vec{R})$ représente l'interaction effective de l'électron externe avec le noyau et les $(Z - 1)$ électrons des couches internes. Le hamiltonien (14.41) se décompose en un hamiltonien non perturbé H_0

$$H_0 = \frac{1}{2m_e} \vec{P}^2 + V(\vec{R}) \quad (14.42)$$

et une perturbation

$$W(\vec{R}, t) = -\frac{q_e}{2m_e} \left(\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P} \right) + \frac{q_e^2}{2m_e} \vec{A}^2 \quad (14.43)$$

Au premier ordre en $q_e \vec{A}$, nous pouvons négliger le deuxième terme de (14.43), ou terme diamagnétique, $[q_e^2/(2m_e)] \vec{A}^2$ (exercice 14.5.5) ; de plus le premier terme se simplifie dans la jauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ car

$$\begin{aligned} \vec{P} \cdot [\vec{A}f(\vec{r})] &= -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})f(\vec{r}) - i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla}f(\vec{r}) \\ &= -i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla}f(\vec{r}) = (\vec{A} \cdot \vec{P})f(\vec{r}) \end{aligned}$$

La perturbation $W(\vec{R}, t)$ s'écrit en fin de compte

$$W(\vec{R}, t) = -\frac{q_e}{m_e} [\vec{A}(\vec{R}, t) \cdot \vec{P}] \quad (14.44)$$

Nous nous plaçons dans une représentation où $\vec{R}$ est diagonal : $\vec{R} \rightarrow \vec{r}$. Compte tenu de (14.34)

$$W(\vec{r}, t) = -\frac{q_e}{2m_e} \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0^* \cdot \vec{P} \right] \quad (14.45)$$

Nous pouvons maintenant utiliser les résultats du § 9.6.3 : le terme en $\exp(-i\omega t)$ de (14.45) correspond à l'absorption d'énergie par l'atome et le terme en $\exp(i\omega t)$ à l'émission d'énergie. S'il existe deux niveaux d'énergie E_i et E_f , avec $E_i < E_f$, correspondant à une résonance : $E_f - E_i = \hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega$, l'atome absorbera une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $i \rightarrow f$, et émettra une énergie $\hbar\omega_0$ dans une transition $f \rightarrow i$. Dans une interprétation corpusculaire, cela veut bien sûr dire que l'atome absorbe ou émet un photon d'énergie $\hbar\omega_0$, mais cette interprétation sort du cadre de la théorie semi-classique. D'après (9.170), la probabilité par unité de temps d'absorption $i \rightarrow f$ est donnée par

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{q_e}{2m_e} \right)^2 \left| \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{A}_0 \cdot \vec{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \quad (14.46)$$

14.3.2 Approximation dipolaire

Introduisons un vecteur polarisation unitaire $\vec{e}_s$, $\vec{e}_s^* \cdot \vec{e}_s = 1$, en écrivant $\vec{A}_0 = |\vec{A}_0| \vec{e}_s$. L'intensité $\mathcal{I}(\omega)$ par unité de fréquence est donnée par (14.39)

$$\mathcal{I}(\omega) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \omega^2 |\vec{A}_0(\omega)|^2$$

Récrivons (14.46) en intégrant sur ω et en séparant le module carré de l'élément de matrice de transition des caractéristiques de l'onde incidente

$$\begin{aligned}\Gamma_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{q_e}{2m_e} \right)^2 \int d\omega |\vec{A}_0(\omega)|^2 \left| \vec{e}_s \cdot \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - (E_i + \hbar\omega)) \\ &= \frac{4\pi^2\alpha}{\hbar\omega_0^2 m_e^2} \mathcal{I}(\omega_0) \left| \vec{e}_s \cdot \langle f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{P} | i \rangle \right|^2\end{aligned}\quad (14.47)$$

L'élément de matrice de transition dans (14.47) se simplifie si l'on remarque que la longueur d'onde émise ou absorbée, $0.1 \mu\text{m} \lesssim \lambda \lesssim 1 \mu\text{m}$, est très grande par rapport aux dimensions atomiques $a_0 \sim 0.1 \text{ nm}$, ce qui permet de remplacer $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ par l'unité car $\langle \vec{k} \cdot \vec{r} \rangle \sim ka_0 \sim a_0/\lambda \ll 1$

$$\begin{aligned}\langle f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{P} | i \rangle &= \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \varphi_i(\vec{r}) \\ &\simeq \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \varphi_i(\vec{r})\end{aligned}$$

De plus, on peut exprimer $\vec{P}$ à l'aide de la relation de commutation entre $\vec{R}$ et H_0

$$[\vec{R}, H_0] = \frac{i\hbar}{m_e} \vec{P}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\langle f | \vec{P} | i \rangle &= \frac{m_e}{i\hbar} \langle f | \vec{R} H_0 - H_0 \vec{R} | i \rangle \\ &= \frac{m_e}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle f | \vec{R} | i \rangle = im_e \omega_0 \langle f | \vec{R} | i \rangle\end{aligned}\quad (14.48)$$

En physique classique, $\vec{r}$ est le vecteur joignant le noyau situé à l'origine des coordonnées à l'électron externe, et $q_e \vec{r}$ est le moment dipolaire électrique $\vec{d}$ de l'atome. La quantité $\langle f | q_e \vec{R} | i \rangle$ est donc l'élément de matrice $\vec{D}_{fi}$ de l'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D} = q_e \vec{R}$ entre les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$

$$\vec{D}_{fi} = \langle f | \vec{D} | i \rangle = q_e \langle f | \vec{R} | i \rangle \quad (14.49)$$

En reportant ces résultats dans (14.47) on obtient la probabilité de transition par unité de temps pour une polarisation $\vec{e}_s$

$$\Gamma_{fi} = 4\pi^2 \left(\frac{|\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 c} \right) \mathcal{I}(\omega_0) \quad (14.50)$$

$$= \frac{4\pi^2\alpha}{\hbar} |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \mathcal{I}(\omega_0) \quad (14.51)$$

en accord avec (5.44) : le moment dipolaire d introduit phénoménologiquement dans la section 5.2.2 prend une forme explicite pour l'atome à un électron

$$d^2 \rightarrow |\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2 = q_e^2 |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2$$

L'expression (14.50) est plus générale que (14.51), et elle est valable pour tout système atomique ou moléculaire lorsque les règles de sélection des transitions dipolaires électriques sont satisfaites : la probabilité de transition est pilotée par l'élément de matrice de transition du dipôle électrique du système, qui fait intervenir toutes les particules chargées. Un calcul identique permet de déduire le taux d'émission stimulée $\bar{\Gamma}_{if}$, qui est aussi donné par (14.50) : $\bar{\Gamma}_{if} = \Gamma_{fi}$. En effet, il suffit de remplacer D_{fi} par $D_{if} = D_{fi}^*$ pour passer de l'absorption à l'émission. Suivant l'argument fondé sur les relations d'Einstein du § 5.2.5, on déduit de Γ_{fi} la probabilité d'émission spontanée d'un photon en sommant sur les deux états possibles de polarisation : $s = 1, 2$ et en prenant la moyenne $\langle \bullet \rangle$ sur les angles et sur les spins

$$B' = \frac{4\omega_0^3}{c^2} \left(\frac{\frac{1}{2} \sum_{s=1}^2 \langle |\vec{e}_s \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \rangle}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \right) = \frac{2\alpha\omega_0^3}{c^2} \left\langle \sum_{s=1}^2 |\vec{e}_s \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \right\rangle \quad (14.52)$$

L'opérateur moment dipolaire électrique $\vec{D}$, tout comme l'opérateur position $\vec{R}$, est un opérateur vectoriel impair. Cette propriété de $\vec{D}$ implique des *règles de sélection* pour les transitions dipolaires électriques. En effet, le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels donne l'expression des éléments de matrice des composantes sphériques (10.145) D_q de $\vec{D}$: si j_i et j_f sont les moments angulaires de l'état initial i et de l'état final f , et m_i et m_f les nombres quantiques magnétiques, nous obtenons de (10.149)

$$\langle j_f m_f | D_q | j_i m_i \rangle = C_{q m_i; j_f m_f}^{1 j_i} \langle j_f || D || j_i \rangle \quad (14.53)$$

Le coefficient de Clebsch-Gordan ne peut être différent de zéro que si $|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1$ et si $m_f = q + m_i$. De plus, les parités de l'état initial et de l'état final doivent être opposées : $\Pi_i \Pi_f = -1$. Les transitions dipolaires électriques obéissent donc aux règles de sélection suivantes.

Règles de sélection pour les transitions dipolaires électriques

$$|j_i - 1| \leq j_f \leq j_i + 1 \qquad m_f = m_i + q, q = -1, 0, +1 \qquad \Pi_i \Pi_f = -1$$

Ceci généralise les résultats obtenus au § 10.5.2 dans le cas particulier $j_i = 1$ et $j_f = 0$. Les règles de sélection sur le nombre quantique magnétique m sont directement liées à la conservation du moment angulaire suivant Oz , et des exemples en ont déjà été donnés au § 10.5.2 et à l'exercice 10.7.13.

14.3.3 Effet photo-électrique

Dans la sous-section précédente, nous avons étudié la transition entre deux niveaux en généralisant les résultats de la section 5.2. Nous allons maintenant nous intéresser à une transition vers le spectre continu : une

onde électromagnétique de fréquence $\omega > R_\infty/\hbar$ et de polarisation $\vec{e}_s$ arrive sur un atome d'hydrogène dans son état fondamental. Dans un langage corpusculaire, la condition $\omega > R_\infty/\hbar$ implique que l'énergie des photons est suffisante pour ioniser l'atome en éjectant son électron, ce qui donne un exemple très simple d'effet photo-électrique, et un cas où l'on peut mener jusqu'au bout des calculs analytiques. D'après la règle d'or de Fermi et la définition (12.1) de la section efficace, la section efficace de production des photo-électrons est, au premier ordre de la théorie des perturbations en W

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar\mathcal{F}} |\langle f|W|i\rangle|^2 \frac{\mathcal{V}m_e k_e}{(2\pi)^3 \hbar^2} \quad (14.54)$$

où $\vec{k}_e$ est le vecteur d'onde de l'électron final. Lorsque $\hbar\omega \gg R_\infty$ (mais $\hbar\omega \ll m_e c^2$ de façon à préserver une cinématique non relativiste et à prévenir la production de paires électron-positron¹¹), on peut négliger l'interaction de l'électron final avec le proton et prendre pour état final une onde plane : c'est l'approximation de Born

$$\langle \vec{r} | f \rangle = \varphi_f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}}$$

Notons que l'approximation dipolaire n'est pas valable dans les conditions cinématiques définies ci-dessus. L'état initial est décrit par la fonction d'onde (14.31) de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. L'élément de matrice $\langle f|W|i\rangle$ est donné par (14.46)

$$\langle f|W|i\rangle = \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \vec{e}_s \cdot \int d^3r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_e) \cdot \vec{r}} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r})\right)$$

soit, en intégrant par parties et en remarquant que $\vec{e}_s \cdot \vec{k} = 0$

$$\begin{aligned} \langle f|W|i\rangle &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \frac{\hbar(\vec{e}_s \cdot \vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}} \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}_e) \cdot \vec{r}} e^{-r/a_0} \\ &= \left(-\frac{q_e}{2m_e}\right) |\vec{A}_0| \frac{\hbar(\vec{e}_s \cdot \vec{k}_e)}{\sqrt{\mathcal{V}\pi a_0^3}} \frac{8\pi/a_0}{(q^2 + 1/a_0^2)^2} \end{aligned} \quad (14.55)$$

où nous avons défini $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_e$: $\hbar\vec{q}$ est le transfert d'impulsion entre le photon initial et l'électron final. Pour calculer l'intégrale dans (14.55) nous avons utilisé

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{-\lambda r} &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr e^{-\lambda r} \int_{-1}^{+1} e^{iqr \cos \theta} d \cos \theta \\ &= \frac{2\pi}{q} \int_0^\infty r dr \sin qr e^{-\lambda r} \\ &= \frac{2\pi}{q} \operatorname{Im} \int_0^\infty r dr e^{iqr} e^{-\lambda r} = \frac{4\pi}{q} \operatorname{Im} \frac{1}{(\lambda - iq)^2} = \frac{8\pi\lambda}{(\lambda^2 + q^2)^2} \end{aligned}$$

11. Cette approximation est valable dans le cas des rayons X, dont l'énergie va de 1 à 100 keV.

Rassemblant tous les facteurs dans (14.54) on obtient

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\alpha\hbar}{m_e \omega a_0^5} \frac{|\vec{e}_s \cdot \hat{k}_e|^2 k_e^3}{[(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 + 1/a_0^2]^4}} \quad (14.56)$$

Explicitons (14.56) en choisissant $\vec{k}$ parallèle à Oz et une polarisation linéaire $\vec{e}_s$ parallèle à Ox ; soit $(\Omega = \theta, \phi)$ les angles polaires définissant $\hat{k}_e$

$$(\vec{e}_x \cdot \hat{k}_e)^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \phi$$

Cette quantité est maximale lorsque $\vec{e}_x$ et $\vec{k}_e$ sont parallèles, soit $\theta = \pi/2$ et $\phi = 0$ ou π . Le dénominateur dans (14.56) varie lentement avec θ , car, dans les conditions cinématiques définies ci-dessus, on déduit de la conservation de l'énergie

$$\frac{k}{k_e} \simeq \frac{\hbar k_e}{2m_e c} = \frac{v_e}{2c} \ll 1$$

où v_e est la vitesse des photoélectrons, et

$$(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 \simeq k_e^2 \left(1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta\right)$$

Les électrons sont donc éjectés de façon préférentielle dans un plan perpendiculaire au vecteur d'onde incident et parallèlement au champ électrique de l'onde. Si l'onde incidente n'est pas polarisée, on doit ajouter de façon incohérente les contributions des polarisations suivant Ox et Oy et faire la moyenne

$$\frac{1}{2} \left[(\vec{e}_x \cdot \hat{k}_e)^2 + (\vec{e}_y \cdot \hat{k}_e)^2 \right] = \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

ce qui donne toujours une émission préférentielle dans le plan perpendiculaire à $\vec{k}$

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{non pol}} = \frac{16\alpha}{m_e \omega a_0^5} \frac{k_e^3 \sin^2 \theta}{[(\vec{k} - \vec{k}_e)^2 + 1/a_0^2]^4} \simeq \frac{16\alpha}{m_e \omega a_0^5 k_e^5} \frac{\sin^2 \theta}{\left[1 - \frac{v_e}{c} \cos \theta\right]^4} \quad (14.57)$$

Dans les conditions cinématiques choisies, on peut négliger $1/a_0^2$ par rapport à q^2 , car

$$\frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} \gg R_\infty = \frac{e^2}{2a_0} \Rightarrow (k_e a_0)^2 \gg \frac{m_e e^2}{\hbar^2} a_0 = 1$$

Une remarque importante est que nous avons pu traiter l'effet photoélectrique dans un cadre semi-classique, sans introduire le concept de photon, contrairement à une idée largement répandue selon laquelle le concept de photon est nécessaire pour expliquer l'effet de seuil (§ 1.3.2). Dans l'approche semi-classique, l'effet de seuil est dû à la condition de résonance : l'effet

photoélectrique n'est appréciable que si l'onde lumineuse est en résonance entre le niveau fondamental E_0 et un niveau E_C du spectre continu : $E_C - E_0 = \hbar\omega$. L'effet photoélectrique s'explique sans photon, mais pas sans $\hbar$!

14.3.4 Champ électromagnétique quantifié : émission spontanée

Nous avons souvent fait appel à la notion de photon pour l'interprétation intuitive des résultats de la théorie semi-classique, bien qu'à strictement parler ce concept soit étranger à cette théorie. À moins d'utiliser un argument détourné¹² comme celui du § 5.2.5, on ne peut pas calculer la probabilité d'émission spontanée par un atome dans un état excité, car il n'y a pas de champ électromagnétique classique préexistant et le terme d'interaction $\propto \vec{A} \cdot \vec{P}$ est nul. Il est nécessaire de faire appel au concept de champ électromagnétique quantifié développé au § 11.3.3, car les opérateurs d'annihilation $a_{\vec{k}s}$ et de création $a_{\vec{k}s}^\dagger$ sont susceptibles de changer le nombre de photons. De façon plus précise, si $n_{\vec{k}s}$ est le nombre de photons dans le mode de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de polarisation s , nous allons nous intéresser aux transitions avec émission d'un photon : $n_{\vec{k}s} \rightarrow n_{\vec{k}s} + 1$ ou avec absorption d'un photon : $n_{\vec{k}s} \rightarrow n_{\vec{k}s} - 1$, l'émission spontanée dans le mode $(\vec{k}, s)$ correspondant au cas $n_{\vec{k}s} = 0$. Rappelons le développement du champ électromagnétique quantifié (11.79) à $t = 0$ dans un volume $L^3 = \mathcal{V}$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \sum_{s=1}^2 \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left(a_{\vec{k}s} \vec{e}_s(\hat{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + a_{\vec{k}s}^\dagger \vec{e}_s^*(\hat{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right)$$

Le couplage entre le champ électromagnétique¹³ et l'atome est, au premier ordre en $\vec{A}$

$$W = -\frac{q_e}{m_e} \vec{A} \cdot \vec{P} \quad (14.58)$$

Ce couplage *indépendant du temps* $\vec{A} \cdot \vec{P}$ fait intervenir les termes

$$a_{\vec{k}s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_s(\hat{k}) \cdot \vec{P}) \quad (14.59)$$

et

$$a_{\vec{k}s}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{P}) \quad (14.60)$$

12. Cet argument utilise la distribution de Planck, qui contient implicitement le concept de photon : en effet, la probabilité d'occupation d'un mode du champ électromagnétique est donnée par la théorie quantique de l'oscillateur harmonique. Il n'est donc pas surprenant que l'on puisse calculer l'émission spontanée.

13. On doit prendre le champ électromagnétique (11.79) à $t = 0$, c'est-à-dire dans le point de vue de Schrödinger $\vec{A}_S = \vec{A}_H(t = 0) = \vec{A}$, car nous utilisons le point de vue de Schrödinger dans les calculs perturbatifs et les opérateurs $\vec{A}$ et $\vec{P}$ doivent être pris dans ce point de vue. Dans les paragraphes 14.1.1 à 14.1.3, la dépendance par rapport au temps du champ classique est fixée par une source externe, celle qui produit l'onde électromagnétique incidente, alors que le champ quantifié est indépendant de toute source extérieure.

Le terme (14.59) détruit un photon et le terme (14.60) crée un photon dans le mode $(\vec{k}, s)$. Soit $|i, n_{\vec{k}s}\rangle$ un état initial où i décrit l'état de l'atome et $|f, n_{\vec{k}s} \pm 1\rangle$ un état final. Les éléments de matrice non nuls de $a_{\vec{k}s}$ et $a_{\vec{k}s}^\dagger$ sont donnés par (11.16) et (11.17)

$$\begin{aligned}\langle n_{\vec{k}s} + 1 | a_{\vec{k}s}^\dagger | n_{\vec{k}s} \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s} + 1} \\ \langle n_{\vec{k}s} - 1 | a_{\vec{k}s} | n_{\vec{k}s} \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}s}}\end{aligned}\quad (14.61)$$

Nous allons examiner l'émission spontanée correspondant au cas $n_{\vec{k}s} = 0$ et nous reviendrons brièvement sur l'absorption et l'émission induites en fin de sous-section. La quantité physique intéressante est la probabilité par unité de temps pour que l'atome émette un photon de vecteur d'onde $\simeq \vec{k}$ et de polarisation s dans un angle solide $d\Omega$, $\Omega = (\theta, \phi)$, autour de $\vec{k}^{14}$. Pour obtenir cette probabilité, nous avons besoin de la densité d'états du photon

$$D(\omega) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \omega^2 d\omega d\Omega \quad (14.62)$$

avec $\omega_k \rightarrow \omega$. La probabilité de transition par unité de temps est donnée par la règle d'or de Fermi (9.170) avec un photon final $(\vec{k}, s)$ d'énergie $\hbar\omega$

$$d\Gamma_{fi}^s(\vec{k}, s) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_i - E_f)) \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \omega^2 d\omega d\Omega \quad (14.63)$$

l'élément de matrice $\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle$ étant donné par (contrairement au § 14.3.2, nous avons maintenant $E_i > E_f$ et $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$)

$$\begin{aligned}\langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | W | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle &= -\frac{q}{m_e} \langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | \vec{A} \cdot \vec{P} | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle \\ &= -\frac{q}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V} \omega}} \\ &\quad \times \langle f, n_{\vec{k}s} = 1 | a_{\vec{k}s}^\dagger e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{P}) | i, n_{\vec{k}s} = 0 \rangle \\ &\simeq iq_e \omega_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega \mathcal{V}}} \langle f | (\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{R}) | i \rangle\end{aligned}\quad (14.64)$$

Nous avons utilisé l'approximation dipolaire $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \simeq 1$ et exprimé l'élément de matrice de $\vec{P}$ à l'aide de (14.48).

14. En toute rigueur, on doit préciser que l'on se place dans le référentiel où l'atome initial est au repos. La conservation de l'énergie implique dans ce référentiel

$$E_i - E_f = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_{\text{at}}}$$

Le deuxième terme est l'énergie de recul, qui sera discutée en (14.106). En général cette énergie de recul est négligeable : tout se passe comme si l'atome était infiniment lourd, $M_{\text{at}} \rightarrow \infty$.

Pour obtenir la probabilité d'émission d'un photon dans l'angle solide $d\Omega$, il faut intégrer (14.63) sur ω ; la fonction δ fixe l'énergie du photon à

$$\hbar\omega = E_i - E_f = \hbar\omega_0$$

ce qui donne, en utilisant (14.64) et en définissant $\vec{R}_{fi} = \langle f | \vec{R} | i \rangle$

$$\frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} = \frac{\alpha\omega_0^3}{2\pi c^2} |\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{R}_{fi}|^2 \quad (14.65)$$

Une expression équivalente utilise le moment dipolaire $\vec{D} = q_e \vec{R}$

$$\frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{\omega_0^3}{2\pi\hbar c^3} \right) |\vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \quad (14.66)$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition Γ , qui est l'inverse de la vie moyenne τ de l'état excité : $\tau = 1/\Gamma$, il faut intégrer sur Ω et sommer sur les deux états de polarisation

$$\Gamma = \frac{1}{\tau} = \sum_{s=1}^2 \int \frac{d\Gamma_{fi}^s}{d\Omega} d\Omega \quad (14.67)$$

Afin de calculer l'élément de matrice sous la forme (14.65) par exemple, nous allons nous placer dans une représentation où $\vec{R}$ est diagonal¹⁵

$$\vec{R}_{fi} = \int d^3r \varphi_f^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi_i(\vec{r}) \quad (14.68)$$

et nous allons séparer la partie radiale dépendant de r et la partie angulaire dépendant de $\hat{r}$ dans l'intégrale (14.68) en écrivant $\vec{r} = r\hat{r}$. Afin de traiter un cas concret, nous prenons comme exemple la transition $2p \rightarrow 1s$ de l'atome d'hydrogène¹⁶. La fonction d'onde initiale s'écrit en fonction de sa partie radiale (10.96) et de sa partie angulaire qui est l'harmonique sphérique $Y_1^m(\hat{r})$

$$\varphi_i^m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4!a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^m(\hat{r}) \quad (14.69)$$

tandis que la fonction d'onde finale est donnée par (14.31). Il est commode d'introduire les composantes sphériques (10.64) des vecteurs $\vec{e}_s(\hat{k})$ et $\vec{r}$ et de remarquer¹⁷ que le produit scalaire $\vec{e}_s^* \cdot \hat{r}$ vaut

$$\vec{e}_s^* \cdot \hat{r} = (\vec{e}_s \cdot \hat{r})^* = \left(\sum_{q=\pm 1,0} e_{sq}^* \hat{r}_q \right)^* = \sum_{q=\pm 1,0} e_{sq} \hat{r}_q^*$$

15. Afin de simplifier les formules, nous ne tenons pas compte du spin, dont on montre facilement qu'il ne joue aucun rôle.

16. Dans le cas général d'un état initial i de moment angulaire (j_i, m_i) et d'un état final f de moment angulaire (j_f, m_f) , on utilisera le théorème de Wigner-Eckart pour exprimer l'élément de matrice des composantes sphériques D_q de $\vec{D}$ sous la forme (14.53).

