

---

# Notes de cours sur la Mécanique quantique

Université Joseph Fourier, Grenoble ;  
Master Physique M1, année 2003-04  
(version : 11 octobre 2003)

---

---

Frédéric Faure

<http://www.lpm2c.grenoble.cnrs.fr/People/Faure>

---

Frederic Faure, Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPM2C)  
(Maison des Magisteres Jean Perrin, CNRS) BP 166 38042 Grenoble Cedex 9 France

email : [frederic.faure@ujf-grenoble.fr](mailto:frederic.faure@ujf-grenoble.fr)

<http://lpm2c.grenoble.cnrs.fr/People/Faure/>

tel : 04 76 88 74 98

fax : 04 76 88 79 83



# Table des matières

0.0.1	Introduction . . . . .	11
0.0.1.1	But et objets de la mécanique quantique : . . . . .	11
0.0.1.2	Différences et relations entre mécanique classique et mécanique quantique . . . . .	12
0.0.1.3	Place de la théorie quantique en physique : . . . . .	12
0.0.1.4	Autres remarques . . . . .	13
0.0.1.5	Prérequis supposés . . . . .	13
0.0.1.6	Références conseillées : . . . . .	13
<b>1</b>	<b>Une particule quantique sans spin, à 1 dimension (I)</b>	<b>15</b>
1.1	Espace des états : les fonctions d'ondes . . . . .	15
1.1.1	Espace vectoriel des fonctions d'ondes . . . . .	15
1.1.2	Exemples importants . . . . .	16
1.1.2.1	Les ondes planes . . . . .	17
1.1.2.2	Paquet d'onde Gaussien . . . . .	17
1.1.3	Le produit scalaire . . . . .	19
1.1.4	Vecteur dual, espace dual . . . . .	21
1.2	Opérateurs différentiels $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ . . . . .	21
1.2.1	Définitions . . . . .	21
1.2.2	Opérateurs linéaires . . . . .	23
1.2.3	Opérateurs adjoints et autoadjoints . . . . .	23
1.3	Évolution d'un état quantique . . . . .	25
1.3.1	L'équation d'évolution . . . . .	25
1.3.2	Exemples d'évolutions d'ondes (images et films) . . . . .	26
1.3.2.1	Présentation générale . . . . .	26
1.3.2.2	Définition de la représentation de Husimi dans l'espace de phase . . . . .	27
1.3.2.3	L'oscillateur harmonique . . . . .	27
1.3.2.4	L'oscillateur Anharmonique . . . . .	30
1.3.2.5	Le double puits de potentiel . . . . .	34
1.4	Bases, et changement de bases . . . . .	36
1.4.1	Base orthonormée . . . . .	36
1.4.1.1	Exemple d'une particule sur un cercle . . . . .	38

1.4.2	Relation de fermeture . . . . .	38
1.4.3	Expression d'un opérateur dans une base . . . . .	39
1.4.4	Changement de base (*) . . . . .	40
1.5	Spectre d'opérateurs . . . . .	40
1.5.1	Définition et propriétés générales . . . . .	40
1.5.2	Spectre de l'opérateur $\hat{x}$ , "base de position" . . . . .	41
1.5.2.1	Relation de fermeture en position . . . . .	43
1.5.3	Spectre de l'opérateur $\hat{p}$ , "base d'impulsion" . . . . .	44
1.5.3.1	Transformée de Fourier, et relation de fermeture en impulsion . . . . .	44
1.5.3.2	Applications de la relation de fermeture . . . . .	45
1.5.4	Spectre de l'opérateur $\hat{H}$ , base des états stationnaires . . . . .	46
1.5.4.1	Interprétation physique : onde stationnaire . . . . .	46
1.5.4.2	Exemple d'une particule libre sur l'axe $x$ . . . . .	47
1.5.4.3	Exemple d'une particule libre sur un cercle . . . . .	48
1.5.4.4	Remarques . . . . .	48
1.5.5	Représentation d'Heisenberg (*) . . . . .	49
1.6	Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure . . . . .	49
1.6.1	Opération idéale de mesure d'un système quantique . . . . .	49
1.6.1.1	Limite de validité de l'équation de Schrödinger . . . . .	49
1.6.1.2	Exemple d'expérience : mesure de la position d'une particule passant par les double fentes de Young. . . . .	50
1.6.1.3	Postulat de la mesure . . . . .	51
1.6.2	Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique . . . . .	55
1.6.2.1	Faut il interpréter ? La description orthodoxe suffit t-elle ? . . . . .	55
1.6.2.2	Où est la Limite classique-quantique ? . . . . .	56
1.6.2.3	Une interprétation alternative : appliquons le principe de superposition aux objets macroscopiques . . . . .	56
1.6.3	Valeurs moyenne et variance de l'observable . . . . .	58
1.6.4	Relation d'incertitude et relations de commutation . . . . .	61
1.7	Conseils de Lecture . . . . .	62
1.8	Correction des exercices . . . . .	62
<b>2</b>	<b>Une particule quantique sans spin à 1 dimension (II)</b>	<b>65</b>
2.1	Interprétation des opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ comme générateurs . . . . .	65
2.1.1	$\hat{H}$ génère les translations dans le temps . . . . .	65
2.1.1.1	L'opérateur d'évolution : le propagateur . . . . .	65
2.1.1.2	Opérateurs unitaires . . . . .	66
2.1.1.3	Le groupe d'évolution des états quantiques dans le temps . . . . .	67
2.1.1.4	Relation d'incertitude temps-énergie . . . . .	69
2.1.2	Groupe des translations des états quantiques en espace . . . . .	69
2.1.3	Groupe des translations en impulsion . . . . .	71
2.1.4	Générateurs en mécanique classique . . . . .	71
2.2	Le potentiel harmonique ; Spectre de $\hat{H}$ et évolution . . . . .	73

2.2.1	Importance du potentiel Harmonique en physique . . . . .	73
2.2.2	Résolution algébrique du spectre . . . . .	75
2.2.2.1	Changement de variable . . . . .	75
2.2.2.2	Opérateurs de création et d'annihilation . . . . .	76
2.2.3	Expression et schéma des fonctions d'ondes $\psi_n(Q) = \langle Q n \rangle$ . . . . .	80
2.2.3.1	Fonctions d'ondes $\psi_n(x)$ . . . . .	81
2.2.4	Application : Modèle d'Einstein (1907) sur la capacité calorifique des matériaux . . . . .	82
2.2.5	Application : les modes quantiques du champ électromagnétique dans le vide. . . . .	83
2.2.5.1	Les équations de Maxwell dans le vide interprétées comme une assemblée d'oscillateurs harmoniques . . . . .	83
2.2.5.2	Quantification du champ électromagnétique . . . . .	85
2.2.5.3	Paquet d'onde=onde classique . . . . .	86
2.2.5.4	Les photons . . . . .	86
2.2.5.5	Le vide quantique du champ électromagnétique . . . . .	87
2.2.6	Un effet surprenant du "vide quantique" de photons : la force de Casimir (1948) . . . . .	88
2.2.7	Les états cohérents et leur évolution par l'oscillateur harmonique . . . . .	90
2.2.7.1	Expression algébrique d'un paquet d'onde gaussien . . . . .	91
2.2.7.2	Évolution d'un paquet d'onde gaussien . . . . .	92
2.2.7.3	Algèbre et groupe de Weyl-Heisenberg (*) . . . . .	94
2.2.7.4	Algèbre et groupe de l'oscillateur Harmonique (*) . . . . .	96
2.3	Correspondances classique-quantique à l'aide du paquet d'onde Gaussien . . . . .	99
2.3.1	Comptage semi-classique du nombre d'états . . . . .	99
2.3.2	Règle de quantification semi-classique . . . . .	104
2.3.3	Représentation quantique dans l'espace de phase . . . . .	107
2.3.3.1	Relation de Fermeture par les états cohérents . . . . .	108
2.3.3.2	Représentation de Husimi d'un état quantique . . . . .	108
2.3.3.3	Exemples simples et importants . . . . .	109
2.4	Conseils de Lecture . . . . .	111
2.5	Solution des exercices . . . . .	112
<b>3</b>	<b>Une particule à 3 dimensions sans spin</b> . . . . .	<b>119</b>
3.1	Une Particule sans spin à 3 dimensions . . . . .	119
3.1.1	Espace des états $\mathcal{H}$ . . . . .	119
3.1.2	L'espace $\mathcal{H}$ comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ . . . . .	120
3.1.3	L'oscillateur Harmonique à 2 dimensions (TD) (*) . . . . .	123
3.2	Particule chargée dans un champ électromagnétique . . . . .	123
3.2.1	Expression du Hamiltonien classique . . . . .	124
3.2.1.1	Fonction Lagrangien : . . . . .	124
3.2.1.2	Impulsion généralisée : . . . . .	125
3.2.1.3	Fonction de Hamilton : . . . . .	125

3.2.1.4	Équations de mouvement classique . . . . .	125
3.2.1.5	Invariance de Jauge classique . . . . .	126
3.2.2	Équation de Schrödinger et invariance de Jauge . . . . .	126
3.2.2.1	Invariance de Jauge quantique . . . . .	126
3.2.3	Effet Aharonov-Bohm . . . . .	127
3.2.4	Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (*) . . . . .	129
3.2.4.1	Nécessité d'une description géométrique . . . . .	130
3.2.4.2	Autre écriture de l'équation de Schrödinger avec la dérivée covariante . . . . .	130
3.2.4.3	La fonction d'onde comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps . . . . .	131
3.2.4.4	Le champ électromagnétique comme une connexion sur ce fibré vectoriel . . . . .	131
3.2.4.5	Signification géométrique de la dérivée covariante $\mathcal{D}$ et courbure de la connexion . . . . .	132
3.2.4.6	On retrouve les expressions habituelles de l'électromagnétisme et l'invariance de Jauge . . . . .	134
3.2.4.7	Généralisation : Théories de Jauge de Yang-Mills . . . . .	137
3.2.5	Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique . . . . .	138
3.3	Conseils de Lecture . . . . .	139
3.4	Correction des exercices . . . . .	139
<b>4</b>	<b>Particule de spin 1/2</b> . . . . .	<b>141</b>
4.1	L'espace des états de spin . . . . .	141
4.2	Rotation de $2\pi$ et $4\pi$ d'un spin . . . . .	143
4.3	Générateurs des rotations et matrices de rotation . . . . .	144
4.3.1	Rotation autour de l'axe $y$ . . . . .	144
4.3.2	Rotation autour de l'axe $z$ . . . . .	145
4.3.3	Rotation autour de l'axe $x$ . . . . .	146
4.4	Représentation de l'état de spin sur la sphère de Bloch . . . . .	148
4.5	Groupe $SU(2)$ de rotation du spin, et relations de commutation . . . . .	150
4.5.1	Non commutativité du groupe et relations de commutation . . . . .	150
4.5.2	Rotation autour d'un axe $\vec{u}$ quelconque . . . . .	153
4.5.3	Algèbre de Lie des rotations . . . . .	153
4.5.4	Groupe de Lie des rotations . . . . .	154
4.5.5	Représentation des opérateurs de rotation dans une base : groupe des matrices $SU(2)$ . . . . .	154
4.6	Espace quantique total d'une particule à 3 dimensions avec spin 1/2 . . . . .	155
4.6.1	Remarques . . . . .	155
4.6.2	Une base de $\mathcal{H}_{tot}$ et champ spinoriels . . . . .	156
4.7	Autres degrés de liberté internes . . . . .	156

4.8	Mesure de spin, application récente : la Cryptographie quantique . . . . .	157
4.8.1	Cryptographie classique symétrique à clef secrète . . . . .	158
4.8.2	Le protocole B.B.84 pour partager une clef secrète . . . . .	158
4.9	Interaction du spin avec le champ électromagnétique . . . . .	160
4.9.1	Cas de l'électron . . . . .	160
4.9.2	Autres particules de spin 1/2 . . . . .	161
4.9.3	Évolution du spin seul, précession de Larmor . . . . .	162
4.9.4	Résonance Magnétique Nucléaire (R.M.N.) et Imagerie Magnétique Résonante (M.R.I.) . . . . .	164
4.10	Conseils de Lecture . . . . .	167
4.11	Correction des exercices . . . . .	167
<b>5</b>	<b>Plusieurs particules</b>	<b>169</b>
5.1	Plusieurs particules discernables . . . . .	169
5.1.1	Pour deux particules . . . . .	169
5.1.2	Opérateurs de $\mathcal{H}_{total}$ . . . . .	170
5.1.3	Pour $N$ particules . . . . .	170
5.2	Non localité de la mécanique quantique, le paradoxe E.P.R. . . . .	171
5.2.1	États enchevêtrés : états surprenants de l'espace total . . . . .	171
5.2.2	Description quantique orthodoxe . . . . .	171
5.2.3	Objection de Einstein-Podolsky-Rosen (E.P.R.) sur la non localité (1935) . . . . .	174
5.2.4	Théories locales à variable cachées et inégalités de Bell (1964) . . .	175
5.2.5	Violation de l'inégalité par la mécanique quantique (1976) . . . . .	176
5.2.5.1	Modèle quantique . . . . .	176
5.2.5.2	Non localité de la mécanique quantique, confirmation ex- périmentale . . . . .	177
5.3	Plusieurs particules identiques . . . . .	177
5.3.1	Deux particules identiques . . . . .	178
5.3.1.1	Particules de spins demi-entier, les Fermions . . . . .	178
5.3.1.2	Particules de spins entier, les Bosons . . . . .	180
5.3.2	Plusieurs particules identiques . . . . .	181
5.4	Aperçu sur les particules élémentaires et forces élémentaires (*) . . . . .	183
5.4.1	Liste des particules élémentaires . . . . .	183
5.4.1.1	La matière . . . . .	183
5.4.1.2	L'antimatière . . . . .	184
5.4.1.3	Les bosons de Jauge . . . . .	185
5.4.1.4	Particules élémentaires stables . . . . .	185
5.4.2	Les particules composées . . . . .	185
5.4.2.1	Les mésons : . . . . .	185
5.4.2.2	Les baryons : . . . . .	186
5.4.2.3	Noyau nucléaire . . . . .	186
5.4.2.4	Composés plus élaborés : atomes, molécules, matériaux,...	186