17. Le produit scalaire de deux vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ est donné en fonction de leurs coordonnées sphériques par

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{q=\pm 1,0} a_q^* b_q = \sum_{q=\pm 1,0} (-1)^q a_{-q} b_q$$

D'autre part le projecteur (11.100) orthogonal à $\vec{k}$ s'écrit en coordonnées sphériques

$$\sum_{s=1}^2 e_{sq}(\hat{k}) e_{sq'}^*(\hat{k}) = \delta_{qq'} - \hat{k}_q \hat{k}_{q'}^*$$

ce qui donne pour la partie angulaire

$$\left| \sum_s \vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \langle f | \hat{r} | i \rangle \right|^2 = \sum_{qq'} (\delta_{qq'} - \hat{k}_q \hat{k}_{q'}^*) \langle f | \hat{r}_q^* | i \rangle \langle i | \hat{r}_{q'} | f \rangle$$

L'élément de matrice $\langle f | \hat{r}_q^* | i \rangle$ se calcule aisément en remarquant que d'après (10.64) $\hat{r}_q$ est proportionnel à l'harmonique sphérique $Y_1^q(\hat{r})$; si le nombre quantique magnétique de l'état initial est m

$$\langle f | \hat{r}_q^* | i, m \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int d^2\hat{r} [Y_1^q(\hat{r})]^* Y_1^m(\hat{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \delta_{qm}$$

en utilisant les relations d'orthogonalité (10.55) des harmoniques sphériques, d'où

$$\left| \sum_s \vec{e}_s^*(\hat{k}) \cdot \langle f | \hat{r} | i \rangle \right|^2 = \frac{4\pi}{3} (1 - |\hat{k}_m|^2)$$

Le facteur $(1 - |\hat{k}_m|^2)$ vaut $(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta)$ pour $m = \pm 1$ et $(1 - \cos^2 \theta)$ pour $m = 0$, ce qui donne la distribution angulaire du photon émis si l'état initial a une valeur de m bien déterminée. Si l'état initial est non polarisé, on vérifie que la distribution angulaire est bien sûr isotrope, puisqu'il n'y a pas de direction privilégiée

$$\frac{1}{3} \left[2 \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) + (1 - \cos^2 \theta) \right] = \frac{2}{3}$$

Pour obtenir la probabilité totale de transition (14.67) on intègre sur Ω et le résultat est le même dans les trois cas $m = \pm 1, 0$

$$\int d\Omega \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) = \int d\Omega (1 - \cos^2 \theta) = \frac{8\pi}{3}$$

La partie angulaire donne donc en tout un facteur $32\pi^2/9$. La partie radiale de l'élément de matrice vaut d'après (14.31) et (14.69)

$$\langle f | r | i \rangle = \frac{1}{a_0^4 \sqrt{4! \pi}} \int_0^\infty r^4 dr \exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right) = \sqrt{\frac{4!}{\pi}} \left(\frac{2}{3}\right)^5 a_0$$

La combinaison de tous les résultats précédents donne la probabilité de transition $\Gamma(2p \rightarrow 1s)$

$$\Gamma(2p \rightarrow 1s) = \left[\frac{\alpha \omega_0^3}{2\pi c^2} \right] \left[\frac{4!}{\pi} \left(\frac{4}{9}\right)^5 a_0^2 \right] \left[\frac{32\pi^2}{9} \right] \quad (14.70)$$

et compte tenu de

$$\omega = \frac{3}{4} \frac{R_\infty}{\hbar} = \frac{3}{8} \frac{\alpha^2 m_e c^2}{\hbar} \quad \text{et de} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e c^2} = \frac{\hbar}{\alpha m c}$$

on peut mettre le résultat sous la forme finale, en rappelant (*cf.* § 1.5.3) que $\hbar/(m_e c^2) = 1.29 \times 10^{-21} \text{ s}$

$$\Gamma(2p \rightarrow 1s) = \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right) \left(\frac{4}{9} \right)^4 \simeq 6.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1} \quad \tau = \frac{1}{\Gamma} \simeq 1.6 \times 10^{-9} \text{ s} \quad (14.71)$$

Revenons sur l'aspect qualitatif de ces résultats. Partant de (14.52) ou de (14.65) avec $|\vec{e}_s^* \cdot R_{fi}| \sim a$, où a est une dimension caractéristique de l'atome ($a \simeq 10^{-10} \text{ m}$), nous obtenons l'estimation

$$\Gamma \sim \frac{\alpha \omega_0^3}{c^2} a^2 = \alpha \left(\frac{a \omega_0}{c} \right)^2 \omega_0 \sim \alpha^3 \omega_0 \sim \alpha^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar} \right)$$

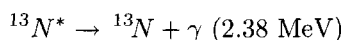
En effet, la vitesse v de l'électron sur son orbite¹⁸ est $v \sim \alpha c$. La fréquence caractéristique ω_0 est donnée par $\hbar \omega_0 \sim 1 \text{ eV}$, soit $\omega_0 \sim 1.5 \times 10^{15} \text{ rad.s}^{-1}$, et la vie moyenne τ de l'état excité est estimée à

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \sim 2 \times 10^{-9} \text{ s}$$

La vie moyenne d'états excités se désexcitant par transition dipolaire électrique est effectivement comprise entre $\sim 10^{-7}$ et $\sim 10^{-9} \text{ s}$. Il est instructif d'examiner également le cas d'un niveau excité d'un noyau se désintégrant par émission d'un photon γ . L'énergie typique d'un tel photon est $\sim 1 \text{ MeV}$, ce qui correspond à une longueur d'onde $\lambda \simeq 10^{-12} \text{ m}$. Comme les dimensions du noyau sont de l'ordre du fermi (ou femtomètre), $R \simeq 10^{-15} \text{ m}$, le rapport $R/\lambda \ll 1$ et l'approximation dipolaire électrique est *a priori* justifiée. Pour estimer la vie moyenne, il faut multiplier le résultat de physique atomique par un facteur 10^{-18} pour tenir compte du changement d'échelle d'énergie : $1 \text{ eV} \rightarrow 1 \text{ MeV}$, et par un facteur 10^{10} pour tenir compte du changement de dimension, $a \rightarrow R$, soit en tout un facteur 10^{-8} . L'estimation pour la vie moyenne de l'état excité d'un noyau est donc

$$\tau_{\text{noyau}} \sim 10^{-8} \tau_{\text{atome}} \sim 10^{-15} \text{ s}$$

Un exemple est la désintégration d'un état excité de l'azote¹³



dont la vie moyenne est de 10^{-15} s , en accord qualitatif avec notre estimation.

18. Les facteurs supposés « voisins de l'unité » de ce type d'estimation ne le sont pas toujours : l'estimation ci-dessus diffère de la valeur exacte (14.71) par un facteur $(8/3)(4/9)^4 \simeq 1/10$!

Revenons brièvement pour conclure à l'émission et l'absorption stimulées. Si l'on prend en compte les facteurs (14.61)–(14.62) pour l'absorption et l'émission stimulées, il n'y a aucune modification à la probabilité d'absorption (14.50). En revanche, si l'atome se trouve dans une cavité de volume $\mathcal{V}$ contenant $\mathcal{N}_{\vec{k}s}$ photons dans le mode $(\vec{k}, s)$, la probabilité semi-classique d'émission est proportionnelle à la densité $n_{\vec{k}s} = \mathcal{N}_{\vec{k}s}/\mathcal{V}$ de photons, alors que l'utilisation du champ quantifié donne un facteur $(\mathcal{N}_{\vec{k}s} + 1)/\mathcal{V}$. La correction est en général négligeable, sauf dans le cas des cavités micro-ondes supraconductrices où le nombre de photons est petit (appendice B).

14.4 Manipulation d'atomes par laser

14.4.1 Équations de Bloch optiques

On sait depuis longtemps que la lumière exerce des forces sur la matière, l'exemple le plus connu étant la pression de radiation. Cependant, lorsque la lumière provient de sources conventionnelles, ces forces sont très faibles. C'est seulement depuis une vingtaine d'années que l'utilisation des lasers a permis d'exercer des forces importantes sur un atome, forces qui peuvent aller jusqu'à 10^5 fois la force de pesanteur ! Une application particulièrement intéressante est le *refroidissement laser*, dont nous donnerons un exemple élémentaire au § 14.4.3. Nous utiliserons le modèle de l'atome à deux niveaux : deux niveaux atomiques E_a et E_b ($E_b > E_a$) sont séparés de $E_b - E_a = \hbar\omega_0$. On supposera que E_a est le niveau fondamental de l'atome, ou bien un niveau métastable dont la durée de vie est suffisamment longue pour ne pas intervenir dans la discussion. Cet atome est placé dans une onde électromagnétique créée par un laser dont le vecteur d'onde $\vec{k}$ est parallèle à Oz et dont la fréquence ω est proche de la fréquence de résonance : $\omega \simeq \omega_0$. Comme au § 5.2.2, on appelle *désaccord* la différence $\delta = \omega - \omega_0$. Le champ électrique à la position de l'atome est de la forme

$$\vec{E} = \vec{e}_s E_0 \cos \omega t \quad (14.72)$$

On ignore pour le moment les degrés de liberté de translation de l'atome, en le supposant infiniment lourd¹⁹. Dans ces conditions, le hamiltonien H est donné par (5.27)

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2}\omega_0 & -dE_0 \cos \omega t \\ -dE_0 \cos \omega t & \frac{\hbar}{2}\omega_0 \end{pmatrix} \quad (14.73)$$

19. Plus précisément on traite classiquement les degrés de liberté de translation, ce qui suppose que l'on doit avoir $\hbar\Gamma \gg E_R$, où Γ est la largeur de raie et E_R l'énergie de recul (14.106). On suppose aussi le milieu suffisamment dilué afin de pouvoir négliger les collisions entre atomes.

Les lignes et les colonnes sont dans l'ordre (a, b) , le zéro d'énergie en l'absence de champ a été choisi à mi-chemin entre E_a et E_b et d est l'élément de matrice $(\vec{D} \cdot \vec{e}_s)_{ab}$ de la composante z de l'opérateur moment dipolaire électrique entre les deux niveaux. On introduit comme au § 5.2.2 la fréquence de Rabi ω_1

$$\omega_1 = -\frac{dE_0}{\hbar} \quad (14.74)$$

Le signe moins tient compte de la charge négative de l'électron, de sorte que $\omega_1 > 0$. Avec cette définition on peut récrire H en fonction des matrices de Pauli σ_1 et σ_3

$$\frac{1}{\hbar} H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & \frac{1}{2}\omega_0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\omega_0 \sigma_3 + (\omega_1 \cos \omega t) \sigma_1 \quad (14.75)$$

En général l'état quantique de l'atome sera décrit par un opérateur densité ρ . En effet, l'atome est en interaction permanente avec le champ électromagnétique, et même si l'ensemble champ+atome était dans un état pur, l'état de l'atome ne serait pas un état pur : comme nous l'avons vu au § 6.1.3, l'état de l'atome est décrit en prenant la trace partielle sur les variables du champ, et le résultat est un opérateur densité, l'opérateur densité réduit de l'atome, représenté par une matrice 2×2 agissant dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux, et non un vecteur de cet espace. Rappelons que la matrice densité doit être hermitique : $\rho = \rho^\dagger$, de trace unité : $\text{Tr } \rho = 1$ et positive. Les résultats de l'exercice 6.4.4 permettent d'écrire la matrice densité la plus générale en fonction d'un vecteur réel $\vec{b}$, le *vecteur de Bloch*, tel que $\vec{b}^2 \leq 1$

$$\rho = \frac{1}{2} \left(I + \sum_{i=1}^3 \sigma_i b_i \right) = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \quad (14.76)$$

Suivant les notations usuelles, on appelle $(u, v, -w)$ les composantes du vecteur de Bloch : $u = b_1$, $v = b_2$ et $w = -b_3$. On peut aussi écrire ρ sous forme matricielle explicite

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) & \rho_{ab} \\ \rho_{ba} & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - w & u - iv \\ u + iv & 1 + w \end{pmatrix} \quad (14.77)$$

Dans l'écriture de ρ , nous avons tenu compte de la condition $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$. La quantité $w = \rho_{bb} - \rho_{aa}$ mesure la différence de population entre les niveaux E_b et E_a : si l'on dispose d'une collection de $\mathcal{N}$ atomes, en moyenne $\mathcal{N}\rho_{aa}$ seront dans l'état E_a et $\mathcal{N}\rho_{bb}$ dans l'état E_b . Les éléments de matrice non diagonaux $\rho_{ab} = \rho_{ba}^*$ sont appelés les *cohérences*. La présence de cohérences non nulles, c'est-à-dire de phases, est bien sûr le signal d'effets quantiques.

L'équation d'évolution de ρ est donnée par (6.26)

$$i\dot{\rho} = \left[\frac{1}{\hbar} H, \rho \right] \quad (14.78)$$

Le commutateur dans (14.78) peut se calculer directement en multipliant les matrices, mais il est plus élégant d'utiliser la forme de Bloch et les relations de commutation (3.52) des matrices de Pauli. On obtient

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \omega_0 v \\ \dot{v} &= -\omega_0 u + 2\omega_1 w \cos \omega t \\ \dot{w} &= -2\omega_1 v \cos \omega t \end{aligned} \quad (14.79)$$

Il sera commode, afin de compléter ces équations et de justifier une approximation ultérieure, de les récrire en fonction de la cohérence $r = \rho_{ab} = (u - iv)/2$

$$\dot{w} = -2i\omega_1(r - r^*) \cos \omega t \quad (14.80)$$

$$\dot{r} = i\omega_0 r - i\omega_1 w \cos \omega t \quad (14.81)$$

Ces équations d'évolution de la matrice densité sont hamiltoniennes, c'est-à-dire régies par une loi du type (14.78) dépendant d'un hamiltonien. Cette évolution est unitaire, car (14.78) est équivalent à

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(t=0)U^\dagger(t, 0)$$

où $U(t)$ est l'opérateur unitaire d'évolution (4.11). Cependant ces équations sont en fait incomplètes : l'interaction de l'atome avec son environnement conduit à des équations qui ne sont pas de la forme (14.78), et donc à une évolution non hamiltonienne. C'est l'ensemble atome+environnement qui obéit à une évolution unitaire, et si l'on s'intéresse seulement aux degrés de liberté de l'atome, l'évolution n'est plus hamiltonienne. Ce phénomène est familier en mécanique statistique, lorsque l'on considère l'interaction d'un système avec un réservoir, et l'évolution non unitaire est étroitement liée à la dissipation²⁰. Nous allons traiter le cas d'un environnement de l'atome limité au champ électromagnétique, ce qui est une excellente approximation pour des atomes piégés par des lasers qui forment un milieu dilué, mais il pourrait y avoir d'autres sources d'évolutions non hamiltoniennes, comme des collisions avec d'autres atomes dans un milieu dense²¹. Le calcul fondé sur (14.78) tient compte de l'interaction avec le champ laser, et donc de l'absorption et de l'émission induites, mais non de l'interaction avec le champ quantifié, et il néglige l'émission spontanée. En raison de l'émission spontanée, l'atome dans

20. Voir par exemple Le Bellac et Mortessagne [2001], chapitre 2.

21. Un exemple est le milieu actif pour un laser, qui est décrit par des équations de Bloch optiques analogues à (14.82)-(14.83) : voir par exemple Mandel et Wolf [1995], chapitre 18.

le niveau E_b tend à revenir dans le niveau E_a en émettant un photon avec une probabilité Γ par unité de temps (*cf.* (14.67)). L'équation différentielle donnant $\dot{\rho}_{bb}$ doit donc inclure dans son second membre un terme $-\Gamma\rho_{bb}$, qui conduirait, en l'absence de champ laser, à une décroissance exponentielle de la population du niveau E_b en $\exp(-\Gamma t)$. On en déduit que le membre de droite de l'équation différentielle pour w contient un terme en $-\Gamma(w+1)$. Les cohérences doivent également décroître car, en l'absence de champ laser, l'atome revient dans son niveau fondamental E_a pour $t \gg \tau = 1/\Gamma$, et la matrice densité a pour seul élément non nul $\rho_{aa} = 1$. Il est possible de montrer que la probabilité de décroissance des cohérences à l'approximation que nous considérons est $\Gamma/2$. Les équations (14.80) et (14.81) deviennent

$$\dot{w} = -2i\omega_1(r - r^*) \cos \omega t - \Gamma(w+1) \quad (14.82)$$

$$\dot{r} = i\omega_0 r - i\omega_1 w \cos \omega t - \frac{\Gamma}{2} r \quad (14.83)$$

Nous allons transformer ces équations en utilisant comme au § 5.2.2 l'approximation quasi-résonante. On remarque que si $\omega_1 \ll \omega_0$, l'équation (14.83) implique que $r \sim \exp(i\omega_0 t)$ alors que w est lentement variable. Écrivant $\cos \omega t$ sous forme d'exponentielles complexes et négligeant les termes rapidement variables en $\exp(\pm i(\omega + \omega_0)t)$, les équations (14.82)–(14.83) deviennent

$$\dot{w} = -i\omega_1(e^{-i\omega t} r - e^{i\omega t} r^*) - \Gamma(w+1) \quad (14.84)$$

$$\dot{r} = i\omega r - \frac{i}{2}\omega_1 w (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) - \frac{\Gamma}{2} r \quad (14.85)$$

Dans le second membre de (14.84), tous les termes sont lentement variables: Pour mettre en évidence l'évolution temporelle des termes du second membre de (14.85), on pose

$$e^{-i\omega t} r = r' \quad e^{-i\omega t} \dot{r} = i\omega r' + \dot{r}'$$

ce qui donne, en multipliant (14.85) par $\exp(-i\omega t)$

$$\dot{r}' = i(\omega_0 - \omega)r' - \frac{i}{2}\omega_1 w (1 + e^{-2i\omega t}) - \frac{\Gamma}{2} r'$$

L'approximation quasi-résonante consiste à négliger dans cette équation le terme rapidement variable $\exp(-2i\omega t)$. On aboutit donc au système d'équations différentielles

$$\dot{w} = -i\omega_1(r' - r'^*) - \Gamma(w+1) \quad (14.86)$$

$$\dot{r}' = i(\omega_0 - \omega)r' - \frac{i}{2}\omega_1 w - \frac{\Gamma}{2} r' \quad (14.87)$$

14.4.2 Forces dissipatives et forces réactives

Lorsque l'atome interagit avec le champ laser pendant un intervalle de temps $t \gg \tau$, on atteint un régime stationnaire (ou permanent) $\dot{w} = \dot{r} = 0$, où il est facile d'écrire la solution du système différentiel (14.86)-(14.87). En passant par l'étape intermédiaire

$$r' = \frac{i\omega_1 w/2}{i(\omega_0 - \omega) - \Gamma/2}$$

on trouve pour la valeur stationnaire w_{st} de w

$$w_{st} = -\frac{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (14.88)$$

On en déduit $\rho_{bb} = (1 + w_{st})/2 < 1/2$: il ne peut pas y avoir d'*inversion de population*, c'est-à-dire de situation où le niveau excité est plus peuplé que le niveau fondamental. Le résultat stationnaire pour r' est

$$r'_{st} = \frac{i\omega_1}{2} \frac{\Gamma/2 - i(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (14.89)$$

Il est commode d'introduire le *paramètre de saturation*, s , proportionnel à l'intensité $\mathcal{I}$ du laser (rappelons que le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$)

$$s = \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \propto \mathcal{I}_{\text{laser}} \quad (14.90)$$

ce qui permet de réécrire

$$\rho_{bb,st} = \frac{1}{2} (1 + w_{st}) = \frac{s}{2(1+s)} \quad r'_{st} = \frac{i}{\omega_1} \left(\frac{s}{1+s} \right) \left(\frac{\Gamma}{2} - i\delta \right) \quad (14.91)$$

Ces résultats permettent d'obtenir les forces exercées par la lumière laser sur un atome en régime permanent. Un argument simple permet de trouver l'équivalent de la pression de radiation sur l'atome : comme en régime permanent la probabilité de trouver un atome dans l'état excité E_b est $\rho_{bb,st}$, le nombre moyen de photons spontanés émis par unité de temps est

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \Gamma \rho_{bb,st} = \frac{\Gamma}{2} \frac{s}{1+s} \quad (14.92)$$

Ces photons sont émis de façon isotrope et contribuent à un mouvement désordonné de l'atome, que nous étudierons dans la sous-section suivante. Mais l'atome une fois revenu dans son état fondamental absorbe un photon du champ laser, et ces photons ont tous leur impulsion $\hbar\vec{k}$ dans la même direction. Le nombre de photons absorbés est le même que le nombre de photons émis

spontanément, et l'atome est soumis à une force due à l'absorption de photons égale à la variation d'impulsion par unité de temps

$$\boxed{\vec{F}_{\text{diss}} = \hbar \vec{k} \left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{s}{1+s} \right) = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma}{2} \frac{\omega_1^2/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2}} \quad (14.93)$$

Lorsque le paramètre de saturation $s \gg 1$, l'accélération $\vec{a}$ approche sa valeur maximale

$$\vec{a}_{\text{max}} = \frac{\hbar \vec{k}}{M} \frac{\Gamma}{2} \quad (14.94)$$

où M est la masse de l'atome. Pour le sodium, $\Gamma^{-1} = 1.6 \times 10^{-8}$ s et $a_{\text{max}} \sim 10^6 \text{ ms}^{-2}$, environ 10^5 fois l'accélération de la pesanteur.

Nous allons retrouver le résultat (14.93) pour la force dissipative en examinant la force exercée par le champ électromagnétique (14.72) sur le dipôle atomique. La forme de l'opérateur dipôle dans l'espace à deux dimensions de l'atome à deux niveaux est $D = d\sigma_1$, et, d'après (6.21), sa valeur moyenne est

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= d \text{Tr}(\rho \sigma_1) = d(\rho_{ab} + \rho_{ab}^*) \\ &= d(r + r^*) = d(r' e^{i\omega t} + r'^* e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{2ds}{\omega_1(1+s)} \left[-\frac{\Gamma}{2} \sin \omega t + \delta \cos \omega t \right] \end{aligned} \quad (14.95)$$

où nous avons utilisé l'expression (14.91) de r' en régime permanent. Cette valeur moyenne du dipôle exhibe un terme $\propto \cos \omega t$ en phase avec le champ (14.72) et un terme en quadrature de phase $\propto \sin \omega t$. Le travail dW/dt fourni par unité de temps par le champ (14.72) sur le dipôle, c'est-à-dire la puissance fournie à l'atome²², est

$$\frac{dW}{dt} = E_0 \cos \omega t \frac{d\langle D \rangle}{dt}$$

Compte tenu de (14.95) qui donne immédiatement $d\langle D \rangle/dt$

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)} \left[\frac{\Gamma}{2} \cos^2 \omega t + \delta \sin \omega t \cos \omega t \right] \quad (14.96)$$

et en prenant la moyenne temporelle

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = -\frac{2ds\omega E_0}{\omega_1(1+s)} \frac{\Gamma}{4} = \frac{\hbar \omega s}{1+s} \frac{\Gamma}{2} \quad (14.97)$$

22. Il est utile de se souvenir de l'oscillateur harmonique forcé élémentaire à une dimension

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = f \cos \omega t$$

La puissance fournie à l'oscillateur est $f(\cos \omega t)dx/dt$. La correspondance avec le présent problème est donnée par $f \rightarrow E_0$ et $x \rightarrow \langle D \rangle$.

Le nombre de photons absorbés par seconde est

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{s}{1+s} \right)$$

en accord avec (14.92). L'étude élémentaire de l'oscillateur harmonique forcé montre que c'est la composante de l'élongation en quadrature de phase avec la force externe qui est responsable de la dissipation par frottement, d'où l'expression « force dissipative » pour la pression de radiation. La partie en phase avec le champ est appelée « réactive ». Le modèle que nous avons étudié ne contient aucune dépendance spatiale, et dans ce cas la valeur moyenne du terme de $\langle D \rangle$ en phase avec le champ ne produit aucun travail. Pour obtenir un résultat non nul, il faut introduire une dépendance spatiale. On montre alors (exercice 14.5.7) que la composante réactive de la force dépend du gradient de la fréquence de Rabi

$$\vec{F}_{\text{react}} = -\frac{\hbar\delta}{2} \frac{\vec{\nabla}\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4 + \omega_1^2/2} \quad (14.98)$$

La force réactive est nulle dans une onde plane, où la fréquence de Rabi ω_1 est indépendante de $\vec{r}$. Elle ne transmet aucune énergie aux atomes. Si par exemple la variation spatiale de la fréquence de Rabi est due à l'utilisation de plusieurs ondes laser, la force réactive a pour effet de redistribuer d'énergie entre les différentes ondes. Contrairement à la force dissipative, la force réactive ne sature pas lorsque $s \rightarrow \infty$.

La force réactive dérive d'un potentiel

$$\vec{F}_{\text{react}} = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) \quad U(\vec{r}) = \frac{\hbar\delta}{2} \ln \left(1 + \frac{\omega_1^2(\vec{r})/2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right)$$

Pour $\delta < 0$, une région où $\omega_1^2(\vec{r})$ est maximum apparaît comme un puits de potentiel attractif pour l'atome. Dans un champ laser inhomogène, l'atome est attiré vers les régions de forte intensité. Ceci est mis à profit dans de nombreuses applications pratiques où l'on manipule des objets microscopiques ; on fabrique ainsi des « pincettes optiques », qui permettent par exemple de manipuler des brins d'ADN.

14.4.3 Refroidissement Doppler

Une application importante de la force dissipative (14.93) est le *refroidissement Doppler* des atomes. Ceux-ci sont modélisés comme précédemment par un système à deux niveaux séparés de $\hbar\omega_0$. Les atomes sont localisés dans des faisceaux laser provenant de directions opposées avec une fréquence identique ω proche de la résonance ω_0 , mais telle que $\omega < \omega_0$, c'est-à-dire avec un désaccord $\delta = \omega - \omega_0 < 0$. Afin de simplifier la discussion, nous nous limitons au refroidissement suivant un axe que nous prendrons comme

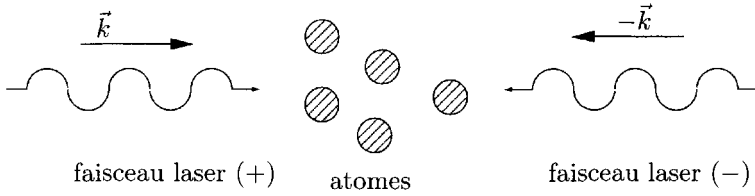


FIG. 14.1 – Principe du refroidissement Doppler.

axe des z , et à deux faisceaux lasers dont les vecteurs d'onde sont $\vec{k} \parallel \hat{z}$ et $-\vec{k} \parallel -\hat{z}$ (figure 14.1). Pour un refroidissement suivant les trois dimensions d'espace, il faudrait prendre six faisceaux laser, deux suivant chaque axe, avec des vecteurs d'onde opposés. Nous allons nous placer dans le cas d'un paramètre de saturation $s \ll 1$, ce qui permettra de négliger le terme ω_1^2 dans le dénominateur de (14.93).

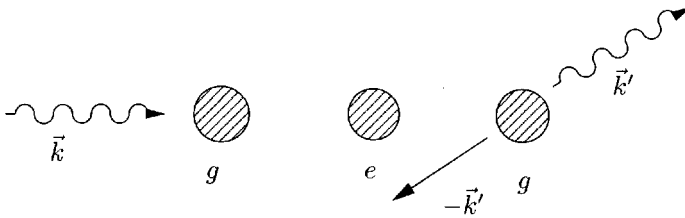


FIG. 14.2 – Cycle de fluorescence.

Un atome dans le champ des lasers subira des *cycles de fluorescence*. Un cycle de fluorescence comprend l'absorption d'un photon d'un des deux lasers par un atome dans son état fondamental, ce qui envoie cet atome dans son état excité, suivi de l'émission spontanée d'un photon qui remet l'atome dans son état fondamental (figure 14.2). Soit $n_+(v)$ le nombre de cycles de fluorescence par seconde que subit un atome de vitesse v (dirigée suivant l'axe des z puisque notre discussion est limitée à une dimension), avec absorption de photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, et $n_-(v)$ le nombre de cycles de fluorescence avec absorption d'un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$. Si un atome se dirige vers la gauche ($v < 0$), il verra par effet Doppler des photons de fréquence $\omega - kv$ s'ils proviennent du faisceau $+\vec{k}$, et de fréquence $\omega + kv$ s'ils proviennent du faisceau $-\vec{k}$. En raison du désaccord négatif ($\omega < \omega_0$), les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$ seront plus proches de la résonance et absorbés en plus grand nombre que les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$, qui sont eux, au contraire, plus éloignés de la résonance. Ceci donnera pour ces atomes une force dirigée vers la droite. Inversement, pour des atomes se dirigeant vers la droite ($v > 0$), la force sera dirigée vers la gauche. En résumé, les atomes se dirigeant vers la gauche absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$, les

atomes se dirigeant vers la droite absorberont préférentiellement les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$: dans les deux cas les atomes seront ralentis et nous voyons apparaître une force de type visqueux ; c'est pourquoi on parle parfois de « mélasse optique ». La force moyenne sur un atome de vitesse v est

$$\langle \vec{F} \rangle = \hbar \vec{k} [n_+(v) - n_-(v)] \quad (14.99)$$

avec

$$n_{\pm}(v) = \frac{\Gamma}{4} \frac{\omega_1^2}{(\delta \mp kv)^2 + \Gamma^2/4} \quad (14.100)$$

Développons (14.100) en puissances de la vitesse à l'ordre v

$$n_{\pm}(v) \simeq \frac{\Gamma \omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \left[1 \pm \frac{2\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \right] \quad (14.101)$$

Cette équation donne le nombre moyen $2n_0$ de cycles de fluorescence par seconde

$$n_0 = \frac{1}{2} (n_+(v) + n_-(v)) = \frac{\Gamma \omega_1^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} = \frac{\Gamma}{2} s \quad (14.102)$$

et la force, proportionnelle à

$$n_+(v) - n_-(v) = n_0 \frac{4\delta kv}{\delta^2 + \Gamma^2/4}$$

qui vaut

$$\langle \vec{F} \rangle = \hbar \vec{k} (n_+(v) - n_-(v)) = n_0 v \frac{4\hbar \delta k^2}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \hat{k} \quad (14.103)$$

Le coefficient de viscosité γ est défini par

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v \quad (14.104)$$

et sa valeur se déduit de (14.103)

$$\gamma = -\frac{\langle F \rangle}{Mv} = -n_0 \frac{4\hbar k^2}{M} \frac{\delta}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \quad (14.105)$$

qui est un nombre positif car $\delta < 0$. Si l'on prend n_0 constant, le coefficient de viscosité est maximal pour $\delta = -\Gamma/2$

$$\gamma_{\max} = \frac{4\hbar k^2}{M\Gamma} n_0 = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{8n_0}{\hbar\Gamma} E_R \quad (14.106)$$

L'énergie $E_R = Mv_R^2/2$ est appelée *énergie de recul* : c'est l'énergie cinétique de recul lorsque l'atome émet un photon d'impulsion $\hbar k$, et c'est aussi l'énergie

acquise par un atome qui absorbe un photon d'impulsion $\hbar k$. La vitesse v_R est la vitesse de recul. Donnons quelques valeurs numériques pour le rubidium. La longueur d'onde de la transition est $\lambda = 0.78 \mu\text{m}$, la largeur de raie $\Gamma = 3.7 \times 10^7 \text{s}^{-1}$, la masse de l'atome $M = 1.41 \times 10^{-25} \text{kg}$. Ces valeurs correspondent à une énergie $\hbar\Gamma = 2.4 \times 10^{-8} \text{eV}$, une vitesse de recul $v_R = \hbar k/m = 5.8 \times 10^{-3} \text{ms}^{-1}$ et une énergie de recul $E_R = 1.5 \times 10^{-11} \text{eV}$, et donc à une température de recul $T_R = E_R/k_B = 1.7 \times 10^{-7} \text{K}$.

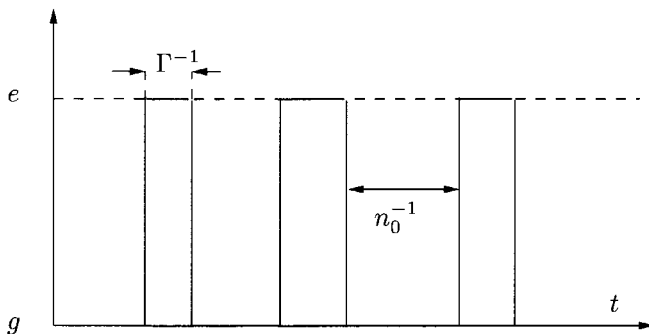


FIG. 14.3 – Séquence de cycles de fluorescence.

Avec ces valeurs numériques typiques, on trouve

$$\gamma \simeq 5 \times 10^{-3} n_0 = 2.5 \times 10^{-3} \Gamma s$$

On peut choisir le paramètre de saturation $s \ll 1$ de telle sorte que

$$\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1} \ll \gamma^{-1}$$

Dans ces conditions, il existe trois échelles de temps bien distinctes dans le problème (figure 14.3). La relation $\Gamma^{-1} \ll n_0^{-1}$ montre que les cycles de fluorescence ne se recouvrent pas et sont indépendants. Considérons un intervalle de temps δt , avec $\Gamma^{-1} \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$. Soit $N_{\pm}$ le nombre de cycles de fluorescence $\pm k$ dans cet intervalle δt . La condition $\delta t \ll \gamma^{-1}$ implique que la vitesse v de l'atome n'a pas le temps de varier de façon appréciable sous l'action de la force de viscosité pendant l'intervalle δt et on pourra faire des moyennes sur cet intervalle, avec $\langle N_{\pm} \rangle = n_{\pm}(v)\delta t$. Soit $p(N_+, N_-; \delta t)$ la probabilité d'observer N_+ cycles $+k$ et N_- cycles $-k$ pendant δt . L'indépendance des cycles de fluorescence permet d'écrire pour cette probabilité une loi de Poisson

$$p(N_+, N_-; \delta t) = \frac{\langle N_+ \rangle^{N_+} \langle N_- \rangle^{N_-} \exp[-(\langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle)]}{N_+! N_-!}$$

Désignons par $\hbar q_1, \dots, \hbar q_{(N_+ + N_-)}$ les $N_+ + N_-$ impulsions des photons émis spontanément par l'atome dans l'intervalle δt et $\hbar Y$ leur somme

$$\hbar Y = \hbar q_1 + \dots + \hbar q_{(N_+ + N_-)}$$

Les photons émis ne sont pas corrélés entre eux et $\langle Y \rangle = 0$. La variation moyenne d'impulsion pendant le temps δt est due uniquement aux photons absorbés

$$\langle p(\delta t) \rangle = (n_+(v) - n_-(v)) \hbar k \delta t \quad (14.107)$$

Évaluons maintenant la variance de $p(\delta t)$

$$\Delta p^2(\delta t) = \langle p^2(\delta t) - \langle p(\delta t) \rangle^2 \rangle$$

Comme les photons spontanés ne sont pas corrélés avec les photons absorbés, $\langle Yk \rangle = 0$ et on peut traiter séparément les deux contributions. La contribution à la variance des photons absorbés est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\text{abs}} = \hbar^2 k^2 \langle (N_+ - N_-)^2 - (\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle)^2 \rangle = 2\hbar^2 k^2 n_0 \delta t$$

où nous avons utilisé la propriété classique de la loi de Poisson : $\Delta N_{\pm}^2 = \langle N_{\pm} \rangle$ ainsi que l'indépendance des cycles + et - : $\langle N_+ N_- \rangle = \langle N_+ \rangle \langle N_- \rangle$, tandis que la contribution des photons émis est

$$\Delta p^2(\delta t)|_{\text{em}} = \hbar^2 \langle Y^2 \rangle = \hbar^2 \sum_{i=1}^{N_+ + N_-} q_i^2 = \hbar^2 k^2 \langle N \rangle = 2n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Comme nous avons réduit la cinématique à une dimension, nous avons admis que les photons émis ont une impulsion $\pm \hbar k$ avec une probabilité $1/2$ ²³. En additionnant les deux contributions²⁴

$$\Delta p^2(\delta t) = 4n_0 \hbar^2 k^2 \delta t \quad (14.108)$$

Ainsi que nous allons le montrer, ce résultat correspond à une marche au hasard dans un espace des impulsions à une dimension. Dans une marche au hasard sur une droite, un marcheur effectue un pas de longueur l à droite ou un pas de longueur l à gauche avec une probabilité $1/2$. Au bout de N pas, il a parcouru une distance moyenne $\langle x \rangle = 0$, mais la distance quadratique moyenne n'est pas nulle

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 = N l^2$$

et si chaque pas prend un temps τ , au bout d'un temps $\delta t = N\tau$

$$\Delta x^2 = \frac{l^2}{\tau} \delta t = 2D \delta t \quad (14.109)$$

23. Dans le cas d'une cinématique à trois dimensions et de photons émis de façon isotrope, nous aurions $\langle \hbar^2 Y^2 \rangle = \hbar^2 k^2 / 3$.

24. Avec une cinématique à trois dimensions

$$\Delta p^2(\delta t) = \frac{8}{3} n_0 \hbar^2 k^2 \delta t$$

Cette équation définit le *coefficient de diffusion*²⁵ D . La proportionnalité de Δp^2 à δt dans (14.108) justifie l'expression « marche au hasard dans l'espace des impulsions », avec un coefficient de diffusion $D = 2n_0\hbar^2k^2$.

Dans cette marche au hasard, l'énergie cinétique E de l'atome augmente de $\Delta p^2(\delta t)/(2M)$. La diffusion tend donc à augmenter l'énergie cinétique. Par analogie avec la mécanique statistique, on définit une température fictive T par

$$E = \frac{1}{2}k_B T \quad (14.110)$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Si E augmente, T augmente, et on peut dire que les atomes s'échauffent sous l'effet de l'émission spontanée, qui crée un mouvement désordonné analogue à une agitation thermique. Cependant la température est bien fictive, car il n'existe pas d'équilibre thermodynamique : la température (14.110) est parfaitement définie pour un atome isolé ! La viscosité a tendance à ralentir les atomes, et donc à les « refroidir ». Lorsque les deux effets s'équilibrent, on obtient une « température d'équilibre » qui est la température fictive des atomes en régime permanent. Cette température est en fait une façon imagée de mesurer leur vitesse moyenne. D'après (14.104), la viscosité donne la contribution suivant à la variation temporelle de l'énergie

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{\text{visc}} = \frac{1}{2} M \frac{d}{dt} v^2 = -M\gamma v^2 = -\frac{\gamma p^2}{M} \quad (14.111)$$

et en ajoutant l'effet de l'émission spontanée

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2n_0\hbar^2k^2}{M} - \frac{\gamma p^2}{M}$$

La condition de régime permanent $dE/dt = 0$ donne la valeur d'équilibre p_{eq}^2 de p^2 , et choisissant $\gamma = \gamma_{\text{max}}$ suivant (14.106)

$$p_{\text{eq}}^2 = \frac{2Mn_0\hbar^2k^2}{\gamma_{\text{max}}} = \frac{1}{2}\hbar\Gamma M$$

ce qui donne pour la température $T = T_D$

$$\boxed{k_B T_D = \frac{p_{\text{eq}}^2}{M} = \frac{1}{2}\hbar\Gamma} \quad (14.112)$$

Cette température, de l'ordre de $100\mu\text{K}$ pour le rubidium, est appelé *température Doppler*. La condition d'équilibre $dE/dt = 0$ peut aussi s'écrire en fonction du coefficient de diffusion

$$D = \gamma p_{\text{eq}}^2 = \frac{\gamma k_B T}{M} \quad (14.113)$$

25. Voir la note 1 du chapitre 12.

Cette équation qui relie les coefficients de diffusion D et de viscosité γ à la température est très générale²⁶ et est connue sous le nom de *relation d'Einstein*. Dans le cas du mouvement brownien, les forces de viscosité et la diffusion ont une origine commune : les collisions de la particule brownienne avec les molécules du fluide, et il n'est pas surprenant que coefficients de diffusion et de viscosité ne soient pas indépendants. Diffusion et viscosité sont deux processus dissipatifs : dans notre cas le processus dissipatif est l'émission spontanée, dont nous avons vu qu'il correspond à une évolution non unitaire.

14.4.4 Piège magnéto-optique

Le refroidissement Doppler est le refroidissement maximum que l'on peut obtenir si on se limite au modèle de l'atome à deux niveaux. Pour aller plus loin, et en particulier pour mettre au point des mécanismes de refroidissement encore plus efficaces, permettant de descendre au microkelvin et même au delà, il faut faire appel à la sous-structure, fine et hyperfine, des niveaux. Nous allons considérer un exemple élémentaire, en prenant un niveau fondamental $j = 0$ et un niveau excité $j = 1$ que nous allons scinder en trois sous-niveaux grâce à l'effet Zeeman. Ceci nous permettra de piéger les atomes non seulement en vitesse, comme dans le refroidissement Doppler, mais aussi dans l'espace. Comme on doit utiliser un champ magnétique pour obtenir l'effet Zeeman, on appelle un tel piège *piège magnéto-optique*. On utilise un champ magnétique inhomogène orienté suivant Oz et dépendant de z , $B(z) = -bz$, $b > 0$. Les niveaux Zeeman de l'état excité ont des énergies $-\mu bz$ ($m_e = -1$), 0 ($m_e = 0$) et $+\mu bz$ ($m_e = 1$), en prenant Oz comme axe de quantification du moment angulaire.

Reprenons la configuration des faisceaux lasers du refroidissement Doppler étudié précédemment, mais en supposant maintenant ces faisceaux polarisés circulairement à gauche : la conservation du moment angulaire suivant Oz (cf. (10.106)-(10.107)) implique que $m_e = -1$ si l'atome absorbe un photon de vecteur d'onde $+\vec{k}$ et $m_e = +1$ s'il absorbe un photon de vecteur d'onde $-\vec{k}$: figure 14.4. Supposons le désaccord $\delta < 0$; pour $z > 0$, le signe de B implique que le niveau $m_e = +1$ est plus bas que le niveau $m_e = -1$, et ce niveau est donc plus proche de la résonance (figure 14.4). Ceci entraîne que l'atome va absorber de façon préférentielle les photons de vecteur d'onde $-\vec{k}$ et il sera repoussé vers la gauche. L'inverse se produit si l'atome se trouve dans la zone $z < 0$ où le niveau $m_e = -1$ est plus bas que le niveau $m_e = +1$: l'atome absorbe préférentiellement des photons de vecteur d'onde $+\vec{k}$ et il est repoussé vers la droite. L'action des deux faisceaux se traduit par l'existence de deux forces : une force de viscosité $-\gamma Mv$ et une force de rappel $-\kappa z$

$$F = -\gamma Mv - \kappa z \quad (14.114)$$

26. Voir par exemple Le Bellac et Mortessagne[2001], chapitre 5.

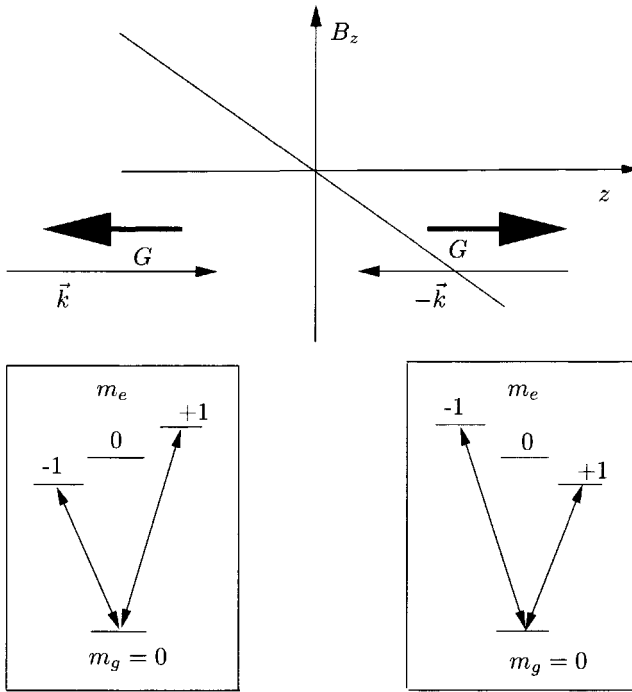


FIG. 14.4 – Niveaux Zeeman pour $z < 0$ et $z > 0$.

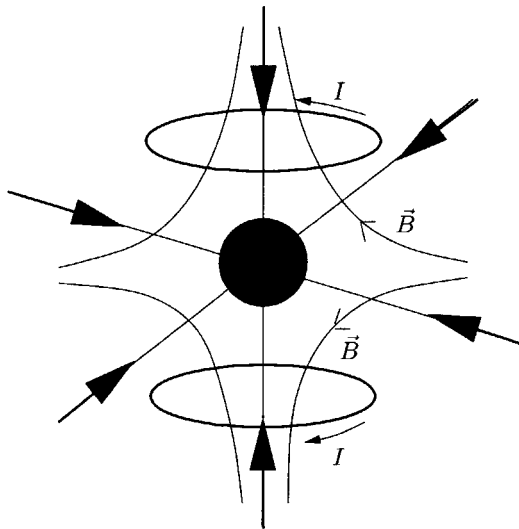


FIG. 14.5 – Configuration des lasers pour le piège magnéto-optique.

auxquelles s'ajoute une diffusion dans l'espace des impulsions. Non seulement les atomes sont ralentis, mais ils sont aussi confinés par la force de rappel dans la région $z \simeq 0$: c'est le principe du piège magnéto-optique. En pratique on souhaite confiner les atomes dans les trois directions d'espace, et il faut donc utiliser six faisceaux lasers polarisés (figure 14.5).

14.5 Exercices

14.5.1 Perturbation au second ordre et forces de van der Waals

Les forces de van der Waals entre deux atomes neutres sont dues à des interactions entre moments dipolaires induits. On se propose de les évaluer dans le cas de deux atomes d'hydrogène se trouvant dans leur état fondamental $|\varphi_0\rangle$. Pour ce faire, nous aurons besoin de la théorie des perturbations au second ordre.

1. Perturbations au second ordre. On détermine d'abord $|\varphi_1\rangle$ en supposant $|\varphi_0\rangle$ non dégénéré ; les notations sont celles du § 14.1.2. Montrer que

$$(E_0 - H_0)|\varphi_1\rangle = (W - E_1)|\varphi_0\rangle$$

En poussant les développements (14.3) et (14.4) au second ordre en λ , montrer que

$$E_2 = \langle \varphi_0 | W | \varphi_1 \rangle$$

On rappelle que $|\varphi_0\rangle \equiv |n\rangle$ et que

$$H_0|n\rangle = E_0^{(n)}|n\rangle \quad H_0|k\rangle = E_0^{(k)}|k\rangle$$

Montrer l'identité

$$I = |n\rangle\langle n| + (E_0 - H_0)^{-1} \left(\sum_{k \neq n} |k\rangle\langle k| \right) (E_0 - H_0)$$

et en déduire (14.7)

$$E_2 = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n | W | k \rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}}$$

2. Les protons des deux atomes d'hydrogène se trouvent à une distance $R \gg a_0$, a_0 étant le rayon de Bohr (1.34) ; $\vec{R}$ est le vecteur joignant le proton 1 au proton 2 et l'axe Oz est orienté suivant $\vec{R}$. On note $\vec{r}_1$ le vecteur joignant l'électron 1 au proton 1, $\vec{r}_2$ le vecteur joignant l'électron 2 au proton 2 et $\vec{d}_i = q_e \vec{r}_i$ le moment dipolaire électrique de l'atome i . Montrer qu'en physique

classique l'énergie d'interaction des deux dipôles est

$$\begin{aligned} W &= \frac{e^2}{R^3} \left[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 - 3(\vec{r}_1 \cdot \hat{R})(\vec{r}_2 \cdot \hat{R}) \right] \\ &= \frac{e^2}{R^3} [x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2] \end{aligned}$$

3. Pour obtenir l'expression quantique de W , on utilise le principe de correspondance en remplaçant les nombres $x_1, \dots, z_2$ par des opérateurs $X_1, \dots, Z_2$

$$W = \frac{e^2}{R^3} [X_1 X_2 + Y_1 Y_2 - 2Z_1 Z_2]$$

Montrer que la valeur moyenne de W est nulle au premier ordre de la théorie des perturbations

$$E_1 = \langle \varphi_{01} \varphi_{02} | W | \varphi_{01} \varphi_{02} \rangle = 0$$

4. Au second ordre, si $|\varphi_\alpha\rangle$ désigne un état excité ou un état du continu d'énergie E_α

$$E_2 = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{|\langle \varphi_{\alpha_1} \varphi_{\alpha_2} | W | \varphi_{01} \varphi_{02} \rangle|^2}{-2R_\infty - E_{\alpha_1} - E_{\alpha_2}}$$

où R_∞ est la constante de Rydberg (1.35). Pour obtenir un ordre de grandeur de E_2 , on néglige E_{α_1} et E_{α_2} au dénominateur. En déduire

$$E_2 \sim -6 \frac{e^2}{R} \left(\frac{a_0}{R} \right)^5$$

L'énergie d'interaction varie comme R^{-5} et la force comme R^{-6} . Montrer que l'estimation précédente n'est plus valable si $R \gtrsim \hbar c / R_\infty$. Pour des distances $R \gg \hbar c / R_\infty$, on montre que la loi de forces est en R^{-7} .