5.4.2.5	Particules composées stables . . . . .	186
<b>6</b>	<b>Méthodes d'approximation; résolution approchée</b>	<b>187</b>
6.1	Théorie des perturbations stationnaires . . . . .	187
6.1.1	Cas de niveaux non dégénérés . . . . .	188
6.1.2	Exemple : vibration anharmonique d'un atome . . . . .	190
6.1.3	Cas de niveaux dégénérés . . . . .	193
6.2	Théorie des perturbations dépendant du temps . . . . .	194
6.2.1	Rappels sur l'approximation dipolaire électrique . . . . .	194
6.2.1.1	Onde plane . . . . .	194
6.2.1.2	Forces électriques et magnétiques . . . . .	196
6.2.1.3	Approximation dipolaire électrique . . . . .	196
6.2.2	Effet d'une onde cohérente; transitions dans le spectre discret . . .	197
6.2.2.1	Question : . . . . .	197
6.2.2.2	Solution : . . . . .	198
6.2.2.3	Interprétation des résonances : . . . . .	200
6.2.2.4	Expression de $ W_{ba} ^2$ . . . . .	202
6.2.3	Effet d'une onde incohérente . . . . .	203
6.2.3.1	Question : . . . . .	204
6.2.3.2	Solution . . . . .	204
6.2.3.3	Loi de décroissance . . . . .	204
6.2.4	Transition vers les continuum; La photo-ionisation; Effet photoélec- trique . . . . .	205
6.2.4.1	Remarques . . . . .	206
6.3	Méthodes variationnelles . . . . .	208
6.3.1	Méthode variationnelle pour problèmes stationnaires . . . . .	208
6.3.1.1	Propriété . . . . .	208
6.3.1.2	Méthode variationnelle . . . . .	209
6.3.1.3	Exemple : vibration anharmonique d'un atome (TD) . . .	210
<b>7</b>	<b>Symétries et règles de conservation</b>	<b>213</b>
7.1	Propriétés et méthodes de base . . . . .	213
7.1.1	Spectre commun de deux opérateurs qui commutent . . . . .	213
7.1.2	Application : recherche du spectre de $\hat{H}$ . . . . .	214
7.1.3	Loi de conservation et groupe de symétrie dynamique . . . . .	215
7.1.3.1	Loi de conservation : . . . . .	215
7.1.3.2	Groupe de symétrie dynamique . . . . .	216
7.1.4	Impulsion totale et conservation . . . . .	217
7.2	Groupe de symétrie dynamique commutatif : électron dans un potentiel périodique cristallin, spectre en bandes. . . . .	218
7.2.1	Explication qualitative de la formation de bandes . . . . .	219
7.2.2	Ondes de Bloch . . . . .	222
7.2.2.1	Spectre en bandes . . . . .	223

7.3	Groupe non commutatif : les rotations et le moment angulaire . . . . .	227
7.3.1	Générateurs du groupe de rotation dans $\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$ . . . . .	227
7.3.1.1	Écriture vectorielle indépendante des coordonnées . . . . .	229
7.3.1.2	Relations de commutations . . . . .	230
7.3.2	Moment angulaire total et conservation . . . . .	230
7.3.2.1	Exemples de termes d'interaction invariants par une rotation globale . . . . .	231
7.3.2.2	Moment angulaire total . . . . .	231
7.3.3	Espace de représentation réductible et irréductible d'un groupe . . .	232
7.3.4	Espaces de représentation irréductibles des groupes de rotation SU(2) et SO(3) . . . . .	233
7.3.5	Espace de représentation irréductible d'un groupe commutatif . . .	239
7.3.6	Application : calcul du spectre du rotateur rigide . . . . .	239
7.3.6.1	L'espace de Hilbert des états quantiques . . . . .	239
7.3.6.2	L'opérateur Hamiltonien . . . . .	240
7.3.6.3	Spectre de $\hat{H}$ . . . . .	240
7.3.6.4	Les Harmoniques sphériques . . . . .	241
7.3.6.5	Parité des harmoniques sphériques . . . . .	242
7.4	Importance des représentations irréductibles en physique . . . . .	244
7.4.1	Propriété fondamentale : le théorème de Wigner . . . . .	244
7.4.2	Exemple : Spectre de l'atome d'hydrogène . . . . .	245
7.4.2.1	Rappels du spectre : . . . . .	245
7.4.2.2	Symétrie supplémentaire de Pauli, et dégénérescence en $l$ .	246
7.4.2.3	Exemple de la correction relativiste, brisant cette symétrie.	247
7.4.2.4	Atome à plusieurs électrons . . . . .	247
7.4.2.5	Effet d'un champ magnétique extérieur . . . . .	248
7.4.2.6	Structure fine et hyperfine de l'atome hydrogène . . . . .	249
7.5	Composition des moments angulaires . . . . .	250
7.5.1	Particule composée de deux particules de spin 1/2 . . . . .	250
7.5.1.1	La raie de 21 cm de l'hydrogène . . . . .	254
7.5.1.2	Horloges atomiques et mesure du temps . . . . .	254
7.5.2	Résultat général sur la composition de deux moments cinétiques . .	255
7.5.3	Application : symétrie d'isospin, et sections efficaces de réactions hadroniques . . . . .	257
7.5.3.1	La symétrie d'isospin . . . . .	257
7.5.3.2	Réaction nucléaires nucléon-pion . . . . .	258
7.5.4	Règles de sélection et théorème de Wigner-Eckardt . . . . .	260
7.5.4.1	Règle de sélection . . . . .	260
7.5.4.2	Théorème de Wigner Eckardt . . . . .	261
7.6	Symétries fondamentales en physique . . . . .	262
7.6.0.3	Le groupe de Poincaré . . . . .	262
7.6.0.4	Autres symétries fondamentales : . . . . .	262
7.7	Topologie des groupes de rotation SO(3) et SU(2) (*) . . . . .	263

7.8	Solution des exercices . . . . .	263
<b>A</b>	<b>Formules</b>	<b>265</b>
A.1	Intégrales Gaussiennes . . . . .	265
A.2	Relations de commutation . . . . .	265
A.3	Algèbre des matrices de Pauli . . . . .	266

## Avertissement

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

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

Les barres grises dans la marge, ainsi que le signe (\*), signifie que le passage peut être sauté en première lecture, et sera probablement sauté lors de l'exposé.

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

Ces notes ont été rédigées en utilisant le logiciel libre et gratuit **LyX** (voir <http://www.lyx.org>) sous Linux. Pour les graphiques, nous avons utilisé **xfig**. Pour les calculs numériques, nous avons utilisé entre autres la librairie graphique C++ : **root** (voir <http://root.cern.ch>). Pour certains calculs symboliques, nous avons utilisé **xcas** (logiciel libre et gratuit :

<http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/giac.html>).

### 0.0.1 Introduction

#### 0.0.1.1 But et objets de la mécanique quantique :

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

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

avec la **constante de Planck** :<sup>1</sup>

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

on utilise aussi la constante appelée "h barre" :

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

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

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

---

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

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

### 0.0.1.2 Différences et relations entre mécanique classique et mécanique quantique

- Le changement radical entre la mécanique quantique et la mécanique classique est essentiellement que en mécanique classique une particule est un **objet ponctuel** décrit par un point  $(\vec{x}, \vec{p})$  dans l'espace des phases (position - vitesse), alors que en mécanique quantique, une particule est un **objet étendu**, décrit par une fonction d'onde  $\psi(\vec{x})$ . Une conséquence est la possibilité d'interférences. Le rôle de la mécanique est de donner les lois qui gouvernent l'évolution de ces objets. Ce sont les **équations de Hamilton** (ou Newton) dans le cas classique et de **équation de Schrödinger** dans le cas quantique.
- La théorie quantique est valable pour des constituants élémentaires ou pour une assemblée de quelques constituants (atomes molécules) tant qu'il sont "isolés" de leur environnement. On ne peut pas parler de la fonction d'onde d'une balle ou même d'une poussière qui sont des objets "macroscopiques" et non isolés. En principe une théorie complète devrait pouvoir décrire toutes les échelles de la nature. A l'heure actuelle on ne sait pas rendre compatible de façon totalement satisfaisante, la théorie quantique avec l'aspect "classique" de la nature à l'échelle macroscopique. Cela est discuté depuis longtemps, voir le paradoxe du chat de Schrödinger. Voir par exemple [Cla88],[Aro02] pour les développements récents à ce sujet.

### 0.0.1.3 Place de la théorie quantique en physique :

On oppose :

théorie Classique et théorie Quantique.

Théorie non relativiste et relativiste et relativité générale ;

Cela donne le tableau suivant :

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

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

**0.0.1.4 Autres remarques**

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

**0.0.1.5 Prérequis supposés**

- En mathématiques : notion d'espace vectoriel, de Transformée de Fourier.
- En physique : mécanique analytique, Hamiltonienne.
- En mécanique quantique : problèmes 1D stationnaire,..., le cours et TD de Licence.

**0.0.1.6 Références conseillées :**

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

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

**Livres en anglais :**

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



# Chapitre 1

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

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

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

Avec ces hypothèses, la théorie quantique nous permet de décrire l'état dynamique de la particule par une fonction d'onde.

Bien sûr pour être valables en pratique, ces hypothèses nécessitent des approximations.

Il est important de noter que le terme “**particule**” sera employé mais que c'est un terme trompeur, puisqu'**il faut imaginer une onde qui est un objet étendu et non ponctuel**.

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

### 1.1 Espace des états : les fonctions d'ondes

#### 1.1.1 Espace vectoriel des fonctions d'ondes

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

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

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

1

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

$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H} \quad (1.1)$$

$$\phi = \lambda\psi_1 \in \mathcal{H} \quad (1.2)$$

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

Dans la **notation de Dirac** on convient de représenter une fonction d'onde  $\psi$  par le symbole  $|\psi\rangle$  et appelé **ket**. Ainsi on écrira pour eq.(1.1)

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

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

Il n'y a rien de nouveau dans cette notation, sauf peut être l'image que l'on se fait d'une fonction d'onde. L'image traditionnelle est une fonction  $x \rightarrow \psi(x)$  représentée par son graphe. Dans la notation de Dirac, on imagine plutôt un point de l'espace vectoriel  $\mathcal{H}$ , (qui est l'extrémité d'une flèche). Cette image vectorielle suggérée par Dirac (et les mathématiciens) a des avantages certains, mais notre imagination ne permet pas de dépasser la dimension trois, alors que  $\mathcal{H}$  est de dimension infinie! Voir figure (1.1).

## 1.1.2 Exemples importants

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

---

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

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

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

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

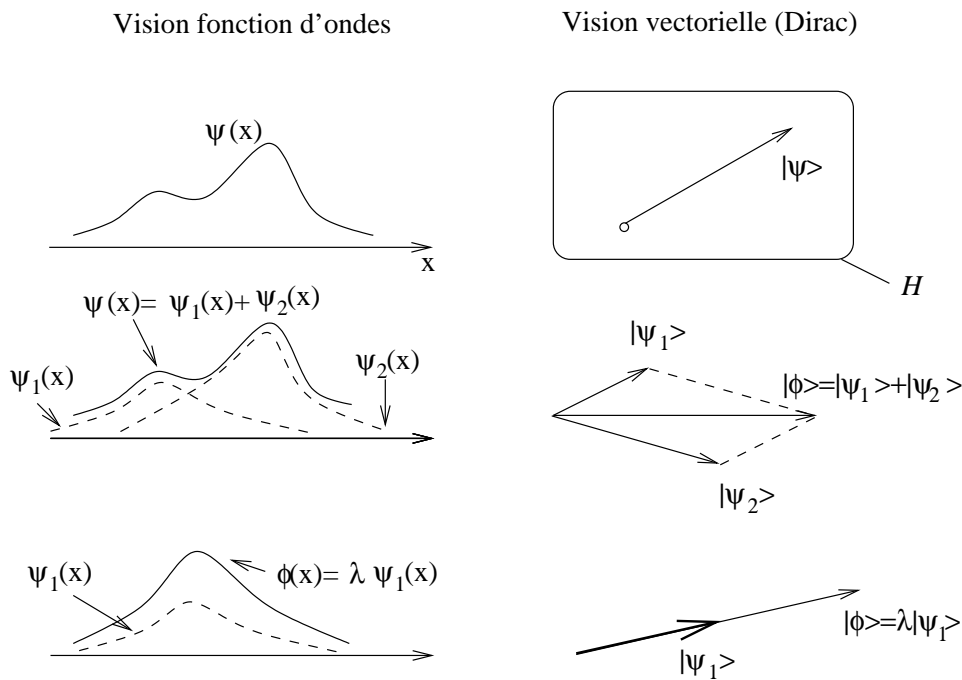


FIG. 1.1 – Cette figure illustre l’aspect vectoriel de l’espace des fonctions d’ondes.