14.5.2 Corrections d'ordre α^2 aux niveaux d'énergie

Suggestion. Dans ce problème comme dans le suivant, il est recommandé pour les application numériques d'écrire les énergies sous la forme d'un facteur sans dimensions multipliant $R_\infty = 13.61 \text{ eV}$.

En plus de la structure fine, il existe deux autres corrections $O(v/c)^2$ aux niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène (ou plus généralement des atomes à un seul électron).

1. Correction cinématique. La forme relativiste de l'énergie cinétique de l'électron est

$$K = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 + \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_e^3 c^2} + O\left(\frac{p^6}{m_e^5 c^4}\right)$$

Vérifier ce développement en puissances de p/mc valable si $p/(mc) \ll 1$. Le premier terme est l'énergie de masse, une simple constante additive, le second est la forme non relativiste de l'énergie cinétique prise en compte dans la résolution de l'équation de Schrödinger ; l'objectif est d'évaluer les corrections dues au troisième terme $O(p^4)$. Montrer que ce terme donne une correction $\Delta E_K \propto \alpha^2 (v/c)^2 = O(\alpha^4)$ aux niveaux d'énergie. Afin d'évaluer cette correction de façon précise, on utilise la théorie des perturbations. Montrer qu'au premier ordre de cette théorie

$$\Delta E_K = -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \int d^3 p p^4 |\tilde{\varphi}(\vec{p})|^2$$

où $\tilde{\varphi}(\vec{p})$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$

$$\tilde{\varphi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \varphi(\vec{r})$$

Calculer ΔE_K pour le niveau $1s$ de l'atome d'hydrogène. Les intégrales nécessaires se déduisent de

$$I(x) = \int_0^\infty \frac{dq}{q^2 + x} = \frac{\pi}{2} x^{-1/2}$$

par dérivation par rapport à x ($x > 0$).

2. Terme de Darwin. La seconde correction vient de ce qu'à l'approximation non relativiste de l'équation de Dirac, la localisation de l'électron ne peut se faire au mieux qu'à $\hbar/(m_e c)$ près, où $\hbar/(m_e c)$ est la longueur d'onde Compton de l'électron. Pour tenir compte de cette extension spatiale, on écrit l'énergie potentielle

$$E_{\text{pot}} = \int d^3 u f(|\vec{u}|) V(\vec{r} + \vec{u})$$

où V est l'énergie potentielle habituelle et $f(u)$, à symétrie sphérique, possède une extension $\sim \hbar/(m_e c)$ et est normalisée par

$$\int d^3 u f(u) = 1$$

En développant $V(\vec{r} + \vec{u})$ au voisinage de $u = 0$, montrer que

$$E_{\text{pot}} = V(\vec{r}) + O\left[\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^2\right] \nabla^2 V + O\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^4$$

L'équation de Dirac donne le coefficient exact

$$E_{\text{pot}} = V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V + O\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^4$$

Le deuxième terme de E_{pot} est appelé *terme de Darwin*. Montrer que ce terme n'affecte que les ondes s et vaut

$$\Delta E_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\varphi(\vec{r}=0)|^2$$

Évaluer numériquement ΔE_D pour le niveau $1s$ de l'hydrogène.

14.5.3 Atomes muoniques

Le muon (μ) est un lepton en tout point identique à l'électron, à l'exception de sa masse $m_\mu \simeq 105.7 \text{ MeV}/c^2 \simeq 206.8 m_e$ (cf. 1.1.3). Un atome peut capturer un muon négatif μ^- qui se met sur orbite autour du noyau atomique, exactement comme un électron, et forme un « atome muonique ».

1. Calculer en fonction du numéro atomique Z de l'atome, du rapport m_μ/m_e et de $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ le rayon de Bohr a_μ^Z du muon pour un atome de numéro atomique Z en écrivant

$$a_\mu^Z = \frac{1}{Z\alpha(A)} a_0$$

On tiendra compte de la masse réduite dans le calcul de $\alpha(A)$. Comparer a_μ^Z au rayon R du noyau pour l'aluminium ($Z = 13$, $A = 27$) et le plomb ($Z = 82$, $A = 208$). On rappelle que R est donné par $R \simeq 1.2 \times A^{1/3} \text{ fm}$, A étant le nombre de nucléons.

2. Soit $\Delta E_e^{Z=1} = \Delta E_e = E_{2p} - E_{1s}$ la différence d'énergie entre les niveaux $2p$ et $1s$ de l'atome d'hydrogène. Calculer la quantité correspondante ΔE_μ^Z pour un atome de numéro atomique Z en fonction de ΔE_e et de m_μ/m_e . Comparer aux valeurs expérimentales

$$\text{Aluminium : } \Delta E_\mu^{13} = 0.3443 \text{ MeV}$$

$$\text{Plomb : } \Delta E_\mu^{82} = 5.96 \text{ MeV}$$

Quel est le type de photon émis dans ces transitions ?

3. Montrer que l'effet d'écran des électrons des couches internes est négligeable. Au contraire une correction importante vient de l'extension finie du noyau atomique. Montrer que le potentiel vu par le muon n'est pas $-Ze^2/r$ mais

$$V(r) = \frac{Ze^2}{2R} \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - 3 \right] \quad r < R$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad r > R$$

On se propose de calculer le déplacement des niveaux par la méthode des perturbations au premier ordre, en partant de la solution pour le potentiel coulombien exact. Quelle perturbation $W(r)$ doit-on utiliser ? Montrer

qualitativement que l'effet d'extension finie du noyau est négligeable sauf pour les états s , et que dans ce cas le déplacement vaut pour Z petit et une orbite de nombre quantique principal n , de rayon grand par rapport à R

$$\Delta E_n = \frac{2\pi Z e^2}{5} R^2 |\varphi_n(\vec{r}=0)|^2$$

où $\varphi_n(\vec{r})$ est la fonction d'onde non perturbée. Montrer que pour l'état $1s$

$$\Delta E = \frac{4}{5} R_\infty \left(\frac{Z^2 m'_\mu}{m_e} \right) \left(\frac{R}{a_\mu^Z} \right)^2$$

où m'_μ est la masse réduite. Évaluer numériquement ce déplacement pour l'aluminium²⁷. La correction va-t-elle dans le bon sens ? Est-il raisonnable d'appliquer la méthode dans le cas du plomb ?

4. Montrer que le rapport des énergies caractéristiques de la structure fine aux énergies caractéristiques des niveaux est le même pour l'électron et le muon. Montrer en revanche que ce rapport est plus grand d'un facteur m_μ/m_e pour la structure hyperfine.

14.5.4 Atomes de Rydberg

Les résultats de l'exercice 10.7.9 permettent d'écrire les fonctions d'onde radiales $u_{nl}(r)$ de l'atome d'hydrogène sous la forme

$$u_{nl}(r) = \sum_{q=0}^{n-l-1} c_q \left(\frac{r}{a_0} \right)^{q+l+1} \exp \left(-\frac{r}{na_0} \right)$$

Pour écrire l'expression du coefficient c_q , il est commode de définir $k = n - l$

$$c_q = \left(-\frac{2}{n} \right)^q \frac{(k-1)!(2l+1)!}{q!(q+2l+1)!(k-q-1)!}$$

où c_0 est fixé par la condition de normalisation de la fonction d'onde. On s'intéressera à des valeurs de $n \gg 1$, typiquement $n \sim 50$.

1. Montrer que si l prend sa valeur maximale $l = l_{\max} = n - 1$, la fonction d'onde radiale présente un pic étroit au voisinage du point $r = a_0 n^2$. Quelle est la largeur Δr de ce pic ? Suggestion : étudier la fonction

$$f_n(x) = x^n e^{-x/n}$$

27. En dehors de la correction d'extension finie du noyau, la correction la plus importante vient de la polarisation du vide due à la création de paires virtuelles électron-positron. La correction pour l'état $1s$ de l'aluminium est de -2.25 KeV . Le signe de cette correction est négatif : en effet, à courte distance, α est plus grand que $1/137$ et le muon qui voit une charge plus grande est plus lié que si α était constant. Ce comportement de α a été mentionné dans la note 36 du chapitre 1 : α croît avec l'énergie, et d'après l'inégalité de Heisenberg, courte distance implique grande impulsion, et donc grande énergie.

et montrer que pour $x \simeq x_0 = n^2$

$$f_n(x) \simeq f_n(x_0) \exp \left[-\frac{1}{2n^3} (x - x_0)^2 \right]$$

Montrer qualitativement que si $l < n - 1$, la dispersion Δr est plus grande que pour $l = n - 1$.

2. On s'intéresse maintenant à la partie angulaire. D'après (10.53)

$$Y_l^m(\theta, \phi) = e^{im\phi} f_l^m(\theta)$$

En utilisant $L_+ Y_l^l = 0$ et l'expression (10.48) de L_+ , montrer que

$$Y_l^l(\theta, \phi) \propto e^{il\phi} \sin^l \theta$$

En déduire que si $l \gg 1$, $|Y_l^l(\theta, \phi)|^2$ est non nul uniquement au voisinage du plan xOy (c'est-à-dire pour $\theta = \pi/2$), et calculer la dispersion $\Delta\theta$. Que se passe-t-il si $|m| \neq l$?

3. Déduire des deux premières questions que pour $n \gg 1$, les états $l = n - 1$ et $|m| = l$ sont localisés dans un tore horizontal de rayon $n^2 a_0$ dont la section est un cercle de rayon $a_0 n^{3/2}$. Comparer avec les orbites (1.33) obtenues à partir des prescriptions de Bohr.

14.5.5 Terme diamagnétique

Lorsque nous avons établi la forme du hamiltonien (14.23) de l'effet Zeeman, nous avons négligé un terme $\propto \vec{A}^2$, dit *terme diamagnétique*. Pour justifier cette approximation, examinons le cas d'un champ magnétique uniforme et constant $\vec{B}$, une expression possible pour $\vec{A}$ étant (cf. 11.4.2)

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$$

1. Montrer que l'on peut écrire le hamiltonien quantique d'un électron de charge q dans ce champ magnétique sous la forme

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_e} (\vec{P} - q\vec{A})^2 \\ &= \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8m_e} [\vec{R}^2 \vec{B}^2 - (\vec{R} \cdot \vec{B})^2] \\ &= H_0 + H_Z + H_D \end{aligned}$$

où $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ est le moment angulaire orbital. On justifiera soigneusement les commutations d'opérateurs.

2. Identifier H_Z à la partie du hamiltonien Zeeman (14.23) d'origine orbitale, et donner l'ordre de grandeur de ce terme pour un champ magnétique de 1 T lorsque l'électron est lié dans un atome.

On peut écrire le terme diamagnétique H_D sous la forme

$$H_D = \frac{q^2 B^2}{8m_e} \tilde{R}_\perp^2$$

où $\tilde{R}_\perp$ est la composante de $\tilde{R}$ perpendiculaire à $\tilde{B}$. Quel ordre de grandeur peut-on choisir pour $\langle \tilde{R}_\perp^2 \rangle$? En déduire que $|\langle H_D \rangle| \ll |\langle H_Z \rangle|$ pour un électron lié dans un atome, et que le terme diamagnétique peut être négligé dans le calcul de l'effet Zeeman. En revanche, ce terme ne peut pas être négligé dans le calcul des niveaux de Landau, car le rayon des orbites électroniques est alors macroscopique.

14.5.6 Oscillations de Rabi du vide

Supposons la fréquence propre ω d'une cavité proche de la fréquence $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$ d'une transition entre deux niveaux e et g d'un atome, et notons $\delta = \omega - \omega_0$ le désaccord. Si l'atome interagit avec le champ électromagnétique quantifié à l'intérieur de la cavité, on peut, à une excellente approximation, limiter le développement du champ quantifié (11.136) au seul mode de fréquence ω , car ce mode est le seul à interagir de façon résonante avec l'atome. On se place dans une géométrie à une dimension, en retenant uniquement la dépendance en z et une polarisation suivant Ox , de façon à pouvoir traiter le champ comme un scalaire.

1. En utilisant 11.136, montrer que l'on peut écrire pour le champ quantifié E

$$E_H(z, t) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} (ae^{-i\omega t} - a^\dagger e^{i\omega t}) \sin kz$$

On supposera que l'atome se déplace toujours suivant la ligne d'équiphase $\sin kz = 1$.

2. Le hamiltonien atome+champ est

$$H = H_{\text{at}} + H_{\text{champ}} + W$$

où W représente l'interaction entre l'atome et le champ. On choisit comme état d'énergie zéro l'état $|g\rangle$ en l'absence de photon. En déduire la forme de H

$$H = \hbar\omega_0|e\rangle\langle e| + \hbar\omega N + W$$

où N est l'opérateur nombre de photons dans le mode de fréquence ω . Donner le spectre de H en négligeant W dans un premier temps et en supposant $|\delta| \ll \omega_0$, mais $\delta \neq 0$. Soit $\mathcal{H}^{(n)}$ le sous-espace de l'espace de Hilbert formé avec les états de base suivants, où n est le nombre de photons dans la cavité

$$\varphi_n^e = |e \otimes (n-1)\rangle \quad \varphi_n^g = |g \otimes n\rangle$$

Montrer que ces états sont presque dégénérés si l'on ne tient pas compte de W .

3. On définit les opérateurs

$$b = |g\rangle\langle e| \quad b^\dagger = |e\rangle\langle g|$$

et le moment dipolaire de l'atome (cf. § 5.2.2)

$$D = d(b + b^\dagger)$$

Écrire explicitement le terme d'interaction W à l'approximation dipolaire. Montrer que si l'on restreint W aux sous-espaces $\mathcal{H}^{(n)}$

$$W = -i \frac{\hbar \Omega_R}{2} (ab^\dagger - a^\dagger b)$$

avec

$$\hbar \Omega_R = 2d \sqrt{\frac{\hbar \omega}{\varepsilon_0 \mathcal{V}}}$$

La fréquence Ω_R est appelée *fréquence de Rabi du vide*. Quels termes ont été négligés dans l'expression approchée de W et comment peut-on justifier cette approximation ? Le hamiltonien atome+champ utilisant l'expression approchée de W est appelé *hamiltonien de Jaynes-Cummings*.

4. Quelles sont les valeurs de E_n et les états propres correspondants si l'on tient compte de W ? On posera (cf. § 2.3.2)

$$\tan 2\theta_n = \frac{\Omega_R \sqrt{n}}{\delta} = \frac{\Omega_n}{\delta}$$

Tracer qualitativement le spectre des premiers niveaux de H en fonction de δ .

5. L'atome dans l'état excité $|e\rangle$ est envoyé dans la cavité vide de photons suivant une trajectoire telle que $\sin kz = 1$. On se place à la résonance $\delta = 0$. Montrer que la probabilité $p_e(t)$ de le trouver dans l'état $|e\rangle$ après un temps t passé dans la cavité est une fonction périodique de t . On retrouve des oscillations de Rabi (4.36), et comme ces oscillations sont dues à l'interaction de l'atome avec les fluctuations du vide, on les appelle oscillations de Rabi du vide. L'observation expérimentale de ces oscillations est une preuve directe de la quantification du champ électromagnétique. Les valeurs numériques sont²⁸

$$d = 1.1 \times 10^{-26} \text{ C.m} \quad \frac{\omega}{2\pi} = 5.0 \times 10^{10} \text{ Hz} \quad \mathcal{V} = 1.87 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

Comparer à la valeur expérimentale $\Omega_R/(2\pi) = 47 \text{ Hz}$.

6. Calculer $p_e(t)$ hors résonance, et montrer que la fréquence des oscillations est maintenant (toujours dans le cas où il n'y a pas de photons dans la cavité)

$$\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_R^2}$$

28. M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J.-M. Raimond et S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1800 (1996).

Montrer que pour un désaccord $\Omega_R \ll |\delta| \ll \omega_0$, l'atome reste pratiquement toujours dans son état excité : l'émission spontanée est inhibée par la présence de la cavité.

7. Comment doit-on modifier les résultats des deux questions précédentes si la cavité contient exactement n photons ? Si $\delta = 0$, que se passe-t-il lorsque la cavité contient un état cohérent du champ ?

14.5.7 Forces réactives

On reprend le hamiltonien de Jaynes-Cummings de l'exercice précédent 14.5.6 pour un atome à deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ plongé dans le champ électrique quantifié d'une cavité

$$E = i\mathcal{E}(a - a^\dagger) \sin kz \quad \mathcal{E} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0\mathcal{V}}}$$

avec les notations de l'exercice précédent. Le hamiltonien est donné par

$$H = \hbar\omega_0|e\rangle\langle e| + \hbar\omega N + W$$

avec²⁹

$$W = \frac{1}{2} \hbar\Omega_1(ab^\dagger + a^\dagger b)$$

où $b = |g\rangle\langle e|$ et $b^\dagger = |e\rangle\langle g|$. La fréquence Ω_1 définie par

$$\Omega_1(z) = 2 \frac{d\mathcal{E}}{\hbar} \sin kz$$

est une fonction de z .

1. Dans le sous-espace à deux dimensions $\mathcal{H}^{(n)}$ dont une base orthonormée est donnée par les états $|g \otimes n\rangle$ et $|e \otimes (n-1)\rangle$, montrer qu'à une constante additive près le hamiltonien prend la forme

$$H = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \delta & \Omega_1 \sqrt{n} \\ \Omega_1 \sqrt{n} & -\delta \end{pmatrix}$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord. On pose

$$\Omega_{1n}(z) = \sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)} = \sqrt{\delta^2 + \Omega_n^2(z)}$$

et on définit l'angle $\theta_n(z)$ par

$$\cos 2\theta_n(z) = \frac{\delta}{\Omega_{1n}(z)} \quad \sin 2\theta_n(z) = \frac{\Omega_n(z)}{\Omega_{1n}(z)}$$

²⁹. Un choix de phase adéquat pour les vecteurs $|e\rangle$ et $|g\rangle$ a permis d'éliminer les facteurs i de l'exercice précédent.

Montrer que les vecteurs propres de la restriction de H à $\mathcal{H}^{(n)}$ sont

$$\begin{aligned} |\chi_{1n}(z)\rangle &= -\sin\theta_n(z)|g \otimes n\rangle + \cos\theta_n(z)|e \otimes (n-1)\rangle \\ |\chi_{2n}(z)\rangle &= \cos\theta_n(z)|g \otimes n\rangle + \sin\theta_n(z)|e \otimes (n-1)\rangle \end{aligned}$$

Quelles sont les valeurs propres de H ? Calculer la force sur un atome au repos en z lorsque cet atome est dans l'état $|\chi_{1n}\rangle$ ou dans l'état $|\chi_{2n}\rangle$.

2. On supposera par la suite que le champ dans la cavité est celui d'un laser dans un état cohérent, avec un nombre moyen de photons $\langle n \rangle \gg 1$, de telle sorte que $\Delta n \ll \langle n \rangle$. On peut alors écrire une expression classique de ce champ

$$E_L(t, z) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t \sin kz$$

En utilisant (11.93), montrer que

$$\hbar \Omega_1(z) \sqrt{\langle n \rangle} = \hbar \omega_1(z) \quad \omega_1(z) = \frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar} \sin kz$$

où $\omega_1(z)$ est la fréquence de Rabi usuelle (cf. par exemple (14.74)). Dans la discussion précédente, on n'a pas pris en compte l'émission spontanée, qui a pour effet de dépeupler le mode laser au profit du mode du vide. Les taux de transition entre les états à n et à $n-1$ photons sont donnés par

$$\Gamma_{ij}(z) = \Gamma |\langle \chi_{i,n-1}(z) | b + b^\dagger | \chi_{jn}(z) \rangle|^2$$

avec $(i, j) = 1, 2$. Calculer $\Gamma_{ij}(z)$ en fonction des angles $\theta_n(z)$ et $\theta_{n-1}(z)$. On supposera dans toute la suite de l'exercice que le laser est intense, $n \gg 1$ et $\Omega_{1n} \simeq \Omega_{1\langle n \rangle}(z) = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}$.

3. On définit les populations $p_i(z)$ de la manière suivante

$$p_i(z) = \sum_n \langle \chi_{in}(z) | \rho | \chi_{in}(z) \rangle$$

où ρ est l'opérateur densité de l'atome habillé par le champ. En déduire que si $\Omega_{1\langle n \rangle} \gg \Gamma$, les populations obéissent aux équations pilotes

$$\begin{aligned} \dot{p}_1(z) &= -\Gamma_{21}(z)p_1(z) + \Gamma_{12}(z)p_2(z) \\ \dot{p}_2(z) &= \Gamma_{21}(z)p_1(z) - \Gamma_{12}(z)p_2(z) \end{aligned}$$

Quelles sont les valeurs stationnaires des populations p_i^{st} en fonction de z ? Montrer qu'un atome au repos subit une force

$$F(z) = \frac{1}{4} \hbar \frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}} (p_1^{\text{st}}(z) - p_2^{\text{st}}(z))$$

Reporter dans ce résultat les valeurs de p_1^{st} et p_2^{st} et comparer à (14.98).

14.5.8 Énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium

À l'approximation du noyau infiniment lourd, qui est correcte à mieux de 0.1 %, le hamiltonien H des électrons de l'atome d'hélium s'écrit dans une représentation où $\vec{R}$ est diagonal

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

où $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ sont les vecteurs joignant le noyau situé à l'origine aux électrons 1 et 2 ; $Z = 2$ dans le cas de l'hélium, mais il est commode de conserver Z pour un usage ultérieur.

1. Méthode de perturbations. On prend pour hamiltonien non perturbé

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}$$

et comme perturbation

$$W = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Les fonctions d'onde des deux électrons sont alors les fonctions d'onde 1s de l'atome d'hydrogène modifiées pour prendre en compte le fait que $Z \neq 1$

$$\varphi(\vec{r}) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/a_0}$$

où a_0 est le rayon de Bohr. Calculer le déplacement d'énergie au premier ordre de la théorie des perturbations

$$\Delta E = \int d^3r_1 d^3r_2 |\varphi(\vec{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi(\vec{r}_2)|^2$$

On remarquera que ΔE peut s'interpréter comme le double de l'énergie d'une distribution de charges ; en utilisant un raisonnement d'électrostatique, montrer que

$$\Delta E = 2 \int_0^\infty d^3r_2 \rho(r_2) V(r_2)$$

où l'on a introduit les densités de probabilité à symétrie sphérique

$$\rho(r_{1,2}) = |\varphi(\vec{r}_{1,2})|^2$$

et $V(r_2)$ est le potentiel créé en r_2 par la distribution de charges. En déduire (pour $Z = 2$)

$$\Delta E = \frac{5}{4} R_\infty$$

2. Méthode variationnelle. On écrit $\varphi(r)$ en prenant Z dans la fonction d'onde comme paramètre variationnel : $Z \rightarrow z$

$$\varphi(\vec{r}) = \left(\frac{z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-zr/a_0}$$

En déduire la valeur de E

$$E = 2R_\infty(z^2 - 2Zz + \frac{5}{8}z)$$

On pourra simplifier les calculs en observant que, d'après le théorème du viriel, l'énergie cinétique est la moitié de la valeur absolue l'énergie potentielle pour des électrons indépendants. En minimisant cette expression par rapport à z , en déduire la valeur variationnelle de l'énergie

$$E_V = -2R_\infty \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2$$

Évaluer numériquement E_V et comparer la valeur numérique à celle de la méthode perturbative au premier ordre

$$E_P = -8R_\infty + \Delta E$$

et au résultat expérimental $E_{\text{exp}} = -79.0$ eV. Vérifier que $E_V \geq E_{\text{exp}}$. Quels commentaires peut-on faire sur les mérites respectifs de deux méthodes ?

14.6 Bibliographie

La théorie des perturbations et la méthode variationnelle sont exposées dans tous les traités classiques. On pourra se reporter pour plus de détails sur la structure des niveaux d'énergie à Cohen-Tannoudji *et al.* [1973]. Structure fine : chapitre XII, effet Zeeman : complément D_{VI} et structure hyperfine : chapitre XII. Voir également B. Bransden et C. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific and Technical, Harlow (1983). Le cours de C. Cohen-Tannoudji, *Atomic Motion in Laser Light* dans *Optical Coherence and Quantum Optics*, École des Houches, North Holland (1992) contient un exposé très complet de la manipulation d'atomes par laser. Voir également D. Suter, *The Physics of Laser-Atom Interactions*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Appendice A

Théorème de Wigner et renversement du temps

DANS CET APPENDICE, nous allons exposer la démonstration du théorème de Wigner énoncé au § 8.1.1 et examiner l'invariance par rapport au renversement du sens du temps (ou simplement renversement du temps), qui est particulière car l'opérateur qui réalise la symétrie dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ est antiunitaire, et non unitaire comme dans tous les cas que nous avons rencontrés jusqu'ici. Rappelons la définition du § 8.1.1 d'un rayon de l'espace de Hilbert : *un rayon est un vecteur à un facteur de phase près*. Deux vecteurs unitaires φ et $\bar{\varphi}$ qui diffèrent par un facteur de phase : $\varphi = \exp(i\alpha)\bar{\varphi}$ appartiennent à une même classe d'équivalence, qui est précisément un rayon $\tilde{\varphi}$ de $\mathcal{H}$. Comme le module du produit scalaire est indépendant du représentant dans la classe d'équivalence

$$|(\bar{\varphi}, \bar{\chi})| = |(\varphi, \chi)|$$

le *module* du produit scalaire de deux rayons $\tilde{\varphi}$ et $\tilde{\chi}$ est bien défini en choisissant deux représentants arbitraires dans chaque classe d'équivalence

$$|(\tilde{\varphi}, \tilde{\chi})| = |(\varphi, \chi)| \quad (\text{A.1})$$

mais bien évidemment cela n'a pas de sens de parler du produit scalaire de deux rayons. Nous utilisons la notation $(\bullet, \bullet)$ pour le produit scalaire, afin d'éviter les ambiguïtés de la notation de Dirac, qui seraient particulièrement gênantes dans cette annexe.

Soit dans $\mathcal{H}$ une correspondance entre rayons

$$\tilde{\varphi} \rightarrow T\tilde{\varphi} \quad (\text{A.2})$$

telle que le module du produit scalaire soit invariant

$$|(\tilde{\varphi}, \tilde{\chi})| = |(T\tilde{\varphi}, T\tilde{\chi})| \quad (\text{A.3})$$

Le théorème de Wigner énonce qu'il est toujours possible de choisir les phases des vecteurs de telle sorte que la correspondance entre *rayons* devienne une correspondance entre *vecteurs*

$$\varphi \rightarrow U\varphi \quad |(U\varphi, U\chi)| = |(\varphi, \chi)| \quad (\text{A.4})$$

où la transformation U est soit linéaire unitaire

$$(U\varphi, U\chi) = (\varphi, \chi) \quad (\text{A.5})$$

soit antilinéaire unitaire (= antiunitaire)

$$(U\varphi, U\chi) = (\chi, \varphi) = (\varphi, \chi)^* \quad (\text{A.6})$$

A.1 Démonstration du théorème

Soit $\{\chi_i\}$, $i = 1, \dots, N$ une base orthonormée de $\mathcal{H}$ supposé de dimension N , $(\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik}$. Nous allons faire jouer un rôle particulier au premier vecteur de base : *par convention les indices i et k varieront entre 1 et N et les indices j et l entre 2 et N* . Choisissons un représentant $\chi_1'' \equiv \chi_1'$ dans la classe de $T\tilde{\chi}_1$ et un représentant χ_j'' dans la classe de $T\tilde{\chi}_j$, $j = 2, \dots, N$. D'après (A.3), l'ensemble $\{\chi_1'', \chi_j''\}$ forme aussi une base de $\mathcal{H}$ car

$$|(\chi_i'', \chi_k'')| = |(\chi_i, \chi_k)| = \delta_{ik}$$

Considérons l'ensemble des vecteurs φ_j

$$\varphi_j = \chi_1 + \chi_j \quad j = 2, \dots, N \quad (\text{A.7})$$

et soit $T\tilde{\varphi}_j$ le transformé du rayon $\tilde{\varphi}_j$. Si φ_j'' est un représentant de $T\tilde{\varphi}_j$, nous aurons

$$\begin{aligned} |(\chi_1', \varphi_j'')| &= |(\chi_1, \varphi_j)| = 1 \\ |(\chi_j'', \varphi_l'')| &= |(\chi_j, \varphi_l)| = \delta_{jl} \end{aligned}$$

Un représentant φ_j'' de $T\tilde{\varphi}_j$ aura donc des composantes uniquement suivant χ_1' et χ_j''

$$\varphi_j'' = c_j \chi_1' + d_j \chi_j''$$

et ces composantes seront de module unité : $|c_j| = |d_j| = 1$. On peut maintenant choisir des représentants φ_j' et χ_j'

$$\varphi_j' = \frac{1}{c_j} \varphi_j'' \quad \chi_j' = \frac{d_j}{c_j} \chi_j'' \quad (\text{A.8})$$

de sorte que

$$\varphi_j' = \frac{1}{c_j} (c_j \chi_1' + d_j \chi_j'') = \chi_1' + \chi_j' \quad (\text{A.9})$$

Nous avons donc défini une application sur des vecteurs de $\mathcal{H}$

$$\chi_1 + \chi_j \rightarrow (\chi_1 + \chi_j)' = \chi'_1 + \chi'_j$$

telle que $\chi'_1 \in T\tilde{\chi}_1$, $\chi'_j \in T\tilde{\chi}_j$ et $\chi'_1 + \chi'_j \in T(\widetilde{\chi_1 + \chi_j})$. Essayons maintenant de déterminer s'il est possible qu'un vecteur arbitraire ψ se transforme suivant

$$\psi = \sum_{k=1}^N c_k \chi_k \rightarrow \psi' = \sum_{k=1}^N c'_k \chi'_k$$

Si une telle loi de transformation est valide, nous devons avoir d'une part

$$|c'_k| = |(\chi'_k, \psi')| = |(\chi_k, \psi)| = |c_k|$$

et d'autre part

$$(\chi_1 + \chi_j, \psi) = c_1 + c_j \quad (\chi'_1 + \chi'_j, \psi') = c'_1 + c'_j$$

ce qui implique, d'après (A.3), que

$$|c_1 + c_j| = |c'_1 + c'_j| \quad (\text{A.10})$$

Les deux couples de nombres complexes (c_1, c_j) et (c'_1, c'_j) doivent être tels que $|c_1| = |c'_1|$ et $|c_j| = |c'_j|$ et de plus vérifier (A.10). Posons

$$\begin{aligned} c_1 &= |c_1| e^{i\theta_1} & c_j &= |c_j| e^{i\theta_j} \\ c'_1 &= |c'_1| e^{i\theta'_1} & c'_j &= |c'_j| e^{i\theta'_j} \end{aligned}$$

Les angles (θ_1, θ_j) et (θ'_1, θ'_j) sont liés par l'équation

$$\cos(\theta_1 - \theta_j) = \cos(\theta'_1 - \theta'_j) \quad (\text{A.11})$$

qui a deux solutions

$$\theta_1 - \theta_j = \theta'_1 - \theta'_j \quad (\text{A.12})$$

$$\theta_1 - \theta_j = -(\theta'_1 - \theta'_j) \quad (\text{A.13})$$

Examinons le premier cas. On peut redéfinir la phase de ψ' de telle sorte que $c'_1 = c_1$ et donc $\theta'_1 = \theta_1$. Dans ce cas $\theta'_j = \theta_j$ et $c'_j = c_j$

$$\psi' = \sum_k c_k \chi'_k$$

Si l'on considère un autre vecteur $\eta = \sum_k d_k \chi_k$ avec à nouveau $d'_1 = d_1$, on aura

$$(\lambda\psi + \mu\eta)' = \sum_k (\lambda c_k + \mu d_k) \chi'_k = \lambda\psi' + \mu\eta'$$

Par un choix convenable des phases, la transformation T peut être choisie linéaire, et comme elle conserve le module du produit scalaire, elle est aussi unitaire : $T \rightarrow U$ avec $U^\dagger U = U U^\dagger = I$.

Dans le second cas, on redéfinit la phase de ψ' de telle sorte que $c'_1 = c_1^*$. On a alors $c'_j = c_j^*$ et

$$\psi' = \sum_k c_k^* \chi'_k$$

Le transformé de $\lambda\psi + \mu\eta$ est alors

$$(\lambda\psi + \mu\eta)' = \left[\sum_k (\lambda c_k + \mu d_k) \chi_k \right]' = \lambda^* \psi' + \mu^* \eta' \quad (\text{A.14})$$

et la loi de transformation du produit scalaire est

$$(\psi', \eta') = (\psi, \eta)^* = (\eta, \psi) \quad (\text{A.15})$$

La transformation $T \rightarrow V$, où V est dite *antiunitaire* : elle est antilinéaire et conserve la norme.

La démonstration précédente est en fait incomplète : en effet, il faudrait montrer que l'on ne peut pas avoir (A.12) pour c_j et (A.13) pour $c_l, l \neq j$. La vérification que ceci ne peut pas se produire est fastidieuse et laissée au lecteur¹ : il faut examiner le comportement du transformé d'un vecteur $\psi = \chi_1 + \chi_j + \chi_l$.

A.2 Renversement du sens du temps

En mécanique classique, l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(t))$$

est invariante par renversement du sens du temps $t \rightarrow -t$. Posons en effet $\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t)$

$$m \frac{d^2 \vec{r}'(t)}{dt^2} = m \frac{d^2 \vec{r}(-t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(-t)) = \vec{F}(\vec{r}'(t))$$

On constate que $\vec{r}'(t)$ obéit bien aux équations de Newton. La raison en est évidemment que ces équations ne dépendent que de la dérivée seconde par rapport au temps de $\vec{r}$ et pas de la dérivée première². Une image intuitive

1. Voir Weinberg[1995], chapitre 2, qui détaille toutes les subtilités de la preuve.

2. Une équation du type oscillateur harmonique amorti

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} + m\omega^2 x = 0$$

n'est pas invariante par renversement du sens du temps, mais la force de viscosité $-\gamma\dot{x}$ est une force effective, représentant phénoménologiquement l'effet des collisions des molécules du fluide sur la particule de masse m .

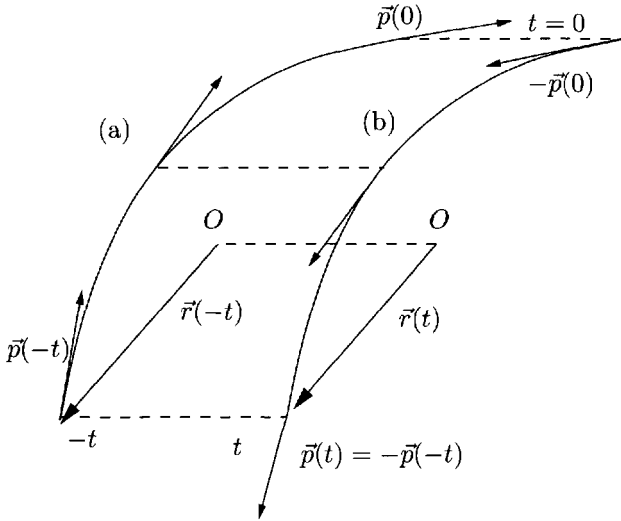


FIG. A.1 – Renversement du temps sur une trajectoire classique.

du renversement du temps est la suivante : imaginons que nous suivions la trajectoire d'une particule de $t = -\infty$ à $t = 0$ et qu'à $t = 0$ nous renversons brutalement le sens de l'impulsion (ou de la vitesse) : $\vec{p}(0) \rightarrow -\vec{p}(0)$. Dans ces conditions, la particule va « remonter sa trajectoire », elle repassera au temps t par la position qu'elle avait au temps $-t$ avec une impulsion opposée (figure A.1)

$$\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t) \quad \vec{p}'(-t) = -\vec{p}(t) \quad (\text{A.16})$$

Le vecteur position $\vec{r}$ est pair par renversement du temps, et $\vec{p}$ est impair dans cette même opération. L'invariance par renversement du temps est appelée *microréversibilité*. Si l'on filme le mouvement de particules et que l'on projette le film à l'envers, la microréversibilité implique que la projection apparaît physiquement possible³. On sait que tel n'est pas le cas dans la vie courante, qui est fondamentalement irréversible, et il n'est pas évident⁴ de comprendre comment une dynamique réversible à l'échelle microscopique peut conduire à des phénomènes irréversibles à l'échelle macroscopique.

Revenons à la mécanique quantique, en appelant Θ l'opérateur qui réalise le renversement du temps dans $\mathcal{H}$. Cet opérateur doit transformer $\vec{R}$, $\vec{P}$ et $\vec{J}$

3. On notera l'analogie avec la conservation de la parité : l'image d'une expérience dans un miroir apparaît physiquement possible si la parité est conservée.

4. Comme l'ont montré les discussions acharnées de Boltzmann avec ses contradicteurs ! Voir par exemple Balian [1991], chapitre 15 ou Le Bellac et Mortessagne, chapitre 2.

suivant

$$\begin{aligned}\Theta \vec{R} \Theta^{-1} &= \vec{R} \\ \Theta \vec{P} \Theta^{-1} &= -\vec{P} \\ \Theta \vec{J} \Theta^{-1} &= -\vec{J}\end{aligned}\tag{A.17}$$

En effet $\vec{J}$ doit se transformer comme $\vec{R} \times \vec{P}$, qui est impair par renversement du temps : le moment angulaire définit un sens de rotation qui est inversé par renversement du temps. L'examen de la transformation par Θ des relations de commutation canoniques montre que Θ doit être antiunitaire. Calculons de deux façons différentes un élément de matrice du commutateur $[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} I$

$$\begin{aligned}(\Theta\varphi, \Theta[X_i, P_j]\psi) &= (\Theta\varphi, \Theta i\hbar \delta_{ij} I\psi) = \delta_{ij}(\varphi, i\hbar\psi)^* = -i\hbar \delta_{ij}(\varphi, \psi)^* \\ &= (\Theta\varphi, \Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1}\Theta\psi) = (\Theta\varphi, -i\hbar \delta_{ij} I\Theta\psi) \\ &= -i\hbar \delta_{ij}(\varphi, \psi)^*\end{aligned}$$

où nous avons utilisé dans la seconde ligne les lois de transformation (A.17) de X_i et P_j

$$\Theta[X_i, P_j]\Theta^{-1} = -[X_i, P_j]$$

Les deux lignes de l'équation précédente sont compatibles, ce qui ne serait pas le cas si la transformation Θ était unitaire.

Il existe un autre argument très instructif prouvant le caractère antiunitaire de Θ . Soit $\varphi(t)$ le vecteur d'état d'un système quantique au temps t , $\varphi = \varphi(t=0)$ son état au temps $t=0$

$$\varphi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \varphi$$

L'invariance par rapport au renversement du temps implique que l'état transformé de $\varphi(-t)$ par renversement du temps, $\Theta\varphi(-t)$, coïncide avec l'état obtenu par évolution temporelle de $\Theta\varphi(0)$

$$\Theta\varphi(-t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \Theta\varphi$$

et comme les équations sont valables pour tout φ

$$\Theta \exp\left(\frac{i}{\hbar} Ht\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \Theta\tag{A.18}$$

Si Θ était unitaire, cela impliquerait que

$$\Theta H = -H\Theta$$

et à tout vecteur propre φ_E de H d'énergie E correspondrait un vecteur propre $\Theta\varphi_E$ avec une énergie $-E$. Dans ces conditions, l'énergie ne serait pas bornée

inférieurement et il existerait une instabilité fondamentale. Si au contraire Θ est antiunitaire, grâce à

$$\Theta iH = -i\Theta H$$

l'équation (A.18) implique

$$\Theta H = H \Theta \quad \text{ou} \quad \Theta H \Theta^{-1} = H \quad (\text{A.19})$$

Cette dernière équation traduit l'invariance de H par renversement du sens du temps. Cependant, contrairement à l'opérateur parité Π , Θ ne conduit pas à une grandeur conservée, car l'équation (8.17) implique que l'opérateur A soit hermitique, ce qui n'est pas le cas de Θ . On sait actuellement que toutes les interactions fondamentales de la physique sont invariantes par renversement du temps, sauf une interaction extrêmement faible, dont on ne voit les effets que dans le système de mésons $K^0 - \overline{K}^0$ (exercice 4.3.8), et que l'on a aussi observée tout récemment dans le système de mésons B , formés d'un quark ordinaire et d'un antiquark b (ou l'inverse).

Un double renversement du temps n'a évidemment aucun effet, et l'état $\Theta^2\varphi$ est équivalent à φ , $\Theta^2 = cI$, où c est un facteur de phase. La chaîne d'égalités

$$(\Theta\varphi_a, \varphi_b) = (\Theta\varphi_b, \Theta^2\varphi_a) = c(\Theta\varphi_b, \varphi_a) = c(\Theta\varphi_a, \Theta^2\varphi_b) = c^2(\Theta\varphi_a, \varphi_b)$$

montre que $c^2 = 1$, et donc $c = \pm 1$. Dans le cas où $c = -1$, le choix $\varphi_a = \varphi_b$ dans l'équation précédente entraîne

$$(\Theta\varphi_a, \varphi_a) = 0 \quad (\text{A.20})$$

Si $c = -1$ et que H est invariant par renversement du temps, les états propres de H peuvent être rangés en paires d'états dégénérés par renversement du temps. Soit en effet φ un vecteur propre de H : $H\varphi = E\varphi$. Alors

$$H(\Theta\varphi) = \Theta(H\varphi) = E(\Theta\varphi)$$

et $\Theta\varphi$ est vecteur propre de H avec la valeur propre E : si $(\Theta\varphi, \varphi) = 0$, il existe (au moins) deux états propres de H avec la valeur propre E . Cette propriété est appelée *dégénérescence de Kramers*.

Compte tenu des propriétés de transformation de $\vec{J}$ (A.17), on doit avoir

$$\Theta|jm\rangle = e^{i\alpha} (-1)^{j-m} |j, -m\rangle \quad (\text{A.21})$$

où, par application de J_+ et de J_- on montre que α peut dépendre de j , mais non de m . On en déduit, en utilisant l'antilinearité de Θ

$$\Theta^2|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle \quad (\text{A.22})$$

et $\Theta^2 = I$ si j est entier, $\Theta^2 = -I$ si j est demi-entier. La dégénérescence de Kramers entraîne alors qu'un système avec un nombre impair d'électrons

possède des niveaux d'énergie doublement dégénérés en l'absence de champ magnétique. La présence d'un champ magnétique brise l'invariance par renversement du sens du temps, car pour respecter cette invariance, il faudrait inverser le sens des courants qui produisent ce champ : la raison pour laquelle l'effet Zeeman lève complètement la dégénérescence des niveaux est qu'un champ magnétique brise l'invariance par renversement du temps.

L'invariance par renversement du temps implique que pour une transition $\mathcal{T}_{a \rightarrow b}$

$$\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = \mathcal{T}_{\Theta b \rightarrow \Theta a} \quad (\text{A.23})$$

où Θa (Θb), est l'état obtenu à partir de a (b) par renversement du temps, en inversant toutes les impulsions et tous les moments angulaires. Nous en déduisons par exemple la relation pour l'amplitude de diffusion utilisée dans § 12.3.2

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}')$$

et plus généralement pour une réaction où les particules incidentes ont des impulsions $(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ et des projections de leurs spins (m_1, m_2) , tandis que les particules finales sont caractérisées par $(\vec{p}_3, \vec{p}_4)$ et (m_3, m_4)

$$f_{m_1, m_2; m_3, m_4}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_3 + \vec{p}_4) = f_{-m_3, -m_4; -m_1 - m_2}(-\vec{p}_3 - \vec{p}_4 \rightarrow -\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$$

Pour une particule sans spin, l'opération de renversement du temps est simplement la conjugaison complexe. En effet, si $\psi(\vec{r}, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$$

la fonction $\Theta\psi(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, -t)$ vérifie

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, -t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, -t) + V(\vec{r})\psi^*(\vec{r}, -t)$$

pourvu que le potentiel $V(\vec{r})$ soit réel. Cette propriété a été utilisée aux paragraphes § 9.4.1 et 9.4.3 pour restreindre la forme de la matrice de passage M et de la matrice S .

Comme dernier exemple, examinons l'impact de l'invariance par renversement du temps sur le moment dipolaire électrique du neutron. Comme l'opérateur moment dipolaire $\vec{D}$ est impair dans l'opération parité

$$\Pi \vec{D} \Pi^{-1} = -\vec{D}$$

le moment dipolaire⁵ d'une particule est nul si cette particule a une parité déterminée, ce qui sera le cas si ses interactions conservent la parité. C'est pourquoi les atomes dans leur état fondamental n'ont pas de moment dipolaire

5. Pour que le moment dipolaire électrique d'une particule puisse être non nul, il est impératif que son moment angulaire soit différent de zéro : dans le cas contraire, l'invariance par rotation est incompatible avec l'existence d'un moment dipolaire.

permanent. Cependant la parité n'est pas conservée dans les interactions faibles, et cela peut *a priori* rétablir la possibilité d'un moment dipolaire. En fait, il est de plus nécessaire que l'invariance par renversement du temps soit violée. En effet le seul vecteur à notre disposition est le spin $\hbar\vec{\sigma}/2$ du neutron, et on doit avoir $\vec{D} = \lambda\vec{\sigma}$, où λ est une constante ; on remarque que $\lambda \neq 0$ implique la violation de la parité, car $\vec{D}$ est un vecteur et $\vec{\sigma}$ un pseudo-vecteur. Le couplage $\vec{D} \cdot \vec{E}$ du dipôle avec un champ électrique est impair par renversement du temps et doit s'annuler si l'invariance par renversement du temps est valide, car d'après (A.17) $\vec{\sigma}$ est impair et $\vec{E}$ pair : dans un renversement du temps, les charges sont inchangées (au contraire des courants, qui, on l'a vu, sont inversés). Si l'on envoie un neutron possédant un moment dipolaire électrique dans un champ électrique et un champ magnétique inhomogènes et constants et que l'on inverse à $t = 0$ la vitesse du neutron, son spin et les courants créant le champ magnétique, alors, à la différence de la figure A.1, le neutron ne « remontera pas sa trajectoire ». On pourra faire la différence entre le déroulement de l'expérience et son film projeté à l'envers.

Essayons d'estimer le moment dipolaire du neutron par un argument dimensionnel. Ce moment dipolaire doit faire intervenir les interactions faibles, et donc la constante de Fermi G_F (exercice 12.5.6), ou plus précisément la combinaison $G_F/(\hbar c)^3$, et un paramètre sans dimension ε mesurant l'importance de la violation de l'invariance par renversement du temps, dont l'ordre de grandeur peut être estimé à environ 10^{-3} à partir de l'étude des mésons K neutres. On dispose en plus d'une masse, la masse du neutron $m_n \simeq 1 \text{ GeV}/c^2$, et la seule solution possible est par analyse dimensionnelle

$$d \sim q_e \frac{G_F}{(\hbar c)^3} \varepsilon m_n (\hbar c^3)$$

Il est commode d'utiliser un système d'unités où $\hbar = c = 1$ (exercice 12.5.1), $200 \text{ MeV} \simeq 1 \text{ fm}^{-1}$, ou $1 \text{ fm} \simeq 5 \text{ GeV}^{-1}$

$$d \sim q_e \times 10^{-5} \times 10^{-3} \times 1 = q_e \times 10^{-8} \text{ GeV}^{-1} \sim q_e \times 10^{-9} \text{ fm} = q_e \times 10^{-24} \text{ m}$$

Les mesures les plus précises du moment dipolaire du neutron ont été effectuées au réacteur de recherches de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble et donnent la borne supérieure

$$d \lesssim q_e \times 10^{-27} \text{ m}$$

qui viole largement notre estimation naïve ! En fait, à cause d'une propriété technique du modèle standard⁶, le moment dipolaire du neutron doit être proportionnel à G_F^2

$$d \sim G_F^2 \varepsilon m_n^3 (\hbar c^7) \simeq q_e \times 10^{-29} \text{ m}$$

6. Voir par exemple J. Donoghue, E. Golowich et B. Holstein, *Dynamics of the Standard Model*, Cambridge University Press, Cambridge (1992), chapitre IX.

Les estimations théoriques du moment dipolaire du neutron ne sont pas très précises et varient aux alentours de $q_e \times 10^{-32} \text{ m}$: notre estimation est réduite par un facteur $\sim 10^{-3}$ car les calculs perturbatifs du modèle standard conduisent à un facteur numérique multiplicatif $\pi^{-4} \simeq 10^{-2}$ et suggèrent de prendre une masse caractéristique de l'ordre de 0.3 GeV au lieu de m_n .