1.1.2.1 Les ondes planes

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

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \quad (1.3)$$

$$|p\rangle : \text{notation de Dirac} \quad (1.4)$$

**Remarque :** l’intérêt du préfacteur sera montré plus loin, avec la relation de fermeture, cf eq(1.19).

1.1.2.2 Paquet d’onde Gaussien

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

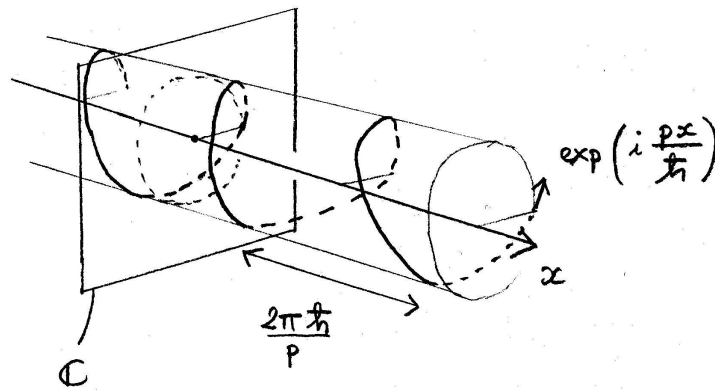


FIG. 1.2 – Onde plane, avec  $p > 0$ , voir (1.3).

$$\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.5)$$

$$|x_0, p_0, \sigma\rangle : \text{notation de Dirac} \quad (1.6)$$



FIG. 1.3 – Paquet d'onde Gaussien, voir (1.6).

**Remarques :**

- la valeur du préfacteur sera justifiée plus loin, pour des raisons de normalisation, voir exercice 2.
- Lorsque la largeur  $\sigma \rightarrow \infty$ , le paquet d'onde Gaussien tend vers une onde plane d'impulsion  $p_0$  (à condition de modifier aussi le préfacteur).

### 1.1.3 Le produit scalaire

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

Le **produit scalaire Hermitien** de deux fonctions d'ondes  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  est le nombre complexe noté  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  défini par<sup>2</sup> :

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx \quad (1.7)$$

(où  $\overline{\psi_1(x)}$  est le nombre complexe conjugué de  $\psi_1(x)$ ).

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

Comme en géométrie Euclidienne, on peut interpréter le produit scalaire  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  comme la composante du vecteur  $|\psi_2\rangle$  projetée orthogonalement sur le vecteur  $|\psi_1\rangle$ . Voir la figure 1.4. Intuitivement  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  renseigne donc si la fonction  $\psi_2(x)$  est plus ou moins "composée" de la fonction  $\psi_1(x)$ .

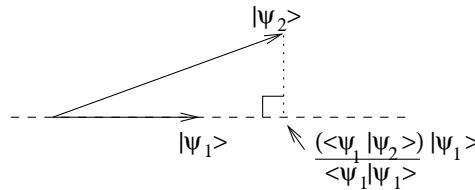


FIG. 1.4 – Schéma du produit scalaire de deux fonctions d'ondes.

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

Comme en géométrie Euclidienne,  $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$  définit la **norme** au carré de la fonction  $\psi$ . En terme de fonction, cela donne<sup>3</sup>

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

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

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

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

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

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

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

(Cette notion sera essentielle page 54 pour interpréter  $|\psi(x)|^2$  comme une densité de probabilité de présence lors de la détection de la particule, voir eq(1.23)).<sup>4</sup>

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

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

possède des propriétés très intéressantes, notamment vis à vis la transformée de Fourier, voir [RS78, CB73].

**Exercice 1** *Montrer que l'espace des fonctions de carré sommable est un espace vectoriel. (il faut vérifier les relations (1.1)). Pour cela utiliser la relation  $|\overline{f(x)}g(x)| \leq \frac{1}{2}|f(x)|^2 + \frac{1}{2}|g(x)|^2$ .*

**Exercice 2 :**

*Montrer que le paquet d'onde gaussien (1.6) est normalisé.*

**Exercice 3** *Calculer le produit scalaire entre deux paquet d'ondes Gaussien  $|x_0, p_0, \sigma \rangle$  et  $|x'_0, p'_0, \sigma \rangle$ , et interpréter le résultat.*

**Remarques et propriétés utiles :**

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

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

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

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

**preuve :**  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx = \overline{\int \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} dx} = \overline{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}$ . etc... ■

<sup>4</sup>En général pour un produit scalaire hermitien, on peut montrer les deux propriétés suivantes :

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

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

<sup>5</sup>Voir [RS78] page 39 pour une définition précise de Espace de Hilbert.

- D'autres espace de Hilbert que l'on rencontre souvent pour décrire une particule à une dimension sont
- Pour décrire une particule confinée dans le segment  $x \in [0, L]$ , c'est l'espace des fonctions de carré sommable  $\psi(x)$ , s'annulant en dehors du segment, et noté :

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

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

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

### 1.1.4 Vecteur dual, espace dual

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

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

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

On vient de voir que à partir d'un vecteur  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ , on peut construire un vecteur dual noté  $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$ , grâce au produit scalaire. Inversement, un théorème important (le Lemme de Riesz, voir [RS78] page 43) montre que tout vecteur dual s'obtient de cette façon. Il est important de noter que

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

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

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

### 1.2.1 Définitions

Un **opérateur** transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur). C'est donc une opération dans l'espace des fonctions d'ondes  $\mathcal{H}$ .

Voici la définition des trois opérateurs  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{H}$  d'après leur action sur des fonctions. On donnera plus loin leur interprétation physique et mathématique, ce qui justifiera leur définition.

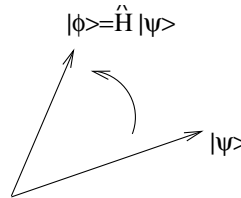


FIG. 1.5 – Schéma d'un opérateur qui transforme les vecteurs.

**Opérateur de position  $\hat{x}$  :**

$$|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = x\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (1.8)$$

**Opérateur d'impulsion  $\hat{p}$  :**

$$|\phi\rangle = \hat{p}|\psi\rangle \text{ défini par } \phi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (1.9)$$

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

$$\begin{aligned} |\phi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \text{ défini par } \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \\ \text{donc } \phi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

### 1.2.2 Opérateurs linéaires

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

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

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

#### Propriétés et remarques (\*)

- On convient souvent de mettre un “chapeau” sur le symbole d'un opérateur. Parfois, on omettra cette convention lorsque ce sera clair.
- L'ensemble des opérateurs linéaires sur  $\mathcal{H}$  forme un espace vectoriel, noté  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ . (vérifier)
- Si  $\hat{T}_1, \hat{T}_2$  sont deux opérateurs linéaires, alors  $\hat{T}_1\hat{T}_2$  (la composition) est aussi linéaire.
- $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$  sont des opérateurs linéaires.
- L'opération qui transforme un vecteur en lui même (c.a.d. opération qui ne fait rien) est une opération linéaire, appelée l'**identité** :

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

- Cette propriété de linéarité est très “contraignante” pour la transformation  $\hat{T}$ , car pour connaître son action sur n'importe quel vecteur, il suffit de connaître son action sur une base. (voir page 36).
- Remarquons que  $\psi(x) = \frac{1}{1+x} \in L^2(\mathbb{R})$ , car  $\langle \psi|\psi\rangle < \infty$ . Mais si  $|\phi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle$ , on a  $\phi(x) = \frac{x}{1+x} \notin L^2(\mathbb{R})$  car  $\langle \phi|\phi\rangle = \infty$ . On dit que  $\phi$  n'appartient pas au **domaine de définition** de l'opérateur  $\hat{x}$ . La notion de domaine de définition est essentielle pour faire la théorie mathématique correcte des opérateurs linéaires. (Voir [RS78] chapitre VIII).

### 1.2.3 Opérateurs adjoints et autoadjoints

Dans la suite, on utilise la notation :

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

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

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

**Propriétés et remarques**

- (\*) la relation ci-dessus définit bien l'opérateur adjoint et de façon unique (cela n'est pas évident a priori, voir [RS78] page 252).
- (TD) On a

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

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

- (TD) On a

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

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

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

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

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

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

**Propriété**

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

Le sens physique de cette propriété est donné plus loin.

**preuve (TD) :** pour tout vecteur  $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ ,

$$\langle \phi | x^+ \psi \rangle = \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x \overline{\phi} \psi dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi} x \psi dx = \langle \phi | \hat{x} \psi \rangle. \text{ Idem pour } V(\hat{x}).$$

Et  $\langle \phi | \hat{p}^+ \psi \rangle = \langle \hat{p} \phi | \psi \rangle = \int -i\hbar \overline{(d\phi/dx)} \psi dx = - \int i\hbar \overline{\phi} (d\psi/dx) dx = \langle \phi | \hat{p} \psi \rangle$ , où on a utilisé la formule d'intégration par partie  $[\overline{\phi} \psi]_{-\infty}^{+\infty} = \int (d\overline{\phi}/dx) \psi dx + \int \overline{\phi} (d\psi/dx) dx$ , et le fait que  $[\overline{\phi} \psi]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ .

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

## 1.3 Évolution d'un état quantique

### 1.3.1 L'équation d'évolution

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

$$\boxed{\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \left( -i \frac{\hat{H}}{\hbar} \right) |\psi(t)\rangle \quad (1.10)}$$

c'est à dire que en notation de fonctions d'ondes :

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

#### Remarques

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

que  $\lambda|\psi(t)\rangle$  et  $|\psi(t)\rangle$  ont le “même comportement”. (En termes mathématiques, l'évolution est définie sur l'espace projectif).

- D'après l'équation de Schrödinger, **la fonction d'onde conserve sa norme au cours du temps** :

$$\|\psi\|^2(t) = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \text{const} \quad (1.11)$$

**preuve :**

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

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

**Exercice 4** montrer de même que le produit scalaire est conservé  $\langle \psi(t) | \phi(t) \rangle = \text{cste}$ .

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

Cette section se trouve sur la page Web : [http://1pm2c.polycnrs-gre.fr/faure/enseignement/meca\\_q/animations/](http://1pm2c.polycnrs-gre.fr/faure/enseignement/meca_q/animations/), où l'on peut voir des animations, en plus du texte reproduit ci-après. Sur cette page Web, on peut aussi changer les paramètres de façon interactive.

#### 1.3.2.1 Présentation générale

Hormis quelques cas particuliers, il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger. Dans cette section, nous présentons des solutions obtenues en résolvant numériquement cette équation.

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

**Modèle étudié** On montre et commente des animations numériques d'une particule classique et quantique (sa fonction d'onde) à une dimension. La dynamique est spécifiée par son Hamiltonien (l'énergie de la particule), qui est de la forme :

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

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

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

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

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

Nous utilisons une représentation d'un état quantique dans l'espace de phase : **la représentation de Husimi**. Cette représentation sera étudiée page 108. Pour le moment nous donnons sa définition qui est intuitive et naturelle :

C'est la fonction :

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

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

### 1.3.2.3 L'oscillateur harmonique

**Potentiel :**

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

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

**Dynamique dans l'espace de configuration  $\mathbf{x}(t)$**  Voir figure (1.6).

#### Commentaires

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

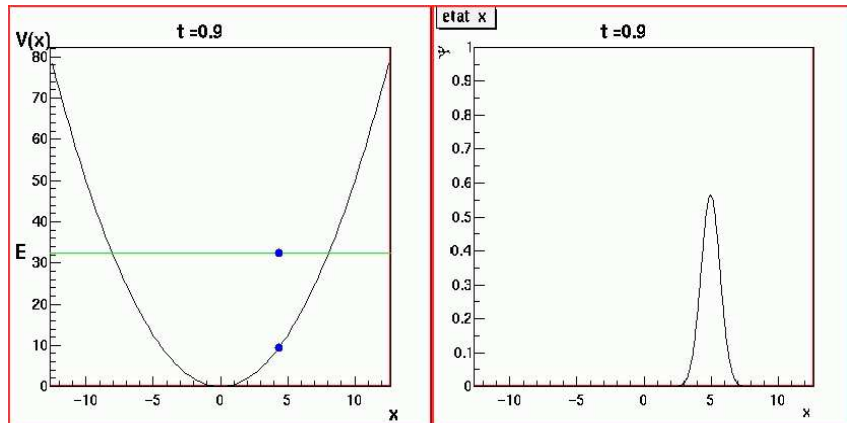


FIG. 1.6 –

### Observations

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

**Dynamique classique dans l'espace de phase  $x(t), p(t)$**  Voir figure (1.7).

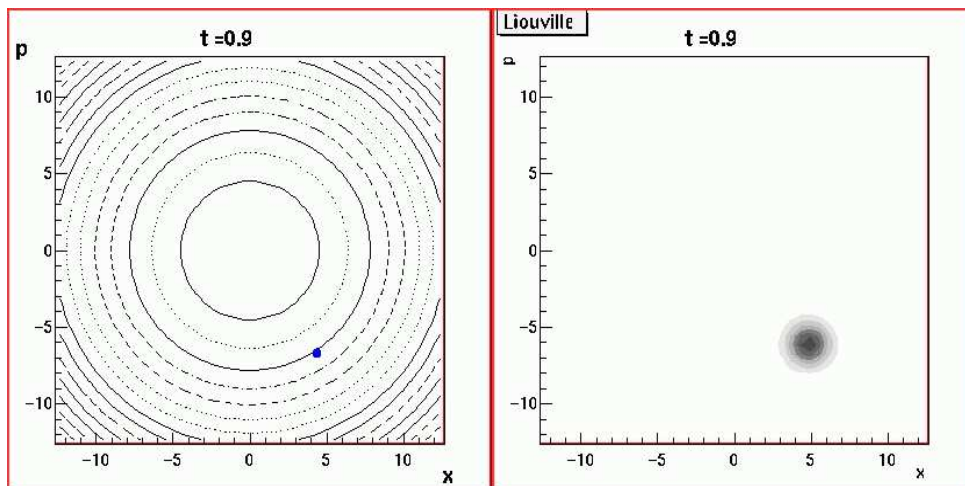


FIG. 1.7 –

### Commentaires

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

### Observations

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

**Dynamique quantique dans l'espace de phase  $\mathbf{x}(t)$ ,  $\mathbf{p}(t)$**  Voir figure (1.8).

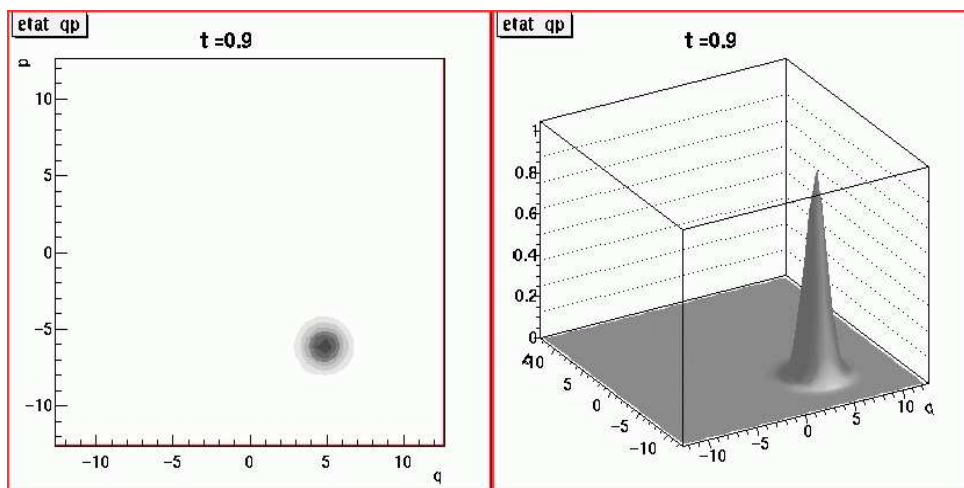


FIG. 1.8 –

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

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

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

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

Voir figure 1.9.

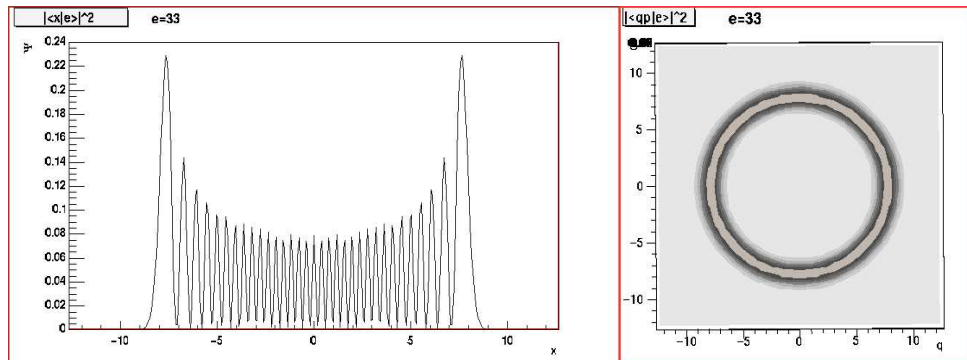


FIG. 1.9 –

### Observations

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

#### 1.3.2.4 L'oscillateur Anharmonique

**Potentiel :**

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

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

**Dynamique dans l'espace de configuration  $x(t)$**  Voir figure (1.10).

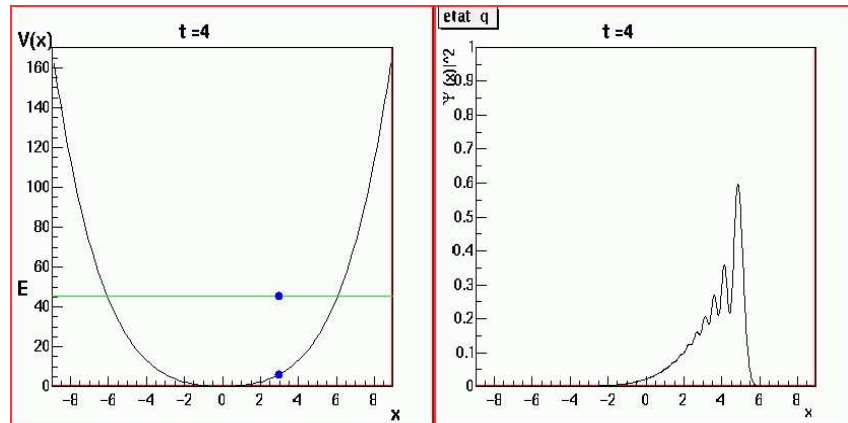


FIG. 1.10 –

### Commentaires

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

### Observations

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

**Dynamique classique dans l'espace de phase  $\mathbf{x}(t)$ ,  $\mathbf{p}(t)$**  Voir figure (1.11).

### Commentaires

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

### Observations

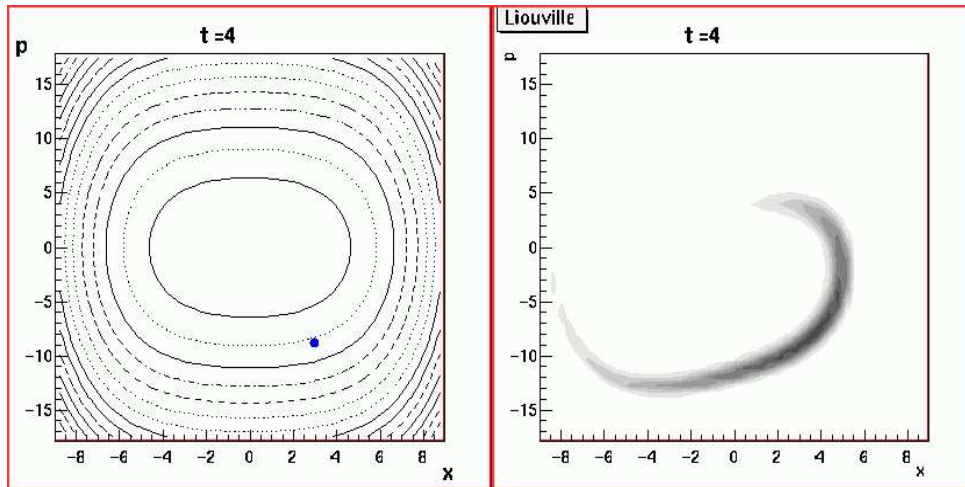


FIG. 1.11 –

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

**Dynamique quantique dans l'espace de phase  $x(t)$ ,  $p(t)$**  Voir figure (1.12).

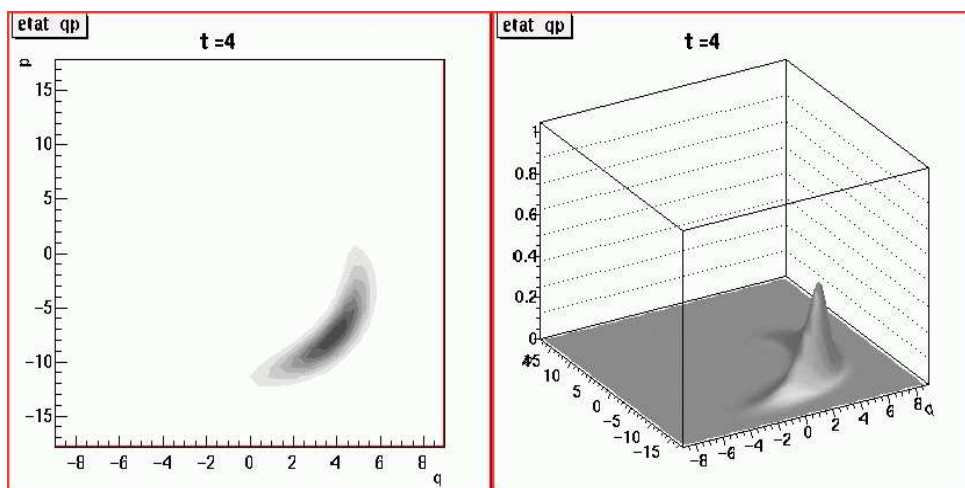


FIG. 1.12 –

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

### Observations

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

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

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

Voir figure 1.13.

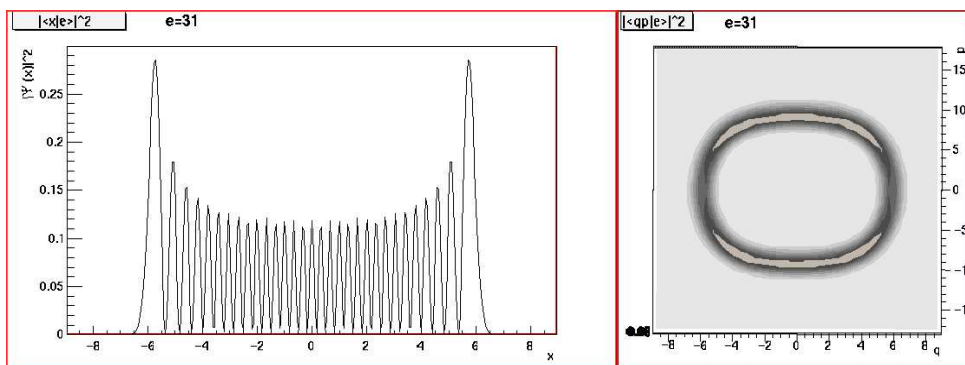


FIG. 1.13 –

### Observations

1. L'onde stationnaire est répartie sur toute la région classique permise d'énergie  $E$ .

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

### 1.3.2.5 Le double puits de potentiel

Potentiel :

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

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

**Dynamique dans l'espace de configuration  $x(t)$**  Voir figure (1.14).

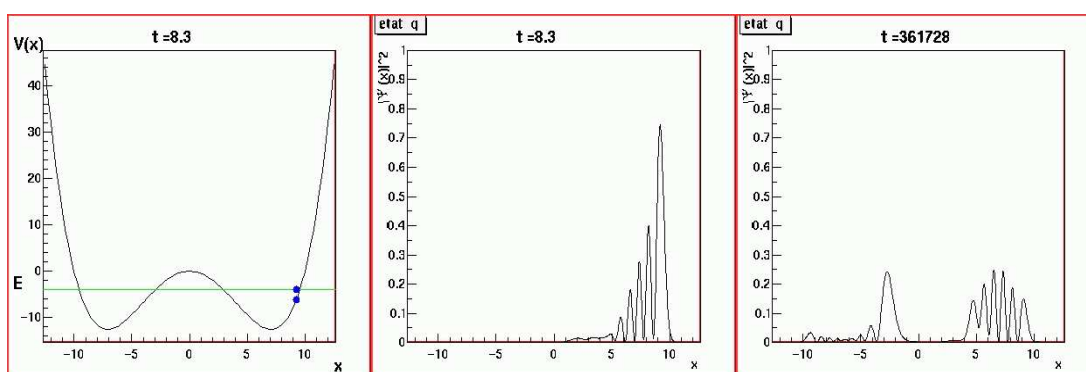


FIG. 1.14 –

#### Commentaires

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

#### Observations

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

**Dynamique classique dans l'espace de phase  $x(t)$ ,  $p(t)$**  Voir figure (1.15).

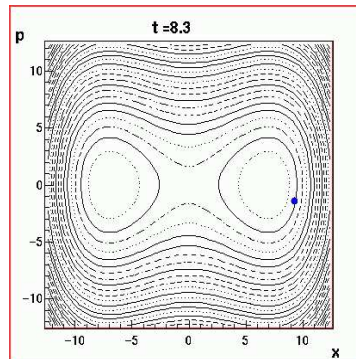


FIG. 1.15 –

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

**Dynamique quantique dans l'espace de phase  $x(t)$ ,  $p(t)$**  Voir figure (1.16).

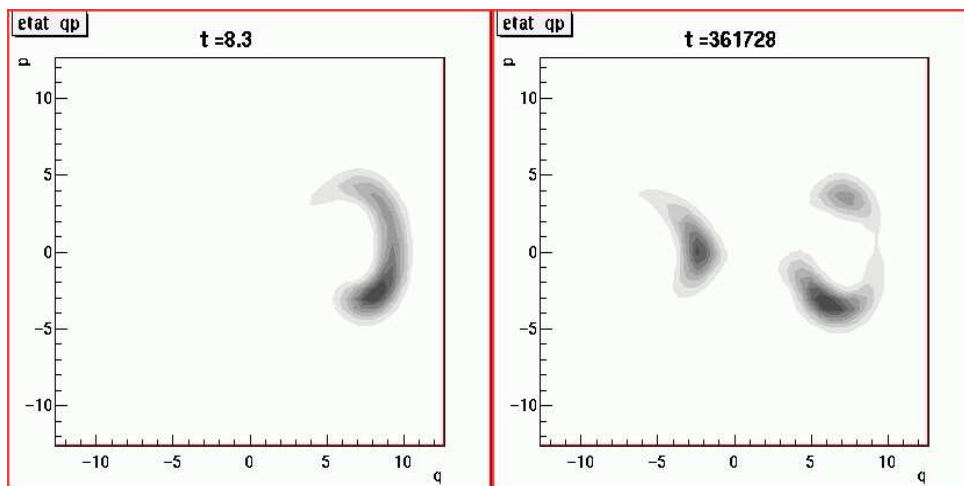


FIG. 1.16 –

### Commentaires

- Il s'agit de la représentation de Husimi (voir cours) de l'état quantique  $|\psi(t)\rangle$ . L'intensité de cette distribution  $Hus(x,p,t)$  est représentée en niveaux de gris. La première figure montre une évolution régulière en temps,  $t=0$  à 10. La deuxième figure montre une évolution en temps,  $t=0$  à  $10^7$  sur une échelle logarithmique.