Appendice B

Mesure et décohérence

DANS CET APPENDICE, nous allons décrire avec plus de détails qu'au § 6.3.1 l'expérience de Brune *et al.* qui a mis pour la première fois en évidence le phénomène de décohérence de manière entièrement contrôlée. En plus de son intérêt intrinsèque, cette expérience est emblématique des performances expérimentales actuelles qui permettent de tester les fondements de la mécanique quantique avec une finesse dont n'auraient pas rêvé ses pères fondateurs. De plus la discussion de cette expérience nous permettra de donner un bref aperçu des idées actuelles sur la notion de mesure en mécanique quantique¹. Nous reviendrons d'abord sur l'expérience d'interférences du § 1.4.4, en la replaçant dans le cadre d'une théorie élémentaire de la mesure. Nous examinerons ensuite la réalisation de franges de Ramsey avec des atomes de Rydberg, puis nous montrerons comment l'interaction de ces atomes avec un champ électromagnétique brouille progressivement ces franges en donnant la réponse à la question « lequel des deux trajets ? », et enfin nous montrerons comment l'utilisation d'une paire d'atomes permet de tester la décohérence.

B.1 Modèle élémentaire pour la mesure

Reprenons la discussion de l'expérience des fentes d'Young avec étiquetage des trajectoires de la figure 1.13, en la complétant par l'introduction d'une formulation mathématique. Soit $c_1(x)$ (resp. $c_2(x)$) l'amplitude de probabilité complexe pour que l'atome soit localisé au point d'abscisse x sur l'écran en étant passé par la fente 1 (resp. 2) ; la normalisation (arbitraire) est fixée par $|c_1(x)|^2 = |c_2(x)|^2 = 1$. En l'absence de tout dispositif d'observation des

1. On peut trouver un exposé très complet de la théorie de la mesure dans le cours 1989-1990 du Collège de France de C. Cohen-Tannoudji. L'exemple du § B.4 est emprunté à cette référence. Les idées actuelles sur la mesure doivent beaucoup aux travaux de W. Zurek, dont on trouvera un exposé pédagogique dans W. Zurek, *Physics Today*, octobre 1991, p. 36.

trajectoires, la probabilité d'arrivée sur l'écran au point x est

$$p(x) = \frac{1}{2}(|c_1(x)|^2 + |c_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re}[c_1(x)c_2^*(x)]) \quad (\text{B.1})$$

Le dernier terme de (B.1) est bien sûr le terme d'interférences. L'amplitude de probabilité $c_1(x)$ est le produit de l'amplitude² $\langle \varphi_1 | S \rangle$ pour que l'atome émis par la source S soit localisé sur la fente 1 et de l'amplitude $\langle x | \varphi_1 \rangle$ pour que l'atome émis par la fente 1 soit localisé en x sur l'écran. Un résultat analogue vaut pour $c_2(x)$ et

$$c_1(x) = \langle x | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_1 | S \rangle \quad c_2(x) = \langle x | \varphi_2 \rangle \langle \varphi_2 | S \rangle$$

Il est commode d'inclure les amplitudes $\langle \varphi_1 | S \rangle$ et $\langle \varphi_2 | S \rangle$ dans la définition des états de l'atome $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ et d'écrire simplement

$$c_1(x) = \langle x | \varphi_1 \rangle \quad c_2(x) = \langle x | \varphi_2 \rangle \quad (\text{B.2})$$

Les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont supposés normalisés et orthogonaux, car ils sont localisés sur des fentes différentes et leurs fonctions d'onde ne se recouvrent pas. Installons maintenant les cavités C_1 et C_2 de la figure 1.13 devant les fentes et appelons $|\chi_{10}\rangle$ l'état où C_1 contient un photon et C_2 zéro photon, tandis que $|\chi_{01}\rangle$ est l'état décrivant la situation inverse. L'état de l'ensemble atome+photon est alors un état intriqué $|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\varphi_1\rangle \otimes |\chi_{10}\rangle + |\varphi_2\rangle \otimes |\chi_{01}\rangle \right) \quad (\text{B.3})$$

et l'opérateur densité correspondant

$$\begin{aligned} \rho_{\text{tot}} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \frac{1}{2} & \left[(|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|) \otimes (|\chi_{10}\rangle\langle\chi_{10}|) + (|\varphi_2\rangle\langle\varphi_2|) \otimes (|\chi_{01}\rangle\langle\chi_{01}|) \right. \\ & \left. + (|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|) \otimes (|\chi_{10}\rangle\langle\chi_{01}|) + (|\varphi_2\rangle\langle\varphi_1|) \otimes (|\chi_{01}\rangle\langle\chi_{10}|) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Cherchons maintenant l'opérateur densité réduit de l'atome seul en utilisant (6.66)

$$\rho_{\text{at}} = \operatorname{Tr}_{\text{phot}} \rho_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \left[|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + (\langle\chi_{01}|\chi_{10}\rangle |\varphi_1\rangle\langle\varphi_2| + \text{h.c.}) \right] \quad (\text{B.5})$$

où h.c. = hermitique conjugué. La forme matricielle de ce résultat est, dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$

$$\rho_{\text{at}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \langle\chi_{01}|\chi_{10}\rangle \\ \langle\chi_{10}|\chi_{01}\rangle & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

2. Avec par exemple $\langle \varphi_1 | S \rangle \propto \exp(ikr_{1S})/r_{1S}$, où k est le module du vecteur d'onde de l'atome et r_{1S} le module du vecteur joignant la source à la fente 1 : cf. Feynman et al.[1965], vol. III, chapitre 3.

Rappelons que les éléments non diagonaux de ρ_{at} sont appelés cohérences. Dans le schéma de la figure 1.13, les états $|\chi_{10}\rangle$ et $|\chi_{01}\rangle$ sont orthogonaux : $\langle\chi_{10}|\chi_{01}\rangle = 0$, ce qui reflète la localisation des photons dans deux cavités différentes. Dans ces conditions la matrice densité (B.6) est diagonale. Il est instructif de considérer une situation plus générale, où le photon associé au passage de l'atome par la fente 1 n'est pas localisé entièrement dans la cavité C_1 , mais a aussi une certaine probabilité de fuir vers C_2 , et vice-versa pour le photon associé au passage de l'atome par la fente 2. Dans de telles conditions, l'observation d'un photon dans C_1 ou C_2 ne permet pas d'étiqueter de façon certaine la trajectoire de l'atome. On obtient facilement la probabilité $p(x)$ d'arrivée au point x sur l'écran

$$p(x) = \text{Tr}(|x\rangle\langle x|\rho_{\text{at}}) = \frac{1}{2}(|c_1(x)|^2 + |c_2(x)|^2 + 2\text{Re}[c_1(x)c_2^*(x)\langle\chi_{01}|\chi_{10}\rangle]) \quad (\text{B.7})$$

Le photon émis dans C_1 ou C_2 effectue une *mesure = étiquetage de la trajectoire*, ou plus exactement, comme nous le verrons ultérieurement, une *pré-mesure*, et cette pré-mesure correspond à la formation d'un état intriqué (B.3), c'est-à-dire à l'établissement de corrélations quantiques entre l'atome (le système) et le photon (l'appareil de mesure). Les interférences possibles sont contenues dans les cohérences de la matrice densité réduite (B.6), et ces interférences disparaissent si ces cohérences sont nulles, lorsque $|\chi_{10}\rangle$ et $|\chi_{01}\rangle$ sont orthogonaux. Dans ce cas la mesure de la trajectoire est sans ambiguïté. Il n'est pas nécessaire que le photon soit observé, ou en d'autres termes que le résultat de la mesure soit effectivement lu, pour obtenir (B.7). C'est l'intrication du photon avec l'atome et l'orthogonalité des états $|\chi_{10}\rangle$ et $|\chi_{01}\rangle$ qui détruisent les cohérences. Au contraire, si les états $|\chi_{10}\rangle$ et $|\chi_{01}\rangle$ ne sont pas orthogonaux, la mesure de la trajectoire n'est pas sans ambiguïté, et les interférences ne sont que partiellement brouillées, le brouillage étant d'autant plus important que $\langle\chi_{10}|\chi_{01}\rangle$ est voisin de zéro. À la limite où $|\langle\chi_{10}|\chi_{01}\rangle| = 1$, le dispositif ne donne aucune information sur les trajectoires, les interférences sont complètement rétablies et on retrouve (B.1).

La discussion précédente peut être généralisée à un modèle élémentaire de mesure. Supposons que nous souhaitions effectuer une mesure sur un système quantique S , qui peut se trouver dans l'un des N états $|\varphi_n\rangle$ appartenant à un espace des états $\mathcal{H}_S^{(N)}$ de dimension N . La première phase de la mesure, que nous appellerons la *phase de pré-mesure*, s'effectue grâce à une interaction entre S et un autre système quantique M , « l'appareil de mesure ». Dans l'exemple précédent, l'atome est le système S et le photon l'appareil de mesure M . Si S est initialement dans l'état $|\varphi_n\rangle$ et M dans l'état $|\chi\rangle$, nous supposons que l'interaction entre S et M a l'effet suivant

$$|\varphi_n\rangle \otimes |\chi\rangle \Longrightarrow |\varphi_n\rangle \otimes |\chi_n\rangle$$

où $|\chi\rangle$ et $|\chi_n\rangle$ appartiennent à un espace de Hilbert $\mathcal{H}_M$. Un mécanisme explicite donnant ce type de résultat est décrit dans l'exercice 9.7.14. Il

est essentiel d'observer que l'évolution pendant la phase de pré-mesure où S et M interagissent est unitaire, régie par une équation d'évolution du type (4.11) avec un hamiltonien H_{S+M} . La lecture de l'état final de M permet de remonter à l'état initial $|\varphi_n\rangle$ de S : M est une « aiguille » dont la « position » $|\chi_n\rangle$ donne l'état de S . La linéarité de la mécanique quantique implique que si l'état initial de S est la superposition linéaire $|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle$ le résultat de la pré-mesure est donné par

$$|\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle = \left(\sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle \right) \otimes |\chi\rangle \Longrightarrow \sum_{n=1}^N c_n |\varphi_n\rangle \otimes |\chi_n\rangle$$

Le résultat est un état intriqué de $S + M$. On calcule aisément à partir de (6.66) l'opérateur densité réduit de S

$$\rho_S = \text{Tr}_M \rho_{S+M} = \sum_{n,m=1}^N c_n c_m^* |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m| \langle \chi_m | \chi_n \rangle \quad (\text{B.8})$$

Si les états $|\chi_n\rangle$ sont orthogonaux, $\langle \chi_n | \chi_m \rangle = \delta_{nm}$, le résultat de la mesure est non ambigu, car l'observation de M détermine l'état de S de façon unique, et les cohérences de ρ_S s'annulent

$$\rho_S = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (\text{B.9})$$

L'opérateur densité réduit ρ_S n'a plus rien à voir avec l'opérateur densité initial ρ_S^{in} de S

$$\rho_S^{\text{in}} = \sum_{n,m=1}^N c_n c_m^* |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m| \quad (\text{B.10})$$

Les cohérences ont disparu en passant de (B.10) à (B.9). On conserve uniquement la trace de l'information sur les *probabilités* $|c_n|^2$ de trouver S dans l'état $|\varphi_n\rangle$. Soulignons à nouveau que même si le résultat de la mesure n'est pas lu sur M , on a néanmoins $\rho_S^{\text{in}} \rightarrow \rho_S$. Cependant la situation est encore réversible : tant que le système $S + M$ reste isolé, on n'a pas de véritable mesure, seulement une pré-mesure. De plus, il est possible d'utiliser une autre base de $\mathcal{H}_M$ que la base $\{|\chi_n\rangle\}$, et cette nouvelle base est corrélée à une base de $\mathcal{H}_S$ différente de la base $\{|\varphi_n\rangle\}$, et à laquelle sont attachées d'autres grandeurs physiques que celles mesurées initialement. Il y a donc ambiguïté sur les grandeurs physiques de S que mesure M .

B.2 Franges de Ramsey

Passons maintenant à la discussion de l'expérience de l'ENS. Le dispositif expérimental est celui de la figure 6.9. Des atomes de rubidium dans un

état de Rydberg circulaire (exercice 14.5.4) sont préparés en O . Un état de Rydberg du rubidium (qui est un alcalin) est un état atomique où l'électron externe de l'atome se trouve sur une orbite de nombre quantique principal n très élevé, et donc de dimension très grande par rapport au rayon de Bohr a_0 . De plus, on exige que le moment angulaire orbital prenne sa valeur maximale $l = n - 1$, et de même pour le nombre magnétique : $|m| = l$. Dans ces conditions on obtient un état de Rydberg circulaire, c'est-à-dire un état où l'orbite est circulaire et l'électron confiné dans un tore très fin autour du rayon moyen de l'orbite $\simeq n^2 a_0 \simeq 125 \text{ nm}$. Dans l'expérience, les deux états de Rydberg utilisés correspondent à $n = 50$ (état noté $|g\rangle$) et $n = 51$ (état noté $|e\rangle$). Ces états sont séparés en énergie de 0.21 meV , ce qui correspond à une fréquence $\omega_0 = 3.21 \times 10^{11} \text{ rad.s}^{-1}$ ($\nu = 51.1 \text{ GHz}$). Grâce au choix des orbites circulaires, ces états ont une vie moyenne très longue à l'échelle atomique, de l'ordre de 30 ms , et la probabilité de désintégration spontanée pendant leur trajet entre O et les détecteurs D est négligeable. La détection des atomes se fait par des détecteurs à ionisation *sélectifs* D_e et D_g , car les états e et g sont ionisés par des champs différents. L'efficacité des détecteurs, c'est-à-dire la probabilité de déclenchement de D_e par e et D_g par g , est de l'ordre de 40% , tandis que la probabilité de déclenchement par le « mauvais » état est de quelques pourcents.

Dans un premier temps, la cavité C est vide et les atomes sont soumis à un champ de radiofréquences

$$\mathcal{E}(t) = E_0 \cos(\omega t - \phi) \quad (\text{B.11})$$

dans les cavités R_1 et R_2 , la valeur de ϕ dépendant de la cavité. La fréquence ω est voisine de la fréquence de résonance ω_0 et on note le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$. À une excellente approximation, le système atome + champ est décrit par un système à deux niveaux $|e\rangle$ et $|g\rangle$ interagissant avec un champ classique (B.11). Ce système a été étudié dans le détail au chapitre 5, et nous pouvons reprendre directement les équations (5.32) modifiées de façon triviale pour tenir compte de la phase ϕ dans (B.11). Afin de conserver les notations utilisées au chapitre 5, nous redéfinirons

$$|g\rangle \rightarrow |+\rangle \quad |e\rangle \rightarrow |-\rangle \quad E_e - E_g \rightarrow E_- - E_+ = \hbar\omega_0 > 0$$

Le vecteur d'état de l'atome au temps t est noté

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle \quad (\text{B.12})$$

et on définit comme au § 5.2.2

$$\gamma_{\pm}(t) = c_{\pm}(t)e^{i\omega_{\pm}t} \quad (\text{B.13})$$

On réécrit les équations (5.32) en tenant compte de ϕ

$$\begin{aligned} i \frac{d\gamma_+}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} e^{i(\delta t - \phi)} \gamma_-(t) \\ i \frac{d\gamma_-}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} e^{-i(\delta t - \phi)} \gamma_+(t) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Plaçons-nous d'abord à la résonance, $\delta = 0$. Les fonctions $\gamma_{\pm}(t)$ vérifient alors l'équation du second degré

$$\frac{d^2\gamma_{\pm}(t)}{dt^2} = -\omega_1^2\gamma_{\pm}(t)$$

et la solution de (B.14) avec les conditions initiales $\gamma_+(0) = 1$, $\gamma_-(0) = 0$ est

$$\begin{aligned}\gamma_+(t) &= \cos \frac{\omega_1 t}{2} \\ \gamma_-(t) &= -i e^{i\phi} \sin \frac{\omega_1 t}{2}\end{aligned}\tag{B.15}$$

La solution de (B.14) avec les conditions initiales $\gamma_+(0) = 0$, $\gamma_-(0) = 1$ s'obtient sans calculs en remarquant qu'il suffit de faire dans (B.15) les substitutions $+\leftrightarrow -$ et $\phi \rightarrow -\phi$

$$\begin{aligned}\gamma_+(t) &= -i e^{-i\phi} \sin \frac{\omega_1 t}{2} \\ \gamma_-(t) &= \cos \frac{\omega_1 t}{2}\end{aligned}\tag{B.16}$$

Si le temps de traversée de la cavité R est ajusté de telle sorte que $\omega_1 t/2 = \pi/4$, ce que l'on appelle une *impulsion* $\pi/2$, et que l'atome entre dans la cavité dans l'état $|+\rangle$, il en sort d'après (B.15) dans l'état $|\varphi_+\rangle$

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - i e^{i\phi} |-\rangle)\tag{B.17}$$

et s'il entre dans l'état $|-\rangle$, il sort d'après (B.16) dans l'état³ $|\varphi_-\rangle$

$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-i e^{-i\phi} |+\rangle + |-\rangle)\tag{B.18}$$

Les deux cavités sont alimentées de façon symétrique par une *même* source S et sont donc exactement en phase. On peut toujours choisir $\phi = 0$ pour R_1 , mais pour R_2 on doit tenir compte du temps de parcours T entre R_1 et R_2 , et $\phi = -\omega T$. Bien que nous soyons à la résonance, $\omega = \omega_0$, nous allons conserver formellement les deux fréquences ω et ω_0 pour un usage ultérieur. Compte tenu de (B.17) et de l'évolution temporelle libre différente des deux états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ pendant le temps T , si un atome entre dans la cavité R_1 dans l'état $|+\rangle$, il arrive dans la cavité R_2 dans l'état $|\varphi'\rangle$

$$|\varphi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - i e^{-i\omega_0 T} |-\rangle)\tag{B.19}$$

3. Il serait possible de se débarrasser des facteurs i en redéfinissant la phase des états $|\pm\rangle$ et de revenir ainsi aux conventions de phase du § 6.3.1.

En utilisant maintenant (A.17) et (A.18) et la valeur $\phi = -\omega T$, nous constatons que l'atome sort de R_2 dans un état $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} [(1 - e^{i\delta T}) |+\rangle - ie^{-i\omega_0 T} (1 + e^{-i\delta T}) |-\rangle] \quad (\text{B.20})$$

Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, nous avons conservé formellement δ alors que $\delta = 0$ à la résonance. En effet, les deux fréquences ω et ω_0 ont des impacts différents : ω_0 contrôle l'évolution temporelle libre et ω la phase ϕ . Il est donc possible d'identifier leur rôle respectif. Si nous faisons $\delta = 0$ dans (B.20), l'effet global est $|\psi\rangle \propto |-\rangle$, ce qui est normal car on a simplement donné une impulsion π à l'atome qui transforme un état $|+\rangle$ en un état $|-\rangle$.

Pour résoudre les équations (B.14) dans le cas non résonant, on élimine par exemple γ_- et on obtient une équation différentielle du second degré pour γ_+

$$\frac{2}{\omega_1} \ddot{\gamma}_+ - \frac{2i}{\omega_1} \delta \dot{\gamma}_+ + \frac{1}{2} \omega_1 \gamma_+ = 0$$

dont on cherche les solutions de la forme

$$\gamma_+(t) = e^{i\Omega_{\pm} t}$$

Les valeurs de $\Omega_{\pm}$ sont racines d'une équation du second degré, qui sont données en fonction de la fréquence de Rabi $\Omega = (\omega_1^2 + \delta^2)^{1/2}$ par

$$\Omega_{\pm} = \frac{1}{2} [\delta \pm \Omega]$$

La solution de (B.14) pour γ_+ est une combinaison linéaire de $\exp(i\Omega_+ t)$ et $\exp(i\Omega_- t)$

$$\gamma_+(t) = \lambda \exp(i\Omega_+ t) + \mu \exp(i\Omega_- t)$$

Choisissons les conditions initiales $\gamma_+(0) = 1$, $\gamma_-(0) = 0$. Comme $\gamma_-(0) \propto \dot{\gamma}_+(0)$, ces conditions initiales se traduisent par

$$\lambda + \mu = 1 \quad \text{et} \quad \lambda \Omega_+ + \mu \Omega_- = 0$$

soit

$$\lambda = -\frac{\Omega_-}{\Omega} \quad \mu = \frac{\Omega_+}{\Omega}$$

Le résultat final se met sous la forme

$$\begin{aligned} \gamma_+(t) &= \frac{e^{i\delta t/2}}{\Omega} \left[\Omega \cos \frac{\Omega t}{2} - i\delta \sin \frac{\Omega t}{2} \right] \\ \gamma_-(t) &= -\frac{i\omega_1}{\Omega} e^{i(\phi - \delta t/2)} \sin \frac{\Omega t}{2} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

À nouveau le résultat pour les conditions initiales $\gamma_+(0) = 0$, $\gamma_-(0) = 1$ s'obtient sans calculs en faisant dans (B.21) les substitutions $+ \leftrightarrow -$, $\delta \rightarrow -\delta$ et $\phi \rightarrow -\phi$.

On choisit le désaccord δ non nul, mais suffisamment petit pour que $|\delta|/\Omega \ll 1$. Dans ces conditions, on peut négliger δ , sauf dans les termes en $\exp(i\delta T)$, car δT n'a aucune raison d'être petit par rapport à un. On retrouve alors les résultats du cas non résonant, mais δ dans (B.20) est explicitement non nul. Si l'atome est entré dans l'état $|+\rangle$ dans la cavité R_1 , la probabilité p_{++} de le trouver dans l'état $|+\rangle$ à la sortie de R_2 est donnée par (B.20)

$$p_{++} = \frac{1}{4} \left| 1 - e^{i\delta T} \right|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\delta T}{2} \quad (\text{B.22})$$

On prédit donc une variation de p_{++} avec δ , de période $T = 2\pi/\delta$, phénomène que l'on appelle *franges de Ramsey*. L'expérience confirme l'existence de ces franges avec un bon contraste, voisin de 55 % (figure B.1(a)).

B.3 Interaction avec un champ dans la cavité

La cavité supraconductrice C contient maintenant un champ électromagnétique dans un état cohérent (11.31) d'un mode propre de fréquence $\omega_C \simeq \omega_0$ de la cavité, avec un désaccord $\delta_C = \omega_C - \omega_0 \neq 0$

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp(a^\dagger z) |0\rangle \quad (\text{B.23})$$

où $|0\rangle$ est le vide du champ électromagnétique dans le mode considéré (état à zéro photon). On définit le nombre complexe $z_\pm$ par

$$z_\pm = \alpha e^{\pm i\Phi}$$

où α est nombre réel positif ; α^2 est le nombre moyen de photons $\langle n \rangle$ dans la cavité, $\alpha^2 = \langle n \rangle$. Comme l'atome et le champ ne sont pas en résonance, il n'y a pas d'émission ou d'absorption de photon au cours du passage de l'atome dans C . Hors résonance, l'atome agit comme un milieu d'indice de réfraction $\neq 1$ et le passage de l'atome dans C a pour résultat de déphaser le champ d'un angle⁴ $\pm\Phi$, selon que l'atome est dans l'état $|+\rangle$ ou dans l'état $|-\rangle$: le champ électromagnétique dans la cavité effectue une mesure de l'état de l'atome, Φ jouant le rôle de l'aiguille de l'appareil de mesure. L'état du champ laissé dans la cavité permet en théorie⁵ de remonter à l'état de l'atome qui a

4. On peut calculer explicitement Φ

$$\Phi = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Omega_R^2}{\delta_C} T_C$$

où Ω_R est la fréquence de Rabi du vide dans la cavité (exercice 14.5.6) et T_C la durée du passage dans C . Avec les valeurs numériques de l'expérience, $\Omega_R \simeq 47$ Hz, $\delta_C/(2\pi) \simeq 100$ kHz, $T_C \simeq 20$ μ s, $\Phi \simeq 0.7$ rad. On peut faire varier Φ en jouant sur le désaccord δ_C .

5. Mais non en pratique avec la technologie actuelle ! Cependant, il n'est pas nécessaire que la mesure soit lue, il suffit qu'elle soit envisageable.