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

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

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

Voir figure 1.17.

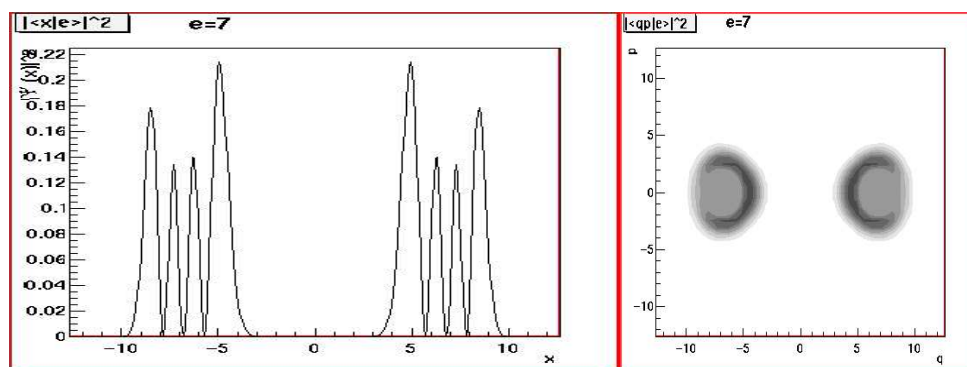


FIG. 1.17 –

### Observations

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

## 1.4 Bases, et changement de bases

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

### 1.4.1 Base orthonormée

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

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

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

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1,2,\dots} \phi_i |V_i\rangle, \quad (1.12)$$

$$\text{avec } \phi_i \in \mathbb{C} : \text{composantes} \quad (1.13)$$

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

**Remarques et propriétés :**

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

$$\phi_i = \langle V_i | \phi \rangle \quad (1.14)$$

en effet :  $\langle V_i | \phi \rangle = \sum_j \phi_j \langle V_i | V_j \rangle = \sum_j \phi_j \delta_{i,j} = \phi_i$ . Voir figure 1.18.

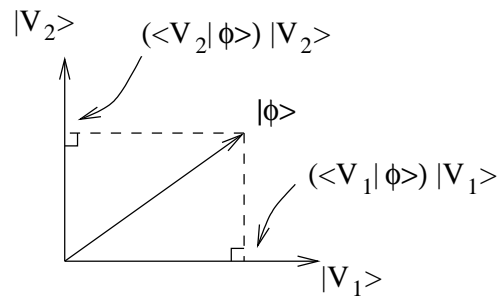


FIG. 1.18 – Schéma de la décomposition du vecteur  $|\psi\rangle$  dans la base  $|V_1\rangle, |V_2\rangle$ .

- On a alors

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

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

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

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

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

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

- (\*) Pour des calculs avec un ordinateur, on représente le vecteur  $|\phi\rangle$  par un tableau (vecteur colonne), que l'on tronque en ne gardant qu'un nombre fini  $N$  (mais très grand) de composantes. La propriété  $\phi_i \rightarrow 0$ , pour  $i \rightarrow \infty$  mentionnée plus haut garanti que la précision peut être suffisante si  $N$  est assez grand.
- (\*) Il y a un théorème sur l'existence de b.o.n. dans un espace de Hilbert, voir [RS78] page 44.

### 1.4.1.1 Exemple d'une particule sur un cercle

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

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

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

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

**Propriété** Les fonctions

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right), \quad k \in \mathbb{Z} \quad (1.15)$$

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

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

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

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

**Exercice 5** Donner une autre b.o.n. possible pour  $\mathcal{H} = L^2(S^1)$  ?

### 1.4.2 Relation de fermeture

D'après eq.(1.12) et eq.(1.14) ci-dessus, on a :

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

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

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

ainsi la somme

$$\sum_i |V_i\rangle\langle V_i| = \hat{I} \quad (1.16)$$

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

### Remarques (\*)

La notation  $Id = \sum_i |V_i\rangle\langle V_i|$  peut se comprendre de façon précise avec la notion de vecteur dual  $\langle V_i|$ . En effet un terme de la somme  $\hat{P}_i = |V_i\rangle\langle V_i|$  correspond à un opérateur qui transforme le vecteur  $|\phi\rangle$  en  $\hat{P}_i|\phi\rangle = |V_i\rangle\langle V_i|\phi\rangle = (\langle V_i|\phi\rangle)|V_i\rangle$  c'est à dire en sa projection orthogonale sur le vecteur de base  $|V_i\rangle$ , voir figure 1.18. On la relation

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

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

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

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

### 1.4.3 Expression d'un opérateur dans une base

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

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

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

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

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

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

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

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

### 1.4.4 Changement de base (\*)

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

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

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

**Exercice 6** 1. montrer que la matrice dans une b.o.n. de l'opérateur adjoint  $\hat{O}^+$  est la transposé-conjuguée de la matrice de l'opérateur  $\hat{O}$ . (On note  $O^+ = \bar{O}^t$ )

2. Montrer que la matrice dans une b.o.n. d'un opérateur unitaire est une matrice unitaire.

3. Montrer inversement qu'un opérateur unitaire  $\hat{Q}$  correspond à un changement de base o.n., par  $|W_i\rangle = \hat{Q}|V_i\rangle, i = 1, 2, \dots$

## 1.5 Spectre d'opérateurs

### 1.5.1 Définition et propriétés générales

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

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

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

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

**Exercice** Trouver le spectre (valeur propres et vecteurs propres) des matrices  $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  et  $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ . Dessiner les axes propres dans le plan  $\mathbb{R}^2$ , et interpréter la particularité des solutions obtenues (angles entre les axes propres, et produit des valeurs propres).

**Propriétés :**

1. Si  $\hat{T}$  est un opérateur autoadjoint, (i.e.  $\hat{T}^+ = \hat{T}$ ), alors la valeur propre  $\lambda$  est réelle. ( $\lambda \in \mathbb{R}$ ).

preuve :

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

donc  $\lambda = \bar{\lambda}$ . ■

2. Si  $\hat{T}$  est un opérateur autoadjoint et si  $\hat{T}|\phi_1\rangle = \lambda_1|\phi_1\rangle$ , et  $\hat{T}|\phi_2\rangle = \lambda_2|\phi_2\rangle$ , avec  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  alors  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$ ,  
c.a.d. que : **les vecteurs propres de deux valeurs propres différentes sont orthogonaux.**

preuve : on a  $\langle \phi_2 | \hat{T}|\phi_1\rangle = \lambda_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = \lambda_2 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle$ , donc  $(\lambda_1 - \lambda_2) \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$ , donc  $\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$ . ■

**Remarques**

- si  $|\phi\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{T}$  de valeur propre  $\lambda$  alors  $|\phi'\rangle = \mu|\phi\rangle$ , (avec  $\mu \in \mathbb{C}$  quelconque) est aussi vecteur propre avec la même valeur propre (car  $\hat{T}|\phi'\rangle = \hat{T}(\mu|\phi\rangle) = \mu\hat{T}|\phi\rangle = \mu\lambda|\phi\rangle = \lambda|\phi'\rangle$ ).  
En particulier on peut toujours choisir un vecteur propre  $|\phi'\rangle$  normalisé (c.a.d. de norme un :  $\langle \phi' | \phi' \rangle = 1$ ). Il suffit de prendre :  $|\phi'\rangle = (\langle \phi | \phi \rangle)^{-1/2} |\phi\rangle$ .
- Un opérateur peut avoir beaucoup de vecteurs propres et valeurs propres différentes ; mais ce ne sont que des vecteurs très particuliers, car la somme de deux vecteurs propres n'est pas un vecteur propre :  $\hat{T}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = \lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle$ , sauf si  $\lambda_1 = \lambda_2$ .
- (\*) Supposons que les vecteurs propres et valeurs propres  $(|\phi_i\rangle, \lambda_i)_{i=1,2,\dots}$  d'un opérateur  $\hat{T}$  forment une base o.n. de l'espace  $\mathcal{H}$ . Alors dans cette base,  $\hat{T}$  est représenté par une matrice qui est diagonale (avec  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  sur la diagonale).

La propriété précédente suggère que les différents vecteurs propres d'un opérateur autoadjoint puissent former une base o.n. de l'espace de Hilbert. Les vecteurs de base seraient indicés par les valeurs propres associées. Cela n'est pas tout à fait vrai (la situation est un peu plus compliquée) comme le montre les exemples suivant.

Étudions maintenant le spectre des opérateurs  $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ .

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

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

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

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

Pour une valeur de  $x \in \mathbb{R}$  donnée, et  $\varepsilon \in \mathbb{R}$  donné petit, considérons la fonction notée  $|x_\varepsilon \rangle$  (ou  $x_\varepsilon(x')$ ) définie par  $x_\varepsilon(x') = 1/\varepsilon$  si  $x' \in [x, x + \varepsilon]$ , et  $x_\varepsilon(x') = 0$  sinon. Voir figure (1.19).

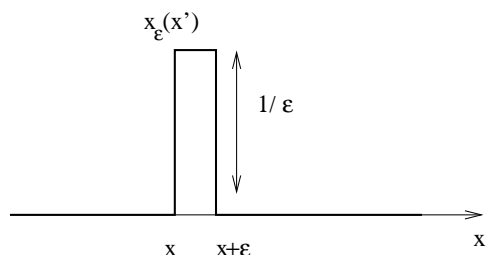


FIG. 1.19 – Fonction  $x_\varepsilon(x')$  aussi notée  $|x_\varepsilon \rangle$ , convergeant vers la distribution de Dirac  $|x \rangle \rightarrow |x \rangle$  pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

On a alors

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

On note :

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

et on a donc la relation importante :

$$\boxed{\langle x | \phi \rangle = \phi(x)} \quad (1.17)$$

Et par définition de l'opérateur  $\hat{x}$ , voir eq.(1.8), on a :  $(\hat{x}\phi)(x) = x\phi(x)$  que l'on peut écrire :

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

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

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

La dernière équation montre ce que l'on recherchait :

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

En conclusion, le spectre de l'opérateur  $\hat{x}$  est constitué par les valeurs propres  $x \in \mathbb{R}$ , et les états  $|x \rangle$  associés. On dit que  $\hat{x}$  a un **spectre continu**. (car toutes les valeurs de  $x$  sont permises, formant un ensemble continu). Il n'y a pas de contradiction avec la remarque faite plus haut, car l'on va voir tout de suite, que  $|x \rangle \notin \mathcal{H}$ .

**Remarques**

- Du point de vue physique, si une particule est dans l'état  $|x \rangle$ , cela signifie que l'onde de la particule est “très localisée” au point  $x$ . Précisément, l'onde a une certaine largeur  $\varepsilon$  (comme la fonction  $|x_\varepsilon \rangle$ ) mais que l'on considère comme très petite (négligeable); et bien sûr on espère que la valeur précise de la largeur  $\varepsilon$ , ainsi que la forme précise de l'onde à petite échelle n'importe pas. Au lieu de la fonction  $x_\varepsilon$  définie plus haut, on aurait pu prendre n'importe quelle forme se concentrant pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ , et vérifiant eq.(42), voir TD.
- D'un point de vue mathématique, pour  $\varepsilon \rightarrow 0$ , la valeur des fonctions  $x_\varepsilon(x)$  diverge, donc la limite  $|x \rangle$  n'est pas une fonction, c'est à dire  $|x \rangle \notin \mathcal{H}$ . En physique, on appelle néanmoins cette limite la “**fonction de Dirac**” (introduite par Dirac pour les besoins de la mécanique quantique et avant lui par Heaviside à la fin du XIX ème siècle). Elle est aussi notée  $\delta(x' - x)$  (abusivement puisque ce n'est pas une fonction), et la relation fondamentale (1.17) s'écrit :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}} \delta(x' - x) \phi(x') dx' = \phi(x)} \quad (1.18)$$

- C'est le mathématicien Laurent Schwartz en 1950 [Sch66] qui a donné un sens rigoureux à cette notion, en observant que la relation eq.(1.17), montre que  $\langle x|$  est une forme linéaire qui à la fonction  $|\phi \rangle$  associe le nombre  $\phi(x)$ . Il est donc correct de dire que  $\langle x|$  est un vecteur dual, appartenant à l'espace dual  $\mathcal{H}^*$  mentionné page 21 (Habituellement noté  $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ ). Dans cette théorie mathématique,  $\langle x|$  est appelée la **distribution de Dirac** en  $x$ . (Le point de vue physique et mathématique sont donc assez semblables, ce qui est “raisonnable”).
- Le fait que  $\hat{x}$  a un spectre continu est étroitement relié au fait que les vecteurs propres associés ne sont pas des vecteurs de  $\mathcal{H}$ . En effet d'après la propriété page 41, on s'attend à ce que des vecteurs propres dans  $\mathcal{H}$  aient des valeurs propres associées discrètes.

**1.5.2.1 Relation de fermeture en position**

On a :

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

donc

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

qui est la relation de fermeture dans la base position.

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

Ainsi la relation eq.(1.17) s'interprète par analogie avec eq.(1.14) en disant que :

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

De même on a d'une part  $\langle x|\phi\rangle = \int \langle x|x'\rangle \langle x'|\phi\rangle dx'$  et eq.(1.18) :  $\phi(x) = \int \delta(x' - x)\phi(x')dx'$ . Donc par identification :

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

**Exercice 7** montrer que l'on peut écrire :

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

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

On cherche une fonction  $\phi_p(x)$  vecteur propre de l'opérateur  $\hat{p}$ , et de valeur propre associée  $p \in \mathbb{R}$ . C'est à dire tels que :  $\hat{p}|\phi_p\rangle = p|\phi_p\rangle$  avec  $\phi_p(x) = \langle x|\phi_p\rangle$ . D'après (1.9), cela donne  $-i\hbar d\phi(x)/dx = p\phi(x)$ , soit  $\phi(x) = C \cdot \exp(ipx/\hbar)$ . La constante  $C$  est arbitraire (cf remarque ci-dessus). On choisit  $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$  de façon à pouvoir écrire simplement la relation de fermeture ci-dessous, eq.(1.19).

Le spectre de  $\hat{p}$  est donc constitué par les valeurs propres  $p \in \mathbb{R}$  avec vecteur propre associé noté  $|p\rangle$  donné par la fonction appelée **onde plane** (on utilise dorénavant la relation (1.17)) :

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

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

#### 1.5.3.1 Transformée de Fourier, et relation de fermeture en impulsion

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

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

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

La relation de Fourier inverse :

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

s'écrit en notation de Dirac :

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

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

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p \rangle \langle p| dp \quad (1.19)$$

**Remarques :**

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

### 1.5.3.2 Applications de la relation de fermeture

d'une part

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

d'autre part :

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

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

On a

$$\langle p|\hat{p}|\phi \rangle = p \langle p|\phi \rangle$$

donc :

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

ainsi l'opérateur  $\hat{p}$  agit comme une dérivation dans la base de position (voir définition (1.9)), et comme une multiplication dans la base d'impulsion.

**Exercice 8** Calculer et représenter la fonction d'onde du paquet d'onde Gaussien en représentation impulsion :  $\tilde{\psi}_{x_0,p_0,\sigma}(p) = \langle p|x_0, p_0, \sigma \rangle$ .

**Exercice :** montrer que l'on peut écrire

$$\hat{p} = \int p |p\rangle \langle p| dp$$

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

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

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

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

$$\hat{H}|\phi_E\rangle = E|\phi_E\rangle \quad (1.20)$$

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

Sauf dans des cas particuliers (dus à des symétries), il est impossible de trouver analytiquement l'expression des fonctions propres  $\phi_E(x)$ . On doit utiliser des méthodes d'approximation décrites dans le chapitre 6.

Ces cas particuliers à une dimension sont par exemple :

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

#### 1.5.4.1 Interprétation physique : onde stationnaire

Alors au cours du temps, l'onde  $|\phi(t)\rangle$  évolue comme :

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

dont la solution est explicitement :

$$|\phi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)|\phi(0)\rangle \quad (1.21)$$

c'est à dire

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

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

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

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

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

#### Remarques

- Le spectre est continu. Cela est relié au fait que à toute énergie permise, la particule peut partir à l'infini. Voir plus loin un critère plus précis, figure 1.20.
- Pour une valeur donnée de  $E$ , il y a deux fonctions propres différentes associées :  $|p\rangle, |-p\rangle$ , avec  $p = \sqrt{2mE}$ . On dit que la valeur propre  $E$  est **dégénérée**, avec une **multiplicité** deux.
- (\*) La relation de fermeture dans la base d'énergie est  $I = \int_{\mathbb{R}} dp |p\rangle\langle p|$ .
- Physiquement  $|p\rangle$  correspond à une onde d'énergie  $E$  se déplaçant vers la droite, et  $|-p\rangle$  vers la gauche.

### 1.5.4.3 Exemple d'une particule libre sur un cercle

L'espace des fonctions périodiques est  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ . Pour une particule libre  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ . Pour une fonction de base  $V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik\frac{2\pi x}{L}\right)$ , voir eq.(1.15), on a :

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

donc les valeurs propres de l'impulsion sont discrètes

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

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

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

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

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

### 1.5.4.4 Remarques

**Spectre discret ou continu ?** En général ( $V(x)$  quelconque) le spectre de  $\hat{H}$  peut avoir une partie discrète (i.e des valeurs propres associée à des fonctions d'ondes normalisées) et une partie continue. C'est le cas dans l'exemple important d'un puits de potentiel, voir figure 1.20. Cela sera justifié plus loin.

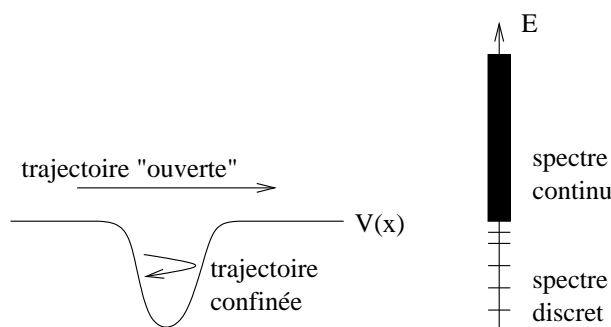


FIG. 1.20 – Schéma d'un Spectre discret et continu en relation avec la nature des trajectoires classiques confinée ou ouvertes (partant à l'infini).

Il y a des exemples moins intuitifs, par exemple celui d'un potentiel  $V(x)$  "aléatoire", mais borné ( $0 < V(x) < V$ ), décrivant un électron dans un conducteur contenant des impuretés par exemple. On montre alors que le spectre est discret pour toute valeur d'énergie

(même au dessus du potentiel  $E > V$ ) et que toutes les fonctions d'ondes d'énergie sont localisées (norme finie), alors qu'une particule classique d'énergie  $E > V$  peut s'échapper à l'infini. C'est le phénomène de **localisation forte de Anderson**.

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

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

Dans cette notation un peu vague, il faut comprendre que l'indice  $i$  peut être continu si le spectre est continu (alors  $\sum$  est une intégrale), et que deux indices  $i$  différents peuvent correspondre à une même énergie  $E = E_i = E_{i'}$  si il y a dégénérescence.

On a de même

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

**Exercice :** Utilisation pour l'évolution d'un état quelconque (TD) : Exprimer  $|\phi(t)\rangle$  à partir de  $\langle\phi_E|\phi(0)\rangle$ . Cas d'une particule libre.

### 1.5.5 Représentation d'Heisenberg (\*)

vu comme changement de base avec opérateur unitaire  $\hat{U}(t)$ . Voir Cohen [CBF] p.311.  
@@

## 1.6 Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure

### 1.6.1 Opération idéale de mesure d'un système quantique

#### 1.6.1.1 Limite de validité de l'équation de Schrödinger

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

Cela n'est pas toujours vrai :

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

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

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

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

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

La particule est issue d’une source et passe par un dispositif de double fentes de Young (qui a pour but de créer des interférences de l’onde quantique). L’onde quantique arrive ensuite sur une rangée de détecteurs. Voir la figure 1.21. Une telle expérience a été réalisée, par exemple avec des atomes (néon), des électrons, et même des molécules  $C_{60}$ .

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

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

$x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$ , et l'on s'apercevra que l'histogramme des valeurs de  $x_i$  coïncide avec le module carré de la fonction d'onde  $|\psi(x)|^2$  à l'approche des détecteurs. Cela signifie précisément, que la courbe **Nombre de réponses du détecteur(x) (renormalisée) converge vers  $|\psi(x)|^2$  pour  $N \rightarrow \infty$** . Ainsi, après l'envoi de  $N$  atomes, les détecteurs touchés seront répartis comme sur la figure (1.22).

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

### 1.6.1.3 Postulat de la mesure

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

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

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

On note le spectre de  $\hat{A}$  par  $\hat{A}|\psi_a\rangle = A_a|\psi_a\rangle$  où  $a$  est un indice discret ou continu et  $(A_a)_a$  sont les différents résultats possibles de la grandeur mesurée.

Dans la base propre de  $\hat{A}$ , le vecteur  $|\phi\rangle$  se décompose :

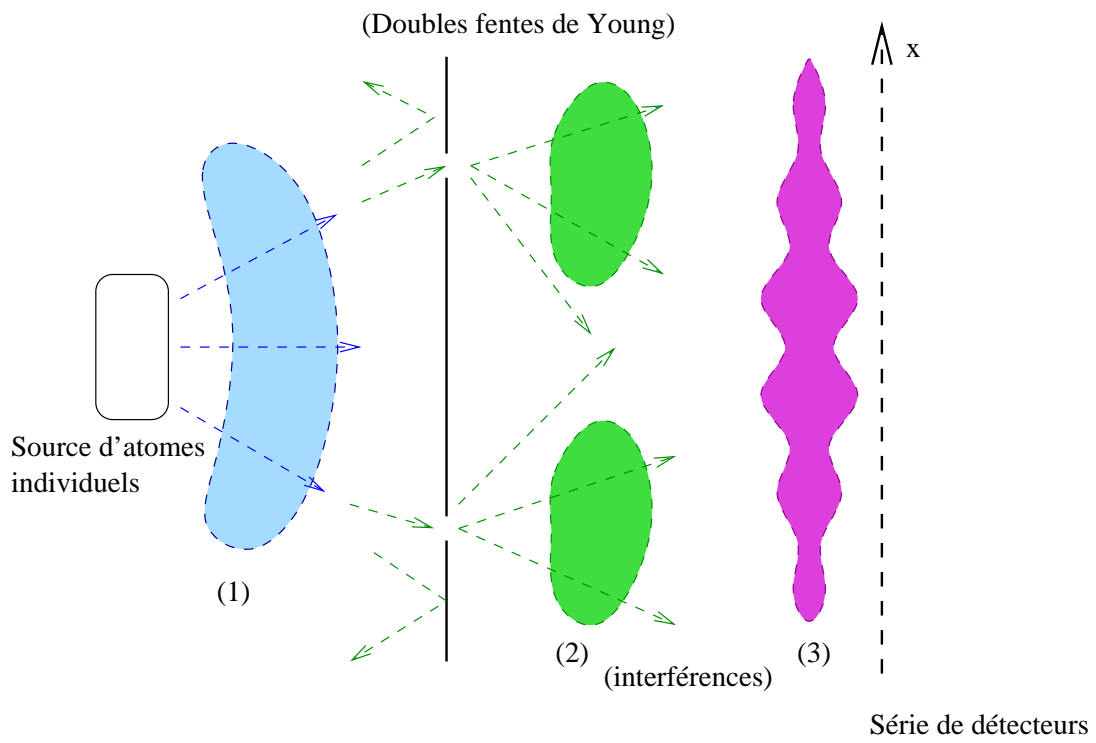
$$|\phi\rangle = \sum_a \phi_a |\psi_a\rangle, \quad \text{avec } \phi_a = \langle \psi_a | \phi \rangle$$

Alors juste après la mesure, c'est le "hasard" qui détermine quelle grandeur  $A_a$  l'expérimentateur observe. Cependant il observe la grandeur  $A_a$  avec la probabilité

$$P_a = \frac{|\langle \psi_a | \phi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (1.22)$$

et dans ce cas, la particule se trouve dans l'état  $|\psi_a\rangle$  juste après la mesure.

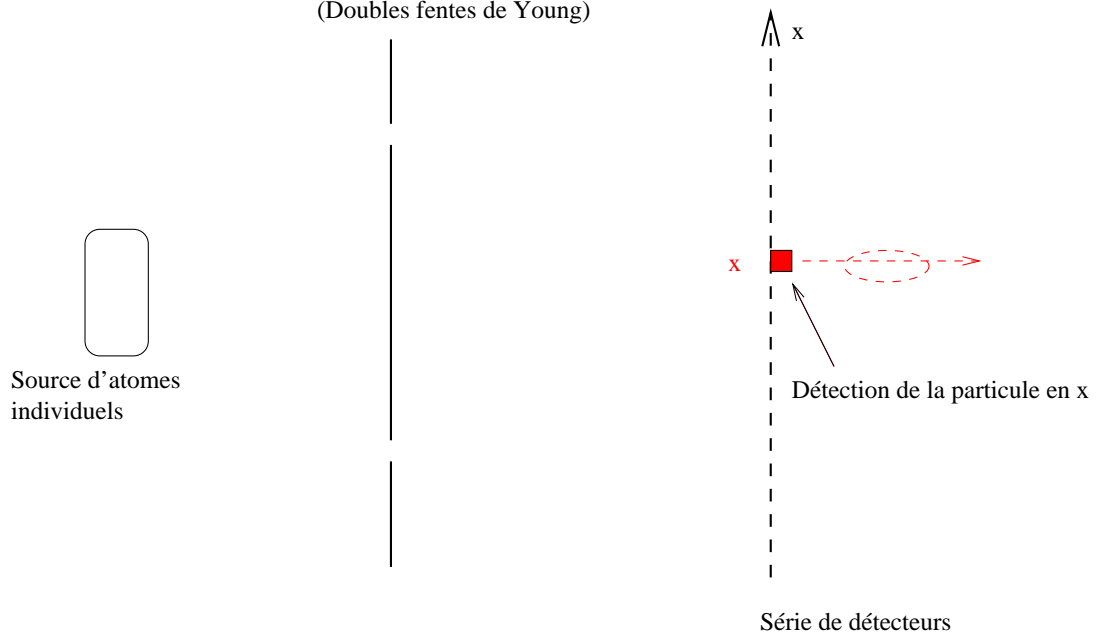
Si l'indice  $a$  est continu alors  $P(A) = P_a$  est une **densité de probabilité**, c'est à dire que  $P(A)dA$  est la probabilité de détecter  $A'$  avec  $A' \in [A, A + dA]$ .



(A) Avant la détection:

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

(Doubles fentes de Young)



(B) après la détection:

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

La particule est ensuite localisée en x.