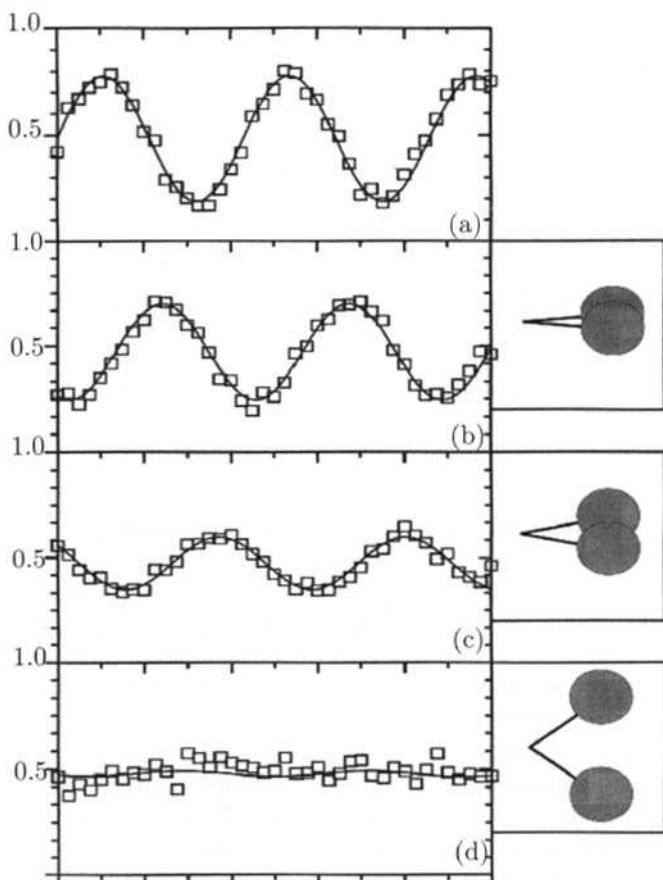


FIG. B.1 – Franges de Ramsey. (a) Cavity vide. (b) à (d) Nombre moyen de photons $\langle n \rangle = 9.5$ La colonne de droite donne le recouvrement des états cohérents $|z_{\pm}\rangle$: voir la figure 6.10. D'après M. Brune *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4887 (1996).

traversé C . Le schéma suit très exactement celui décrit au § B.1, $|\pm\rangle$ jouant le rôle de $|\varphi_n\rangle$ et $|z_{\pm}\rangle$ celui de $|\chi_n\rangle$.

En l'absence de champ dans la cavité, l'atome initialement dans $|+\rangle$ arriverait en R_2 dans $|\varphi'\rangle$ (B.19). La présence du champ dans la cavité a pour résultat de fabriquer un état intriqué atome+champ $|\Psi'\rangle$ à l'entrée de R_2

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle \otimes |z_+\rangle - ie^{-i\omega_0 T} |-\rangle \otimes |z_-\rangle)$$

et à la sortie de R_2 , au lieu de (B.20) on trouve

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left(|+\rangle \otimes \left[|z_+\rangle - e^{i\delta T} |z_-\rangle \right] - ie^{-i\omega_0 T} |-\rangle \otimes \left[e^{-i\delta T} |z_+\rangle + |z_-\rangle \right] \right) \quad (\text{B.24})$$

On en déduit⁶ p_{++}

$$p_{++} = \frac{1}{4} \left(\langle z_+ | z_+ \rangle + \langle z_- | z_- \rangle - 2 \operatorname{Re} \left[e^{i\delta T} \langle z_+ | z_- \rangle \right] \right)$$

Les états cohérents $|z_\pm\rangle$ sont normalisés, $\langle z_\pm | z_\pm \rangle = 1$ et le produit scalaire $\langle z_+ | z_- \rangle$ vaut

$$\langle z_+ | z_- \rangle = \exp(-2\alpha^2 \sin^2 \Phi) \exp(-i\alpha^2 \sin 2\Phi) \quad (\text{B.25})$$

En reportant ces valeurs dans p_{++} , on déduit le résultat final

$$p_{++} = \frac{1}{4} \left[1 - \exp(-2\alpha^2 \sin^2 \Phi) \cos(\delta T - \alpha^2 \sin 2\Phi) \right] \quad (\text{B.26})$$

Cette expression montre que les franges de Ramsey sont brouillées et que le facteur responsable de ce brouillage est $\exp(-2\alpha^2 \sin^2 \Phi)$, provenant de $\langle z_+ | z_- \rangle$: les franges sont d'autant plus brouillées que le nombre moyen de photons α^2 est grand, ou que le déphasage Φ est important (figure B.1). La quantité $2\alpha \sin \Phi$ a une interprétation géométrique intéressante : c'est la distance dans le plan complexe en z entre les centres des cercles représentant les fluctuations quantiques des champs électriques (figure 6.10). On peut interpréter les résultats en termes de chemins dans un espace de Hilbert. L'amplitude de probabilité a_{++} d'observer à la sortie de R_2 un atome dans l'état $|+\rangle$, alors que cet atome est entré dans R_1 dans l'état $|+\rangle$, est la somme de deux termes correspondant aux états intermédiaires possibles $|+\rangle$ et $|-\rangle$ donnés par (B.20) lorsque C est vide

$$a_{++} = a_{+++} + a_{+-+} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \exp(i\delta T)$$

Ces deux chemins sont indiscernables en l'absence de champ dans la cavité C . Lorsque la cavité contient un champ, le passage de l'atome laisse une trace dans la cavité en déphasant le champ de $\pm\Phi$, et cette trace est différente selon l'état $|\pm\rangle$ de l'atome. On peut donc distinguer entre les deux chemins et les interférences sont brouillées. Le degré de brouillage est contrôlé par le recouvrement des états $|z_+\rangle$ et $|z_-\rangle$. À la limite où ces états sont orthogonaux, la distinction est complète et les franges sont détruites. Dans la limite opposée, si l'angle $|\Phi| \ll 1$, l'état du champ ne permet pas de distinguer entre les chemins et les franges persistent. Cette expérience est une réalisation concrète

6. Le lecteur circonspect peut vérifier ce résultat en calculant la matrice densité réduite de l'atome.

de celle proposée par Feynman pour distinguer entre les deux trajets dans une expérience de fentes d'Young (*cf.* la discussion du § 1.4.4). Cependant notre discussion montre à l'évidence que la disparition des interférences ne provient pas d'une quelconque perturbation affectant la trajectoire des atomes, mais de la possibilité d'*étiqueter* les deux chemins.

B.4 Décohérence

Résumons le lien avec la discussion générale de la mesure du § B.1. Le système S est l'atome qui traverse le dispositif expérimental, l'appareil de mesure M est le champ et la position de l'aiguille est le déphasage $\pm\Phi$ du champ après le passage de l'atome dans l'état $|\pm\rangle$. Après le passage de l'atome, l'appareil de mesure a été laissé d'après (B.24) dans l'état

$$|Z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|z_+\rangle \mp e^{i\delta T} |z_-\rangle \right] \quad (\text{B.27})$$

selon le résultat de la détection. Pour qu'une opération puisse s'appeler véritablement une mesure, il faudrait qu'il y ait correspondance biunivoque entre l'état de l'appareil de mesure (le champ) et le système (l'atome)

$$|+\rangle \longleftrightarrow |z_+\rangle \quad |-\rangle \longleftrightarrow |z_-\rangle$$

Mais tel n'est pas le cas : après passage dans la cavité, à l'état $|+\rangle$ correspond une superposition linéaire (B.27) des états $|z_+\rangle$ et $|z_-\rangle$. C'est un symptôme de l'ambiguïté mentionnée à la fin du § B.1.

De plus l'état (B.27) est un *chat de Schrödinger*⁷, une superposition linéaire de deux positions de l'aiguille de l'appareil de mesure. Si l'on assimile les états $|z_{\pm}\rangle$ à des états classiques, ce qui serait correct à la limite d'un grand nombre de photons dans la cavité, et si Φ est la position de l'aiguille, l'état (B.27) est une superposition linéaire de deux positions de cette aiguille. Pour expliquer que de tels états ne sont jamais observés, du moins à la limite où l'appareil de mesure est macroscopique, il faut faire appel au couplage de M avec l'environnement E . En fait, on montre de façon générale qu'il ne suffit pas d'une interaction $S + M$ pour effectuer une mesure de S : *il faut en plus introduire le couplage de M avec l'environnement pour réaliser une véritable mesure*. Tant qu'il n'y a pas eu de fuite de l'information vers l'environnement, la situation reste réversible, au stade de la pré-mesure, et l'intrication $S + M$ peut être manipulée comme ci-dessus. C'est la fuite d'information dans l'environnement qui garantit le caractère irréversible de la mesure. Le couplage de l'appareil de mesure avec l'environnement conduit au phénomène de *décohérence* : les cohérences quantiques de M avec S sont détruites au bout d'un temps très court, de sorte que seuls les états d'une

7. Comme l'appareil de mesure est au mieux mésoscopique, il s'agit plutôt d'un chaton que d'un chat !

base privilégiée de l'espace de Hilbert de M sont observables physiquement, tandis que les superpositions linéaires de tels états, les chats de Schrödinger, sont éliminées. Les états de la base privilégiée sont les états classiques de M , qui sont fixés par la forme de l'interaction de M avec l'environnement. Il en résulte que les grandeurs physiques de S que mesure M sont elles aussi bien déterminées : les corrélations quantiques entre M et S sont transformées en corrélations classiques et l'ambiguïté sur les grandeurs physiques mesurées par M est levée.

Un exemple simple de décohérence, qui permettra d'en comprendre les aspects qualitatifs, est le suivant. Considérons une particule de masse μ dont la fonction d'onde (à une dimension pour simplifier) est une superposition de deux gaussiennes centrées à $x = \pm a$

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \left(\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\right] \right) \quad (\text{B.28})$$

On suppose $a \gg \sigma$, de sorte que le produit des deux gaussiennes est $\simeq 0 \forall x$ et le facteur $1/\sqrt{2}$ assure la normalisation correcte. Il est immédiat de calculer la fonction d'onde $\tilde{\varphi}(p)$ (9.26) et la distribution de probabilité $|\tilde{\varphi}(p)|^2$ de l'impulsion

$$|\tilde{\varphi}(p)|^2 = \frac{2\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right) \cos^2 \frac{pa}{\hbar} \quad (\text{B.29})$$

$|\tilde{\varphi}(p)|^2$ est une gaussienne de largeur $\sim \hbar/\sigma$ modulée par des oscillations rapides de période $\pi\hbar/a \ll \hbar/\sigma$. Ces oscillations reflètent la cohérence de la superposition des deux gaussiennes. Supposons que la particule de masse μ se trouve dans un environnement de particules légères de masse $m \ll \mu$, avec lesquelles elle entre perpétuellement en collision. Sous l'effet de ces collisions, la particule lourde effectue une marche au hasard dans l'espace des impulsions avec un coefficient de diffusion D (cf. § 14.4.3), et l'écart quadratique moyen de p au bout d'un temps t vaut

$$\Delta p^2 = 2Dt$$

Chacun des pics de $|\tilde{\varphi}(p)|^2$ s'élargit sous l'effet de cette diffusion, et les pics disparaissent au bout d'un temps T_D , le temps de décohérence, donné par $\Delta p^2 \sim (\pi\hbar/a)^2$, soit

$$T_D \sim \frac{\hbar^2}{Da^2} \quad (\text{B.30})$$

Cette expression montre que

- le temps de décohérence est inversement proportionnel au coefficient de diffusion ;
- ce temps est d'autant plus court que la « distance » a entre les deux états superposés linéairement dans (B.28) est grande.

Ces deux propriétés sont générales, et pour un objet suffisamment gros, le temps de décohérence est infiniment court par rapport au temps caractéristique de l'évolution quantique. De plus, l'environnement sélectionne comme base privilégiée celle des états de position, car il détruit très rapidement les cohérences entre états de positions différentes.

Dans l'expérience de l'ENS, le temps de décohérence est estimé de la façon suivante. La durée de vie d'un photon dans la cavité est $T_r = Q/\omega \simeq 160 \mu\text{s}$, où Q est le facteur de qualité. La fuite d'un seul photon suffit à détruire la cohérence de la superposition (B.27) et ceci se produit au bout d'un temps $T_D \sim T_r/\langle n \rangle$. Plus précisément, la « distance » entre les deux états superposés est $a = 2\langle n \rangle^{1/2} \sin \Phi$ (figure B.2), et d'après (B.30) on s'attend à un temps de décohérence inversement proportionnel à a^2

$$T_D \simeq \frac{T_r}{4\langle n \rangle \sin^2 \Phi} \quad (\text{B.31})$$

Le principe de la mesure de T_D est le suivant. On envoie un second atome dans la cavité C avec un retard variable τ sur le premier pour sonder le champ dans l'état où il a été laissé par le passage du premier atome. Soit $p_{[\varepsilon_1 \varepsilon_2]}$ la probabilité jointe de détecter à la sortie de R_2 le premier atome dans l'état $\varepsilon_1 = \pm$ et le second atome dans l'état $\varepsilon_2 = \pm$. Le passage du premier atome dans l'état $|+\rangle_1$ déphase le champ de $+\Phi$, et celui du second atome dans l'état $|-\rangle_2$ de $-\Phi$, soit un déphasage total nul. Il est clair qu'un déphasage nul est aussi obtenu avec l'ordre de passage $|-\rangle_1$ suivi de $|+\rangle_2$: les trajets (dans l'espace de Hilbert) $[1+, 2-]$ et $[1-, 2+]$ sont indiscernables, et cette propriété est à l'origine d'interférences dans les probabilités jointes $p_{[\varepsilon_1 \varepsilon_2]}$. On montre que la quantité

$$\eta = \frac{p_{[1-, 2-]}}{p_{[1-, 2-]} + p_{[1-, 2+]}} - \frac{p_{[1+, 2-]}}{p_{[1+, 2-]} + p_{[1+, 2+]}} \quad (\text{B.32})$$

vaut $1/2$ si les deux états du champ sont cohérents et zéro s'ils sont dans un mélange statistique. La mesure de η , qui est contrôlé par les cohérences de la matrice densité, permet de remonter au degré de cohérence partiel conservé après un temps τ (figure B.2). Les résultats expérimentaux confirment en tout point les propriétés attendues.

Revenant à l'analyse générale du § B.1, une fois la mesure terminée, l'opérateur densité de S est donné par la superposition incohérente (B.9). En ce sens le postulat **RPO** de réduction du paquet d'ondes est une conséquence

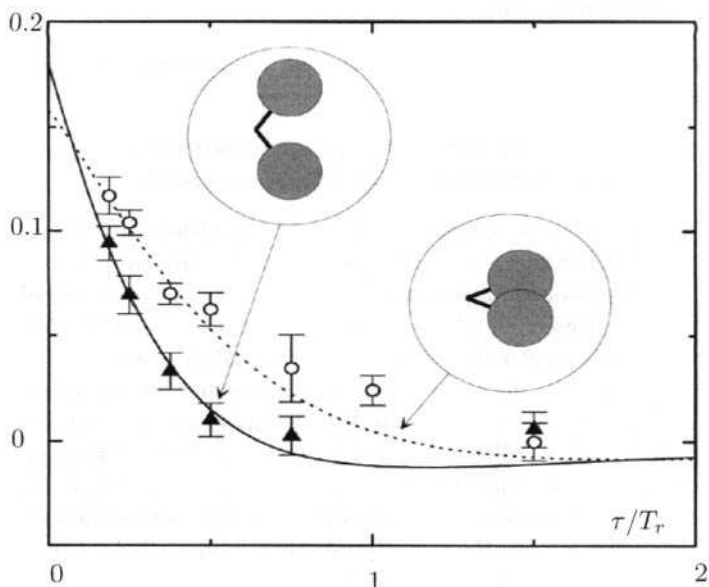


FIG. B.2 – Décroissance temporelle de la cohérence en unités du temps de relaxation T_r de la cavité. La courbe en trait plein correspond à un angle 2Φ important entre les deux états cohérents, la courbe en pointillés à deux états ayant un fort recouvrement. D'après M. Brune *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4887 (1996).

de l'opération de mesure, et ce postulat est commode, mais non indépendant des autres postulats. Dans le cas de deux mesures consécutives, si l'on prend en compte l'interaction des appareils de mesure avec l'environnement, on peut calculer les probabilités des résultats de la seconde mesure sans faire appel au postulat de réduction du paquet d'ondes, avec des résultats identiques à ceux obtenus par application de ce postulat. En revanche, le postulat **II** reste complètement en dehors du champ de la décohérence⁸ : ce postulat nous dit que la *probabilité* du résultat $|\varphi_n\rangle$ est $|c_n|^2$, mais c'est un résultat *unique* qui est obtenu dans une mesure particulière, avec une certaine probabilité. Tous les résultats possibles apparaissent dans (B.9), mais rien ne permet d'expliquer pourquoi un seul de ces résultats va émerger d'une expérience particulière. Aucune évolution unitaire du type (4.11) ne peut expliquer cette unicité du résultat, et à l'heure actuelle on ne connaît aucune justification – à supposer que le mot ait un sens dans ce contexte – du postulat **II**.

8. Rappelons que la prescription de trace partielle, dont nous avons fait un usage intensif dans cet appendice, est une *conséquence* du postulat **II**.

Appendice C

Méthode de Wigner et Weisskopf

LA DÉDUCTION DE LA RÈGLE d'or de Fermi du § 9.6.3 est limitée à des temps suffisamment courts, $t \ll \tau_2$, et il n'est pas possible de justifier avec les seuls arguments du § 9.6.3 la loi de décroissance exponentielle (9.171). Une méthode due à Wigner et Weisskopf¹ permet de justifier cette loi pour des temps longs à l'aide d'un autre schéma d'approximations. Considérons la situation suivante : un état d'un système isolé a d'énergie E_a , se désintègre vers un continuum d'états b , d'énergie E_b . Des exemples d'une telle situation sont la désexcitation d'un état excité d'un atome, d'une molécule, d'un noyau atomique... avec émission d'un photon, ou la désintégration d'une particule élémentaire. Les états d'énergie E_a et E_b sont états propres d'un hamiltonien $H^{(0)}$

$$H^{(0)}|a\rangle = E_a|a\rangle \quad H^{(0)}|b\rangle = E_b|b\rangle \quad (\text{C.1})$$

et une perturbation W indépendante du temps est responsable de la transition $a \rightarrow b$; dans le cas de l'émission spontanée d'un photon, W est donné par (14.58). Les états a et b ne sont pas des états stationnaires du hamiltonien *total* indépendant du temps $H = H^{(0)} + W$. Nous pouvons supposer que les éléments de matrice diagonaux de W sont nuls² : $W_{aa} = W_{bb} = 0$ et nous notons $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état du système, dont l'état initial est $|\psi(t=0)\rangle = |a\rangle$. Décomposons l'état $|\psi(t)\rangle$ sur les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ en faisant intervenir la densité d'états $\mathcal{D}(E_b)$

$$|\psi(t)\rangle = \gamma_a(t)e^{-iE_at/\hbar}|a\rangle + \int dE_b \mathcal{D}(E_b) \gamma_b(t)e^{-iE_bt/\hbar} \quad (\text{C.2})$$

1. La méthode de Wigner et Weisskopf est décrite par Cohen-Tannoudji *et al.* [1973], complément D_{XIII}, ou Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 17 ; un traitement détaillé et rigoureux est donné par Messiah [1959], chapitre XXI.

2. Si tel n'était pas le cas, on pourrait toujours redéfinir $H^{(0)}$

$$H^{(0)} \rightarrow H^{(0)'} = H^{(0)} + |a\rangle W_{aa} \langle a| + \int dE_b \mathcal{D}(E_b) |b\rangle W_{bb} \langle b|$$

L'équation de Schrödinger appliquée sur la décomposition (C.2)

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (H^{(0)} + W) |\psi(t)\rangle$$

conduit au système d'équations différentielles (*cf.* (9.163))

$$i\hbar \dot{\gamma}_a(t) = \int e^{i\omega_{ab}t} W_{ab} \gamma_b(t) \mathcal{D}(E_b) dE_b \quad (C.3)$$

$$i\hbar \dot{\gamma}_b(t) = e^{-i\omega_{ab}t} W_{ab}^* \gamma_a(t) \quad (C.4)$$

avec $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$. Nous savons empiriquement que $|\gamma_a(t)|^2$ est donné par une loi exponentielle

$$|\gamma_a(t)|^2 = e^{-\Gamma t} \quad (C.5)$$

ce qui suggère d'essayer un comportement

$$\gamma_a(t) = \exp\left(-\frac{i\delta}{2}t\right) \quad \delta = \delta_1 - i\Gamma \quad (C.6)$$

où δ_1 est réel. La substitution de (C.6) dans (C.4) avec les conditions initiales $\gamma_b(t=0) = 0$ donne par intégration sur t

$$\gamma_b(t) = \frac{W_{ab}^*}{\hbar [\omega_{ab} + \delta/2]} [\exp(-i(\omega_{ab} + \delta/2)t) - 1] \quad (C.7)$$

Pour des temps longs, $t \gg \Gamma^{-1}$, l'exponentielle dans (C.7) tend rapidement vers zéro et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\gamma_b(t)|^2 = \frac{|W_{ab}|^2}{\hbar^2 [(\omega_{ab} + \delta_1/2)^2 + \Gamma^2/4]} \quad (C.8)$$

Pour vérifier la cohérence de notre hypothèse de départ avec les équations d'évolution (C.3) et (C.4), il faut reporter (C.6) dans (C.3), ce qui donne

$$\frac{\hbar\delta}{2} = \int dE_b \mathcal{D}(E_b) |W_{ab}|^2 \frac{1 - \exp(i[\omega_{ab} + \delta/2]t)}{\hbar(\omega_{ab} + \delta/2)} \quad (C.9)$$

La constante δ doit être solution de l'équation intégrale (C.9). Pour fixer les idées, examinons la transition d'un état excité i d'un atome d'énergie E_i vers l'état fondamental f d'énergie E_f de cet atome, avec émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. On peut, à une excellente approximation, négliger l'énergie cinétique de recul de l'atome final dont l'énergie est simplement E_f avec comme choix de référentiel celui où l'atome est au repos dans son état initial (*cf.* la discussion du § 14.3.4). La densité d'états finaux à utiliser dans (C.9) est celle (14.62) du photon. En résumé, nous avons $|a\rangle = |i\rangle$ et $|b\rangle =$ atome dans l'état f + photon $= |f \otimes \vec{k}s\rangle$, ainsi que la conservation de l'énergie

$$\hbar\omega_{ab} = E_a - E_b = E_i - (E_f + \hbar\omega) = \hbar(\omega_0 - \omega) \quad (C.10)$$

avec $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$. L'équation (C.9) devient, en choisissant ω comme variable d'intégration au lieu de E_f , $dE_b = \hbar d\omega$

$$\frac{\hbar\delta}{2} = \int_0^\infty d\omega \mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2 \frac{1 - \exp(i[\omega_0 - \omega + \delta/2]t)}{\omega_0 - \omega + \delta/2} \quad (\text{C.11})$$

Nous sommes intéressés par le comportement de cette équation aux temps longs, et nous avons besoin du comportement pour $t \rightarrow \infty$ de la fonction $f(t, x)$ considérée comme distribution

$$f(t, x) = \frac{1 - e^{itx}}{x}$$

Lorsque x est réel, sa transformée de Fourier est

$$\tilde{f}(t, u) = i[\theta(u) - \theta(t + u)] \quad (\text{C.12})$$

car

$$-i \int_{-t}^0 dx e^{-iux} = \frac{1 - e^{itx}}{x}$$

et la limite $t \rightarrow \infty$ de $\tilde{f}(t, u)$ est simplement $-i\theta(-u)$, ce qui donne pour $f(t, x)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = \mathbf{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (\text{C.13})$$

Ce résultat est aussi valable lorsque x a une petite partie imaginaire, $x = \text{Re } x \pm i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$. Il suffit pour le voir d'intégrer sur x dans le plan complexe, en complétant le contour d'intégration par un demi-cercle dont le rayon tend vers l'infini. Si δ_1 et Γ sont petits par rapport aux intervalles caractéristiques de variation des fonctions $\mathcal{D}(\omega)$ et $|W_{ab}(\omega)|^2$, on peut reporter (C.13) dans (C.11) et déterminer la valeur de δ

$$\delta = \frac{2}{\hbar} \mathbf{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2}{\omega_0 - \omega} - \frac{2i\pi}{\hbar} \mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2 \quad (\text{C.14})$$

Le deuxième terme du membre de droite de (C.14) confirme que $\Gamma = -\text{Im } \delta$ est bien donné par la règle d'or de Fermi

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2 \quad (\text{C.15})$$

tandis que le premier terme correspond au déplacement du niveau d'énergie

$$\text{Re } \delta = \delta_1 = \frac{2}{\hbar} \mathbf{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\mathcal{D}(\omega) |W_{ab}(\omega)|^2}{\omega_0 - \omega} \quad (\text{C.16})$$

Ce déplacement aurait pu être obtenu par un calcul au second ordre en théorie des perturbations indépendantes du temps ; il est nul au premier ordre d'après

notre hypothèse $W_{aa} = W_{bb} = 0$. On peut absorber δ_1 dans une redéfinition de ω_0 : $\omega_0 \rightarrow \omega_0 + \delta_1$ et d'après (C.8), la probabilité d'observer un photon de fréquence ω est

$$p(\omega) d\omega \simeq \frac{\mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2}{\hbar [(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4]} d\omega \quad (\text{C.17})$$

Cette probabilité est correctement normalisée à l'unité

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(\omega) d\omega = 1 \quad \text{car} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{\pi}{a}$$

compte tenu de la valeur (C.15) de Γ . La courbe représentative de $p(\omega)$ est une lorentzienne (aussi appelée courbe de Breit-Wigner)

$$p(\omega) = \frac{\mathcal{D}(\omega_0) |W_{ab}(\omega_0)|^2}{\hbar [(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2/4]} \quad (\text{C.18})$$

La fréquence du photon final n'a pas une valeur bien déterminée : elle présente une « dispersion »³ $\Delta\omega = \Gamma$, définie comme la largeur à mi-hauteur de la courbe $p(\omega)$

$$p\left(\omega_0 \pm \frac{1}{2} \Delta\omega\right) = \frac{1}{2} p(\omega = \omega_0)$$

En d'autres termes, le spectre de fréquences du photon émis n'est pas monochromatique. La quantité Γ est appelée *largeur de raie* ou parfois largeur naturelle de raie, étant donné qu'il existe d'autres causes d'élargissement comme l'effet Doppler ou les collisions ; en raison de (C.5), la vie moyenne de l'état excité est l'inverse de la largeur de raie, $\tau = 1/\Gamma$. La dispersion en énergie du photon final montre, par conservation de l'énergie, que l'énergie de l'état excité présente une dispersion $\Delta E = \hbar\Gamma$, et nous en déduisons la relation (4.29) entre la vie moyenne et la dispersion sur l'énergie

$$\tau \Delta E = \hbar \quad (\text{C.19})$$

La conservation de l'énergie implique que l'énergie de l'état excité n'a pas une valeur précise, mais présente une dispersion $\Delta E \simeq \hbar\Gamma$ autour de sa valeur centrale E_i . Cependant, il n'y a pas de limitation de principe à la précision avec laquelle on peut mesurer cette valeur centrale. La figure C.1 montre

3. Dispersion est à mettre entre guillemets car l'intégrale

$$\int_0^\infty d\omega (\omega - \omega_0)^2 p(\omega)$$

est divergente, et on ne peut pas définir une dispersion au sens strict du terme.