FIG. 1.21 – Mesure de la position d'un atome (A) et (B)

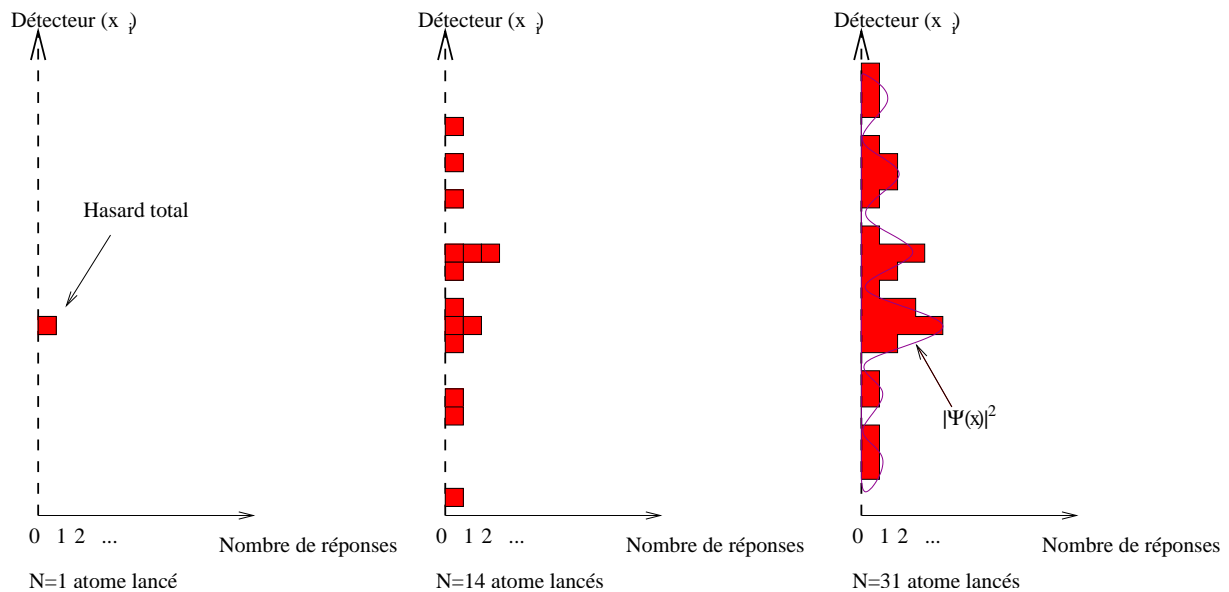


FIG. 1.22 – (C) Réponses des détecteurs après l'envoi de  $N$  atomes. La seule prédiction de la mécanique quantique est pour  $N \rightarrow \infty$  : l'histogramme converge vers  $|\psi(x)|^2$ .

### Remarques

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

$$\sum_a P_a = 1$$

ce qui est nécessaire pour parler de probabilité. De plus la valeur des probabilités est la même pour deux vecteurs proportionnels :  $|\phi\rangle$  et  $|\phi'\rangle = \lambda|\phi\rangle$ , avec  $\lambda \in \mathbb{C}$ . (Vérifier que  $P'_a = P_a$ ). Par conséquent on dit que  $|\phi\rangle$  et  $|\phi'\rangle = \lambda|\phi\rangle$  correspondent au même **état physique**, puisqu'ils ont les mêmes propriétés observables. Si l'état  $|\phi\rangle$  est normalisé, alors  $\langle \phi | \phi \rangle = 1$  et l'expression (1.22) est légèrement simplifiée, mais ce n'est pas du tout nécessaire.

- En résumé, tant que le système est isolé, la mécanique quantique est déterministe : elle est capable de prévoir l'évolution de la fonction d'onde grâce à l'équation de Schrödinger. Mais lorsque qu'une mesure se produit, elle n'est plus capable de prévoir exactement ce qu'il va se produire. Elle permet seulement de connaître les probabilités des différentes possibilités (ce qui est déjà très fort, puisque à partir de ces probabilités et avec la théorie de la physique statistique, on obtient les lois de la thermodynamique et de la mécanique classique). Il y a donc une part de hasard inhérent à la théorie quantique, lors de la mesure.
- Ce processus de mesure ne nécessite pas la présence d'un expérimentateur. Il se produit dès que la particule quantique influence son environnement, et peut donc se produire aussi bien dans une pièce vide, que sur une île déserte, que sur mars ou ailleurs. Ce phénomène est en fait incessant et omniprésent, c'est le contraire qui est plutôt exceptionnel : un système peut être considéré comme étant approximativement isolé que pendant un certain intervalle de temps appelé le **temps de décohérence**  $\tau_{decoh}$ . Il est intéressant d'appliquer l'équation de Schrödinger à ce système, seulement si son état quantique a le temps de changer de façon significative pendant cet intervalle. Voir le site Web <http://www.decoherence.de/>. Ou le cours en PDF de C. Cohen-T : [Cla88].

**Exemple de valeurs de  $\tau_{decoh}$  ([DEC+96], p.57) :**

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

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

- Dans la description vectorielle de la mécanique quantique que nous avons adoptée jusqu'à présent, nous avons montré que toutes les bases ortho-normées de  $\mathcal{H}$  sont "équivalentes" dans le sens où elles permettent de représenter les mêmes états quantiques et la même équation d'évolution. Ce ne sont que des représentations différentes. Par contre le mécanisme de la mesure qui résulte de l'interaction du système quantique avec son environnement privilégie une certaine base, qui est la **base de position** en général, ou la **base d'énergie** dans les expériences de spectroscopie.

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

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

$[x, x + dx]$ . la fonction  $P(x)$  s'appelle **densité de probabilité**.

La base de l'observable est la base de position  $|x\rangle$ , et d'après (1.22), on a :

$$P(x) = \frac{|\langle x|\phi\rangle|^2}{\langle \phi|\phi\rangle} = \frac{1}{\langle \phi|\phi\rangle} |\phi(x)|^2 \quad (1.23)$$

Dans le cas d'un paquet d'onde normalisé  $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$  eq.(1.6), cela donne

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

qui est une Gaussienne représentée sur la figure 1.3.

Si après une mesure, l'observateur détecte la particule dans l'intervalle  $[x, x + dx]$ , alors la particule se trouve dans l'état  $|x\rangle$  (plus précisément  $|x_\varepsilon\rangle$  avec  $\varepsilon = dx$ , voir fig. 1.19). L'onde de la particule subit un brusque changement  $|\phi\rangle \rightarrow |x\rangle$ , et se concentre spatialement; on dit qu'il y a **réduction du paquet d'onde**.

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

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

Dans le cas du paquet d'onde normalisé eq.(1.6), cela donne

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

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

## 1.6.2 Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique

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

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

Cependant d'un point de vue théorique ou plus conceptuel, une lacune demeure : si la théorie quantique décrit tous les phénomènes physiques, elle devrait aussi décrire les phénomènes macroscopiques, les appareils de mesure, et donc l'interaction entre une particule quantique et un appareil de mesure. Autrement dit, le postulat de la mesure ne devrait pas être un, il devrait pouvoir s'expliquer dans le cadre de la théorie quantique appliquée plus largement à la particule et à son environnement.

### 1.6.2.2 Où est la Limite classique-quantique ?

(lire l'article Zureck [Zur91])

Disons tout de suite, que cela n'est pas fait, aucune expérience ne permet de montrer que la théorie quantique (comme le principe de superposition d'états) s'applique à des objets macroscopiques. Tout au plus des expériences récentes montrent des phénomènes d'interférences avec des systèmes contenant quelques dizaines de particules, donc encore microscopique (expériences d'Aroche et al. entre photons et atomes)<sup>6</sup>. La raison de cette limite n'est pas que le principe de superposition cesse de s'appliquer au-delà de quelques particules, cela on ne le sait pas. La difficulté vient du fait que pour tester le principe de superposition, il faut faire des expériences de type interférences, et pour cela isoler suffisamment le système quantique de son environnement ; c'est cet isolement qui est quasiment impossible à obtenir en pratique ; c'est le phénomène de décohérence quantique.

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

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

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

Essayons cependant d'appliquer naturellement les idées de la mécanique quantique au delà de son domaine de validité prouvé, c'est à dire d'appliquer le principe de superposition aux objets macroscopiques comme les détecteurs, et tout l'environnement. Voici ce que cela donnerait dans l'exemple de la mesure de position d'une particule, figure (1.21) ci-dessus.

Il y a des détecteurs à chaque position (discrète)  $x$ . L'état du détecteur situé en  $x$  éteint est noté :  $|D_x\rangle$ . Par contre si le détecteur interagit avec la particule, il "s'allume" et passe

---

<sup>6</sup>Une remarque est nécessaire ici : les phénomènes physiques comme la super-fluidité, la supraconductivité ou la condensation de Bose-Einstein font intervenir au moins des milliers de particules et se décrivent par un état collectif. La théorie quantique permet de bien décrire cet état collectif, en terme "d'état cohérent". Pour cela on dit souvent que la matière est dans un état quantique macroscopique. Notons cependant, que l'on n'observe pas la matière dans une superposition cohérente de tels états (ou alors dans une superposition de deux ou trois de ces états, voir expériences sur les jonctions Josephsons quantiques). En fait d'un point de vue théorique, ces états collectifs de la matière pour les atomes, sont des "états classiques" semblables à l'état du champ classique électromagnétique pour les photons.

dans l'état quantique noté  $|D_x^*\rangle$ . Autrement dit, l'interaction de l'onde quantique de la particule avec les détecteurs, est définie par la règle d'évolution suivante. (En notant  $|x\rangle$  un état de la particule à la position  $x$ )

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|D\rangle &= \sum_x \psi(x) |x\rangle (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_{x_N}\rangle) \\ &\xrightarrow{\text{Evolution}} \sum_x \psi(x) |x\rangle (|D_{x_1}\rangle|D_{x_2}\rangle \dots |D_x^*\rangle \dots |D_{x_N}\rangle) \end{aligned}$$

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

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

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

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

Notons cependant que cette description des choses ne donne aucune explication quand à l'origine des probabilités : d'où provient la loi (1.22) ? Il ne s'agit donc pas d'une interprétation complète de la mécanique quantique.

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

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

### 1.6.3 Valeurs moyenne et variance de l'observable

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

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

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

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

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

où  $a$  est un indice discret ou continu. Dans la base propre de  $\hat{A}$ , le vecteur  $|\phi\rangle$  se décompose :

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

et l'on pose comme ci-dessus :

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

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

La liste des valeurs possibles  $A_a$  avec leur probabilité respective  $P_a$  pour différents  $a$  constitue un histogramme, et il est conventionnel de définir des grandeurs caractéristiques pour un tel histogramme (voir figure 1.23) :

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

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

Graphiquement, la valeur moyenne caractérise le barycentre de l'histogramme. La **variance** de l'histogramme  $(A_a, P_a)_a$  est :

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (1.24)$$

$$= \sum_a P_a (A_a - \langle A \rangle)^2 \quad (1.25)$$

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

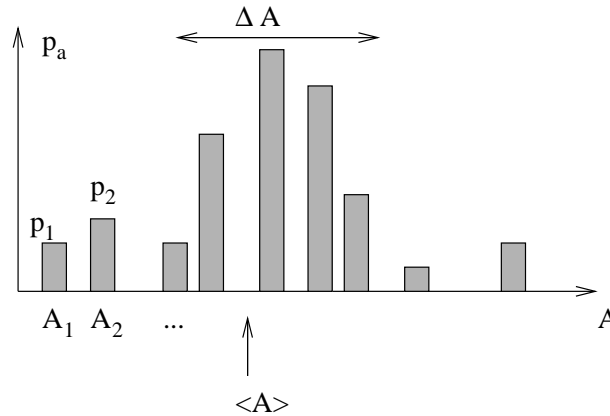


FIG. 1.23 – Histogramme de valeurs  $A_1, A_2, \dots$  avec les poids respectifs  $P_1, P_2, \dots$ . Valeur moyenne  $\langle A \rangle$  et écart type  $\Delta A$  de l'histogramme.

**Propriétés** on a :

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

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

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

**preuve :**  $\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle = (\sum_a \langle \psi_a | \bar{\phi}_a \rangle \hat{A} (\sum_{a'} \phi_{a'} | \psi_{a'} \rangle) / \langle \phi | \phi \rangle = (\sum_a A_a \bar{\phi}_a \phi_a) / \langle \phi | \phi \rangle = \sum_a P_a A_a$ .

$$\text{Et } \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

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

**Exercice** Pour le paquet d'onde  $|\phi \rangle = |x_0, p_0, \sigma \rangle$ , et les observables  $\hat{x}$  ou  $\hat{p}$ , montrer que :

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \int x P(x) dx = \int x |\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)|^2 dx = x_0 \\ \langle \hat{p} \rangle &= \int p P(p) dp = \int p |\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p)|^2 dp = p_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma \\ \Delta p &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hbar}{\sigma} \right) \end{aligned}$$

Remarque : on a

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.26)$$

indépendant de  $\sigma$ .

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

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

Ce résultat est schématisé sur la figure 1.24.

**Exercice :** Calculer  $\langle E \rangle$  et  $\Delta E$  pour un paquet d'onde  $|\phi \rangle = |x_0, p_0, \sigma \rangle$  libre ( $\hat{H} = \hat{p}^2 / (2m)$ ).