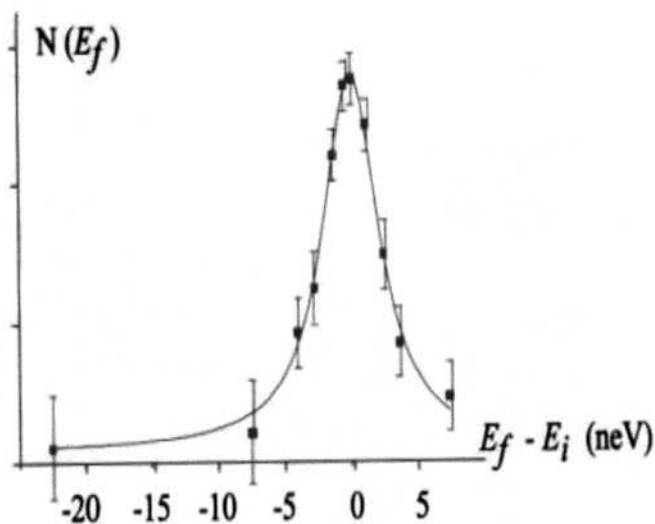
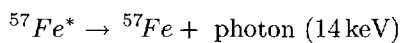


FIG. C.1 – Spectre des photons de désintégration $^{57}\text{Fe}^* \rightarrow ^{57}\text{Fe} + \text{photon}$. D'après Basdevant et Dalibard [2001], chapitre 17.

la détermination expérimentale de $p(\omega)$ pour la désintégration d'un niveau excité du $^{57}\text{Fe}^*$



dont la vie moyenne est $\tau \simeq 1.4 \times 10^{-7} \text{ s}$.

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Appendice D

Constantes physiques

Vitesse de la lumière dans le vide	: $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$
Constante de Planck	: $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Constante de Planck divisée par 2π	: $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
Charge de l'électron ($q_e < 0$)	: $ q_e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masse de l'électron	: $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ $= 0.511 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du proton	: $m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 938.3 \text{ MeV.c}^{-2}$
Masse du neutron	: $m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $= 939.5 \text{ MeV.c}^{-2}$
Constante de Rydberg	: $R_\infty = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = 13.61 \text{ eV}$
Magnéton de Bohr	: $\mu_B = \frac{ q_e \hbar}{2m_e} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV.T}^{-1}$
Magnéton de Bohr nucléaire	: $\mu_N = \frac{ q_e \hbar}{2m_p} = 3.15 \times 10^{-8} \text{ eV.T}^{-1}$
Constante de Boltzmann	: $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
Constante de gravitation	: $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ N.m}^2.\text{kg}^{-2}$
Conversion énergie-longueur d'onde	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \lambda = 1.24 \mu\text{m}$
Conversion énergie-fréquence	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow \nu = 2.42 \times 10^{14} \text{ Hz}$
Conversion énergie-température	: $E = 1 \text{ eV} \longleftrightarrow T = 11600 \text{ K}$

Cette page est laissée intentionnellement en blanc.

Références générales

- [1] Balian [1991] : R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics*, Springer, Berlin
- [2] Basdevant et Dalibard [2001] : J-L Basdevant et J. Dalibard, *Mécanique quantique*, Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau.
- [3] Cohen-Tannoudji *et al.* [1973] : C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris.
- [4] Diu *et al.* [1990] : B. Diu, C. Guthman, D. Lederer et B. Roulet, *Physique statistique*, Hermann, Paris.
- [5] Feynman *et al.* [1965] : R. Feynman, R. Leighton et M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley, Reading.
- [6] Grynberg *et al.* [1997] : G. Grynberg, A. Aspect et C. Fabre, *Introduction aux lasers et à l'optique quantique*, Ellipses, Paris.
- [7] Isham [1995] : C. Isham, *Lectures on Quantum Theory*, Imperial College Press, Londres.
- [8] Jackson [2001] : J.D. Jackson, *Électrodynamique classique*, Dunod, Paris.
- [9] Jauch [1968] : J. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Reading.
- [10] Kittel [1970] : C. Kittel, *Introduction à la physique du solide*, Dunod, Paris.
- [11] Landau et Lifschitz [1966] : L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Éditions MIR, Moscou.
- [12] Laloë [2001] : F. Laloë, « Do we really understand Quantum Mechanics? Strange correlations, paradoxes and theorems ». *Am. Journ. Phys.* **69**, 655.
- [13] Le Bellac [1988] : M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Interéditions/Éditions du CNRS, Paris.
- [14] Le Bellac et Mortessagne [2001] : M. Le Bellac et F. Mortessagne, *Thermodynamique statistique*, Dunod, Paris.
- [15] Lévy-Leblond et Balibar [1984] : J-M Lévy-Leblond et F. Balibar, *Quantique : Rudiments*, InterEditions, Paris
- [16] Mandel et Wolf [1995] : L. Mandel et E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge University Press, Cambridge
- [17] Merzbacher [1970] : E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New-York.

- [18] Messiah [1959] : A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris.
- [19] Nielsen et Chuang [2001] : M. Nielsen et I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [20] Omnès [2000] : R. Omnès, *Comprendre la mécanique quantique*, EDP Sciences, Paris.
- [21] Peres [1993] : A. Peres, *Quantum Theory, Concepts and Methods*, Kluwer, Boston.
- [22] Weinberg [1995] : S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [23] Wichman [1974] : E. Wichman, *Physique quantique*, cours de physique de Berkeley volume 5, Armand Colin, Paris.

Index

A

absorption stimulée, 152
adjoint, 50
algèbre de Lie, 238, 240, 242, 243, 256
ammoniac, 145
amplitude
 de diffusion, 433, 476
 d'hélicité, 356
 de la polarisation, 69
 de probabilité, 25, 26, 75, 107, 139
angles
 de Bragg, 41
 de diffusion, 430
antiferromagnétisme, 474
antilinéaire, 538, 540
antiunitaire, 233, 538, 540
anyons, 469
approximation
 de Born, 453, 461
 des ondes tournantes, 151
 des particules indépendantes, 140
 dipolaire, 500
 quasi-résonante, 151, 513
 semi-classique, 498
atome, 4
 à deux niveaux, 155, 510
 de Rydberg, 528
 d'hydrogène, 344
 habillé, 533
 muonique, 527
auto-adjoint, 50
axe de quantification, 324, 350

B

bandes interdites, 299
barrière centrifuge, 341

base

 des états de Bell, 199
 orthonormée, 48, 214
 standard (du moment angulaire),
 326

bases incompatibles, 78

benzène, 140

bit quantique, 197

boson, 470

 de Higgs, 10

 de jauge, 10, 424

bra, 52

Breit-Wigner, 460

butadiène, 159

C

calcul quantique, 196

cas pur, 107, 169

centre de masse, 257

champ

 de jauge, 424

 électromagnétique quantifié, 401,
 505

 quantifié, 394, 396

 scalaire, 394

chat de Schrödinger, 194, 557

chemins indiscernables, 26

chromodynamique, 9, 481

clé publique, 80

clé secrète, 80

coefficient

 de diffusion, 521, 558

 de réflexion, 280

 de transmission, 280, 289

coefficients de Clebsch-Gordan, 361

cohérences, 195, 511, 549

commutateur, 57, 114

compatibles, 113

composantes

- sphériques, 337, 364, 502, 507
- standard, 364

composition des moments angulaires, 360

condensation de Bose-Einstein, 481

conditions aux limites périodiques, 303, 390

constante

- de Boltzmann, 12
- de couplage, 9, 35
- de Fermi, 464, 545
- de gravitation, 10
- de Planck, 17
- de Rydberg, 34
- de structure fine, 35

contextualité, 113

contextuelle, 189

contrefactuelle, 181, 190

convergence

- en norme (ou forte), 215
- faible, 215

corps noir, 14

corrélations quantiques, 549

couplage

- minimal, 410
- spin-orbite, 361

courant, 271, 273

- de particules, 408
- de probabilité, 273
- électromagnétique, 408

cryptographie quantique, 80

cycles de fluorescence, 517

D

décohérence, 191, 194, 557

décomposition spectrale, 55, 221, 224

décroissance exponentielle, 561

dégénérescence de Kramers, 543

densité

- de niveaux, 305, 316
- de probabilité, 273
- d'états, 305, 561

déphasage, 436

déplacement Lamb, 404, 494

dérivée covariante, 408

désaccord, 150, 510

désintégration β , 247

désintégration radiative, 348

deutéron, 6, 368, 473, 475, 482

développement

- asymptotique, 488
- en ondes partielles, 435
- perturbatif, 486

diffraction, 21

- des neutrons, 39

diffusion

- cohérente, 45, 462
- incohérente, 45, 462

dimension

- d'un espace de Hilbert, 48, 214
- d'un groupe, 236

dipolaire électrique, 155

dispersion, 114

diviseur de faisceau, 64

domaine, 218

E

effet

- Casimir, 424
- photo-électrique, 18, 503
- tunnel, 289, 456
- Zeeman, 203, 494, 522

électrodynamique quantique, 126, 494

électrons, 4

électrons π , 137électrons σ , 137

élément de matrice réduit, 363

émission

- spontanée, 156, 505
- stimulée (ou induite), 152, 502

énergie

- cinétique, 251, 253
- de délocalisation, 140
- de dissociation, 5
- de liaison, 5
- de point zéro, 383, 397, 402, 420
- de recul, 506, 518
- du vide, 402
- potentielle, 30, 270

ensemble complet d'opérateurs compatibles, 58

entropie statistique, 172

équation

- de continuité, 272, 398
- de Dirac, 126, 491

- de Schrödinger dépendant du temps, 271
 - de Schrödinger indépendante du temps, 271
 - intégrale de la diffusion, 452
 - équations
 - de Bloch optiques, 510, 512
 - de Maxwell, 11, 398
 - espace
 - complet, 214
 - de Fock, 394
 - de Hilbert, 48, 213
 - de phase, 303
 - des états, 47, 77, 106
 - des états de polarisation, 71
 - étalement du paquet d'ondes, 269, 311, 454
 - état
 - anti-lié, 442
 - cohérent, 386, 405, 415, 554
 - comprimé, 407, 419
 - de diffusion, 30, 306
 - de Rydberg, 551
 - du vide, 403
 - GHZ, 186
 - intriqué, 168
 - lié, 5, 30, 281, 440
 - non polarisé, 172
 - propre, 88
 - pur, 169
 - semi-classique, 386
 - singulet, 358, 472, 477, 498
 - stationnaire, 96, 120
 - triplet, 358, 472, 477, 498
 - virtuel, 442, 447, 460
 - éthylène, 137
 - évolution
 - hamiltonienne, 174
 - irréversible, 117
 - réversible, 116, 117
 - unitaire, 174
 - excitation élémentaire, 393
 - expérience de Stern-Gerlach, 85, 317
- F**
- facteur
 - de Landé, 495
 - gyromagnétique, 83
 - faisceau, 64
 - fermions, 470
 - ferromagnétique, 474
 - filtre de Stern-Gerlach, 87
 - fluctuations
 - quantiques, 402, 403
 - thermiques, 402
 - flux, 430
 - fonction d'onde, 139, 259, 263, 302, 385
 - en représentation p , 265
 - radiale, 341
 - fonctions
 - de Bessel sphériques, 436
 - de Green, 451
 - force
 - à courte portée, 9
 - à longue portée, 9
 - classique, 416
 - de van der Waals, 524
 - d'échange, 474
 - dissipative, 516
 - réactive, 516, 532
 - formaldéhyde, 159
 - formule de Rabi, 130
 - franges de Ramsey, 554
 - fréquence
 - de Bohr, 33
 - de Debye, 420
 - de Larmor, 84
 - de Rabi, 150, 511
 - de Rabi du vide, 531
 - de résonance, 149
- G**
- gaz de Fermi, 479
 - générateur infinitésimal, 120, 236, 241
 - gluon, 9
 - grandeur
 - physique, 108, 113
 - physique incompatible, 114
 - physique quantique, 78
 - graviton, 10
 - groupe, 234
 - connexe, 235
 - continu, 235
 - de jauge, 423
 - discret, 235

de Lie, 235
des rotations, 235
 $SO(3)$, 235
 $SU(2)$, 242, 254

H

hamiltonien, 95, 116, 252
 de Jaynes-Cummings, 531
harmoniques sphériques, 334, 435
hélicité, 350, 357
helium, 313, 534
hermitique conjugué (ou adjoint), 50,
 220

I

impulsion, 11, 236
 de Fermi, 479
 $\pi/2$, 552
inégalité
 de Bell, 178, 179, 206, 210
 de Heisenberg, 27, 115, 245, 266,
 269, 311, 313, 367, 406
 de Heisenberg temporelle, 97, 121,
 310
 de Schwartz, 49, 216, 217
information quantique, 195
interactions
 électrofaibles, 8
 électromagnétiques, 8
 faibles, 9, 247, 464
 fortes, 9
 gravitationnelles, 10
interférences, 22
interféromètre
 à neutrons, 43
 de Mach-Zehnder, 42, 210
inversion de population, 152, 514
isométrie, 51

J

jauge
 de Coulomb (ou de rayonnement),
 399
 de Lorentz, 403

K

ket, 52

L

largeur de raie, 122, 564
laser, 152
leptons, 7
liaisons σ , 137
limite continue, 395
loi
 de Boltzmann, 12
 de Coulomb, 8
 de dispersion, 392
 de Lorentz, 11
 de Malus, 69
 de Poisson, 387, 519
longueur
 de diffusion, 439, 462
 d'onde Compton, 35, 526
 d'onde thermique, 481

M

magnon, 206
maille du cristal, 3, 41
maser, 152
masse effective, 301
masse réduite, 38, 257
matrice, 49
 de Hadamard, 65
 de passage, 287
 de Pauli, 93
 de rotation (ou de Wigner), 94, 328
 de transition, 353
 densité, 170
 normale, 63
 positive, 63
 S , 293, 438, 440, 459
 strictement positive, 63
mécanique ondulatoire, 259, 385
mélange, 170
mélasse optique, 518
méson, 123
méson π , 7, 472, 476, 482
mesure, 190, 318, 549
 idéale, 110

méthode
 de Wigner-Weisskopf, 561
 variationnelle, 489, 535
microréversibilité, 541
microscope à effet tunnel, 291
modèle
 d'Einstein, 389
 planétaire de l'atome, 32
 standard, 10, 545
modes normaux, 390
molécule, 4
 diatomique, 37, 314, 473
moment
 angulaire, 236, 323
 angulaire orbital, 333
 conjugué, 396, 400
 de Fermi, 479
 dipolaire électrique, 147, 544

N

neutrino, 7, 131, 464
neutrons, 4, 20
 froids, 21
 thermiques, 20
niveau de Fermi, 479
niveaux
 de Landau, 412
 de rotation, 336, 473
 quantifiés, 281
nœuds, 282, 342
nombre
 de masse, 4
 de niveaux, 125, 137
 quantique magnétique, 324
 quantique radial, 343
nombres d'occupation, 394
norme, 49
 (d'un opérateur), 218
notation de Dirac, 52
noyau atomique, 4
nucléons, 5
numéro atomique, 4

O

onde
 partielle, 341
 sphérique entrante, 433
 sphérique sortante, 433

opérateur
 borné, 218
 d'annihilation (ou de destruction), 380
 de champ, 396
 de création, 380
 densité, 170, 374, 446, 478
 densité réduit, 172, 511, 548
 de rotation, 241
 de translation, 244
 d'évolution, 118
 hermitique (ou auto-adjoint), 50, 108, 220
 hermitique conjugué (ou adjoint), 50, 220
 identité, 50
 impulsion, 244
 linéaire, 49
 moment dipolaire électrique, 155, 501
 nombre de particules, 381
 position, 243
 scalaire, 241
 tensoriel irréductible, 365, 376
 vectoriel, 242
 unitaire, 50, 224
opération de symétrie, 56
orbitales moléculaires, 138
ordre à longue distance, 3
oscillateur
 harmonique, 15, 379
 harmonique forcé, 416
oscillations
 de Rabi, 153
 de Rabi du vide, 531
 neutrino, 132

P

paquet d'ondes, 266, 453
 gaussien, 312
paramagnétique, 474
paramètre
 de saturation, 514
 d'impact, 431
parité, 235, 246, 288, 338, 473
 d'une particule, 354
 impaire, 249
 paire, 249

particule relative, 257
 perturbation
 dépendant du temps, 307
 indépendante du temps, 486
 phase de test, 78
 phonon, 37, 393
 photons, 18, 401
 pic de Gamow, 457
 piège magnéto-optique, 522
 poids de Boltzmann, 12
 point de vue
 actif, 231, 249
 de Copenhague, 112
 de Dirac, 416
 de Heisenberg, 125
 de Schrödinger, 124
 interaction, 416
 passif, 230, 249
 polarisation, 477
 circulaire, 71
 circulaire droite, 71
 circulaire gauche, 72
 de la lumière, 68
 d'un photon, 74, 350
 linéaire, 68, 77
 polarisé, 89
 polariseur (λ, μ), 73
 polynômes
 de Hermite, 385
 de Legendre, 337, 435
 portée effective, 443
 positron, 7, 482
 positronium, 203, 482
 potentiel, 30, 270
 central, 339
 de Coulomb instantané, 399
 de Lennard-Jones, 313
 effectif, 341, 443
 optique, 450
 périodique, 295, 315
 scalaire, 399
 spin-orbite, 362, 492
 vecteur, 399, 411
 pré-mesure, 190, 194, 549
 précession de Thomas, 492
 première zone de Brillouin, 299, 391
 préparation, 108
 du système, 78, 113

principe
 de correspondance, 126
 de localité, 177
 de Pauli, 471
 de superposition, 69, 106
 d'incertitude de Heisenberg, 27
 probabilité
 de présence, 139, 263, 302
 de transition, 155, 309
 produit
 scalaire, 48, 107, 216
 tensoriel, 165, 167
 projecteurs, 51
 projection, 73
 protons, 4
 pseudovecteurs, 247
 puits
 carré fini, 282
 carré infini, 281
 sphérique, 368

Q

q-bit, 197
 quantification
 dans une boîte, 303, 401
 des niveaux d'énergie, 33
 du champ électromagnétique, 398
 quantifié, 86
 quantifier le moment angulaire, 324
 quarks, 7
 quasi-impulsion, 296
 quasi-particule, 393

R

radioactivité α , 290
 radioactivité β , 5, 9
 rayon, 107, 231, 537
 de Bohr, 33
 classique de l'électron, 13
 extraordinaire, 69
 ordinaire, 69
 rayonnement électromagnétique, 2
 réalisme local, 178, 189
 réduction du paquet d'ondes, 111
 refroidissement
 Doppler, 516
 laser, 510

règle
 de factorisation, 76
 d'or de Fermi, 306, 310
 règles de sélection, 502
 relation
 de commutation canonique, 126, 244
 de fermeture, 53, 55, 224
 de Planck-Einstein, 19
 d'Einstein, 522
 d'unitarité, 451
 relations de commutation, 240, 323
 renormalisation, 9
 renversement du temps, 248, 285, 293, 540
 représentation
 des relations de commutation, 245
 irréductible, 331
 projective, 234, 243
 spinorielle, 235, 328
 vectorielle, 235, 328
 réseau réciproque, 40
 résolvante, 60, 222
 résonance, 460
 magnétique nucléaire, 84, 129
 rotateur sphérique, 335, 473

S

section efficace
 cohérente, 462
 de Rutherford, 461
 différentielle, 435, 477
 différentielle de collision
 (ou de diffusion), 431
 élastique, 448
 incohérente, 462
 inélastique, 448
 totale, 431, 437, 449, 477
 séparabilité, 215
 séparateur de faisceau, 64
 simplement connexe, 243
 source
 classique, 416
 de particules, 275
 du champ électromagnétique, 11, 398
 sous-espace de la valeur propre a_n , 55

spectre
 continu, 222
 de rotation, 473
 (des niveaux), 34
 discret, 222
 sphère
 de Fermi, 480
 dure, 432
 spin, 84
 statistique
 de Bose ou Bose-Einstein, 470
 de Fermi ou Fermi-Dirac, 470
 structure
 fine, 491
 hyperfine, 497
 superposition
 cohérente, 173
 incohérente, 173
 surface de Fermi, 480
 symétrie
 de jauge, 423
 interne, 423
 symétries, 229
 système complet d'opérateurs (ou de grandeurs physiques compatibles), 113

T

téléportation, 199
 température
 de Curie, 474
 de Néel, 474
 de recul, 519
 Doppler, 521
 temps de décohérence, 558
 terme
 de Darwin, 527
 diamagnétique, 500, 529
 test, 107
 idéal, 110
 maximal, 113, 173
 théorème
 de Bloch, 296
 de Feynman-Hellmann, 128
 d'Ehrenfest, 121, 237
 de non clonage quantique, 195
 de Stone, 224
 de Wigner, 233, 295, 538

- de Wigner-Eckart, 365, 377, 495, 502
- optique, 449
- spin-statistique, 471
- théorie
 - de Fermi, 465
 - électro-faible, 465
- théories de jauge non abéliennes, 422
- trace, 53
 - partielle, 172, 511
- transfert d'impulsion, 453
- transformation
 - canonique, 407
 - de Bogoliubov, 407
 - de Galilée, 249, 250, 258, 320
 - de jauge, 399
 - de jauge globale, 408
 - de jauge locale, 408
- transition
 - dipolaire, 350
 - dipolaire électrique, 155, 354, 502
 - dipolaire magnétique, 354
 - radiative, 348, 371

U

- unitaire, 233

V

- valeur
 - moyenne, 89
 - moyenne d'une grandeur physique, 109
 - propre, 54
 - propre dégénérée, 54
- variables additionnelles (ou cachées), 57, 180
- vecteur
 - axial, 247
 - de Bloch, 203, 511
 - de Jones, 74
 - d'état, 77, 106
 - polaire, 247
 - propre, 54
- vie moyenne, 36, 122, 509, 564