**Exercice 9** (voir Cohen T. p.240)

1. Montrer que  $\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$ .
2. Dédire la conservation de l'énergie moyenne (et d'une manière plus directe).
3. Dédire le théorème d'Erhenfest pour  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$  :

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

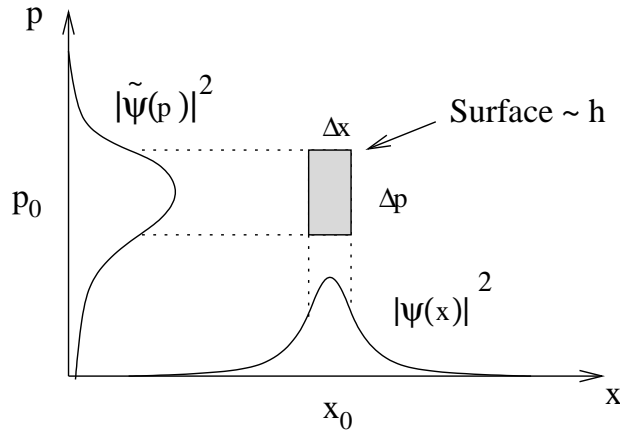


FIG. 1.24 – Distribution de probabilité  $|\psi(x)|^2$  et  $|\tilde{\psi}(p)|^2$  pour le paquet d’onde. La relation  $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$  montre que la paquet d’onde “occupe” une surface  $\simeq h$  dans l’espace de phase. Cela est formulé plus rigoureusement plus loin.

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

### 1.6.4 Relation d’incertitude et relations de commutation

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

**Définition** Le **commutateur** de deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  est l’opérateur :

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

Dans le cas des opérateurs  $\hat{q}$  et  $\hat{p}$ , on a

$$\boxed{[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I}} \tag{1.27}$$

**Exercice 10** Démontrer (1.27).

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

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|, \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.28}$$

**Exercice 11** Démontrer (1.28). (utiliser l'inégalité de Schwartz).

**Remarques :**

- Dans le cas où  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , on verra (page 213) que les deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  ont des vecteurs propres en commun. Si  $|\phi\rangle$  est un tel vecteur, alors  $\Delta A = 0$ ,  $\Delta B = 0$ . Dans ce cas les deux termes de l'inégalité sont nuls.

et (1.28) devient l'**inégalité de Heisenberg** ou **relation d'incertitude** bien connue :

$$\boxed{\Delta q \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar} \quad (1.29)$$

Remarquer que dans le cas du paquet d'onde Gaussien  $|\phi\rangle = |x_0, p_0, \sigma\rangle$ , on a montré eq.(1.26), que cette inégalité est une égalité.

## 1.7 Conseils de Lecture

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

**Pour approfondir :**

- **Pour approfondir les problèmes de décohérence et de mesure quantique :**
  - Cours de C. Cohen Tanoudji du collège de France, (à télécharger sur le web !) :[Cla88]
  - Très bon cours de Joos dans : [DEC<sup>+</sup>96]
- **Pour approfondir les aspects mathématiques,**
  - Mathématiques générales : [YCB82]
  - Livre de mathématiques sur l'analyse fonctionnelle : Reed & Simon [RS78].
  - Pour plus de précisions sur la théorie mathématique des opérateurs linéaires non bornés :[RS78] chapitre VIII.
  - Sur la théorie des distributions : [Sch66], ou [CB73].

## 1.8 Correction des exercices

**Exercice 2 page 20**

$$\langle x_0, p_0, \sigma | x_0, p_0, \sigma \rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \int dx \exp(-(x-x_0)^2/\sigma^2) = \frac{1}{(\pi)^{1/2}} \int dX \exp(-X^2) = 1$$

C'est une intégrale Gaussienne, voir eq.(A.1).

**Exercice 7 page 44** Vérifions la relation  $\langle x|\hat{x}|\phi \rangle = x \langle x|\phi \rangle$ . On a en effet  $\langle x|\int x'|x' \rangle \langle x'|dx'|\phi \rangle = \int x' \delta(x' - x) \langle x'|\phi \rangle = x \langle x|\phi \rangle$ .

Remarque : une telle écriture n'est pas correcte mathématiquement car  $|x\rangle \notin \mathcal{H}$ . L'outil mathématique approprié est le théorème spectrale. L'idée est d'introduire le projecteur  $\hat{P}_x = \int_{-\infty}^x |x\rangle \langle x| dx$  et d'écrire de façon équivalente  $\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x dP_x$ .

**Exercice 8 page 45** on a

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p) &= \langle p|x_0, p_0, \sigma \rangle = \int dx \langle p|x \rangle \langle x|x_0, p_0, \sigma \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \int dx \exp\left(i\frac{(p_0 - p)x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(i\frac{x_0 p_0}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{x_0 p}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right) \end{aligned} \quad (1.30)$$

où l'intégrale Gaussienne se calcule par la formule (A.2). Remarquer la similarité de l'expression obtenue pour  $\tilde{\psi}_{x_0, p_0, \sigma}(p)$  avec celle de  $\psi_{x_0, p_0, \sigma}(x)$ , mis à part facteur de phase constant.

**Exercice9 page 60**

1. Partant de  $\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t)|\hat{A}(t)|\psi(t) \rangle = \langle \psi|\hat{U}(-t)\hat{A}(t)\hat{U}(t)|\psi \rangle$  avec  $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ .  
On dérive en  $t = 0$  :  $\frac{d\langle A \rangle(t)}{dt} = \langle \psi|\frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{A} - \hat{A}\frac{i\hat{H}}{\hbar} + \frac{d\hat{A}}{dt}|\psi \rangle$  donnant le résultat souhaité.
2. Pour  $\hat{A} = \hat{H}$  supposé indépendant du temps, cela donne  $\frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0$  qui montre la conservation de l'énergie moyenne au cours du temps.
3. On a  $d\langle \hat{x} \rangle / dt = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar 2m} \langle [\hat{x}, \hat{p}^2] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$  où la dernière égalité utilise une relation de la page 265. De même  $d\langle \hat{p} \rangle / dt = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V(\hat{x})] \rangle = -\langle \frac{dV}{dx}(\hat{x}) \rangle$ .

**Exercice10 page 61** pour  $|\phi \rangle \in \mathcal{H}$ , on a  $\langle x|[\hat{q}, \hat{p}]|\phi \rangle = \langle x|\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q}|\phi \rangle = x(-i\hbar\frac{d\phi}{dx}) - (-i\hbar\frac{d(x\phi)}{dx}) = i\hbar\phi(x) = i\hbar \langle x|\hat{I}|\phi \rangle$



# Chapitre 2

## Une particule quantique sans spin à 1 dimension (II)

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

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

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

##### 2.1.1.1 L'opérateur d'évolution : le propagateur

L'équation d'évolution de Schrödinger (1.10) donne la modification instantanée  $d|\phi\rangle/dt$  de l'état quantique. Étant donné un état initial  $|\phi(0)\rangle$  à l'instant  $t = 0$ , nous allons voir qu'il est possible d'avoir l'expression de l'état  $|\phi(t)\rangle$  après une durée finie  $t$  d'évolution.

**Propriété**

Supposons que l'opérateur  $\hat{H}$  ne dépende pas du temps (ce ne serait pas le cas s'il y avait des forces dépendant du temps).

L'évolution d'un état est donné par :

$$|\phi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\phi(0)\rangle \quad (2.1)$$

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

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)^n \quad (2.2)$$

(la série sert de définition à la notion d'exponentielle d'opérateur).

**preuve :** on vérifie que  $|\phi(t)\rangle$  satisfait l'équation de Schrödinger :  $d|\phi(t)\rangle/dt = \frac{d\hat{U}}{dt}|\phi(0)\rangle = (-i\hat{H}/\hbar)\hat{U}(t)|\phi(0)\rangle = (-i\hat{H}/\hbar)|\phi(t)\rangle$ .

**2.1.1.2 Opérateurs unitaires****Définition**

Un opérateur linéaire  $\hat{O}$  est **unitaire** si il conserve la norme de tous les vecteurs, c'est à dire

$$\begin{aligned} \forall |\psi\rangle, \quad \text{si } |\psi'\rangle = \hat{O}|\psi\rangle, \\ \text{alors } \langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \psi \rangle. \end{aligned}$$

**Propriétés et remarques**

- L'équivalent en géométrie euclidienne sont les transformations orthogonales (par exemples les rotations) qui conservent la longueurs des vecteurs.
- (\*) Montrer que  $\hat{O}$  est unitaire si et seulement le produit scalaire Hermitien  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  est conservé par l'action de  $\hat{O}$  :

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

**preuve :** On utilise la relation  $\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \phi | \phi \rangle + 2\Re(\langle \psi | \phi \rangle)$ , donnant  $\langle \psi + i\phi | \psi + i\phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \phi | \phi \rangle - 2\Im(\langle \psi | \phi \rangle)$  et donc :

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

Cette dernière expression de  $\langle \psi | \phi \rangle$  ne fait intervenir que des produits scalaires de la forme  $\langle \varphi | \varphi \rangle$ . Or un tel produit est conservé par l'action de  $\hat{O}$ . On déduit que  $\langle \psi | \phi \rangle$  est aussi conservé. ■

- Un opérateur linéaire  $\hat{O}$  est unitaire si et seulement si :

$$\begin{aligned} \hat{O}^+ \hat{O} &= Id \\ \Leftrightarrow \hat{O}^+ &= \hat{O}^{-1} \end{aligned}$$

**preuve** : D'après la dernière propriété,  $\hat{O}$  est unitaire si et seulement  $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle, \langle \psi | \phi \rangle = \langle \hat{O}\psi | \hat{O}\phi \rangle = \langle \psi | \hat{O}^+ \hat{O} \phi \rangle$ , si et seulement  $\hat{O}^+ \hat{O} = Id$ . (en effet remplacer  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  par les vecteurs d'une base). ■

- Le propagateur  $\hat{U}(t)$  eq.(2.2) est un opérateur unitaire, et l'on a

$$\hat{U}^+(t) = \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t)$$

**preuve** : En effet on a déjà été vérifié en eq.(1.11) que le produit scalaire entre deux vecteurs, est conservé au cours de l'évolution, mais on peut le recalculer directement :

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

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

- **Exercice** (TD) : retrouver l'eq.(1.21) à partir de eq.(??).

### 2.1.1.3 Le groupe d'évolution des états quantiques dans le temps

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

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2) \quad : \text{loi de composition} \quad (2.3)$$

$$\hat{U}(0) = Id \quad : \text{élément neutre} \quad (2.4)$$

$$\left(\hat{U}(t)\right)^{-1} = \hat{U}(-t) \quad : \text{inverse} \quad (2.5)$$

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

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

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

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

Relation entre élément d'un groupe à 1 dimension  $\hat{U}(t)$  et son générateur  $\hat{H}$  :

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) \quad (2.6)$$

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = \left(\frac{-i\hat{H}}{\hbar}\right) \hat{U}(t) \quad (2.7)$$

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \left(\frac{-i\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle : \forall |\psi\rangle \quad (2.8)$$

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

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

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

**Remarque :** nous avons **deux points de vue sur l'opérateur auto-adjoint  $\hat{H}$**  : dans ce paragraphe (et aussi d'après l'équation de Schrödinger), il est interprété comme un **générateur d'évolution**. Dans le paragraphe sur l'opération de mesure, il est interprété comme une **observable** possible de la grandeur énergie. Ce double aspect est valable pour tout opérateur auto-adjoint.

**Développement limité :** Si  $t \simeq 0$ , le développement limité de (l'exponentielle)  $\hat{U}(t)$  est :

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

on dit dans ce cas que  $\hat{U}(t)$  est une **transformation infinitésimale**.

### 2.1.1.4 Relation d'incertitude temps-énergie

**Exercice 12** *Considérons un état quelconque  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  normalisé, et son évolution  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$ .*

*Si  $|\psi\rangle$  est état propre de  $\hat{H}$ , c'est un état stationnaire car il vérifie  $|\langle\psi(t)|\psi(0)\rangle| = 1$ ,  $\forall t$ , et son incertitude en énergie (définie par 1.24) est  $\Delta E = 0$ .*

*Un état quelconque par contre n'est pas forcément un état stationnaire. Montrer que :*

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

*qui s'interprète en disant que l'état  $|\psi(t)\rangle$  a sensiblement changé de l'état initial  $|\psi(0)\rangle$  (et avec lui toutes ses propriétés observables) seulement après la durée caractéristique :*

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

*(remarquer que  $\Delta t \rightarrow \infty$  si  $\Delta E \rightarrow 0$ ).*

*Cette dernière relation s'écrit aussi  $\Delta t \Delta E = \hbar$  et s'appelle la **relation d'incertitude temps-énergie**. Attention cependant que nous n'avons pas introduit d'opérateur "temps", et donc que cette relation d'incertitude n'est pas de la forme (1.28) étudiée plus haut.*

### 2.1.2 Groupe des translations des états quantiques en espace

Soit  $\psi(x)$  une fonction d'onde, et  $\psi_\lambda(x) = \psi(x - \lambda)$  la même fonction tradatée de  $\lambda \in \mathbb{R}$  en espace, dans la direction  $x$ . Voir figure (2.1). On définit l'opérateur de translation  $\hat{T}_\lambda$  qui effectue cette transformation :

$$\left(\hat{T}_\lambda\psi\right)(x) = \psi(x - \lambda) \tag{2.9}$$

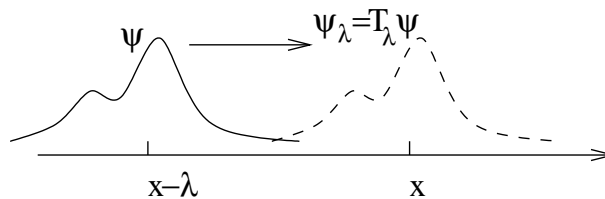


FIG. 2.1 – Translation d'une fonction d'onde de  $\lambda$ .

#### Propriétés et remarques

- **Exercice :** Vérifier que les opérateurs  $\hat{T}_\lambda$  forment un groupe à un paramètre  $\lambda \in \mathbb{R}$  d'opérateurs unitaires, appelé **groupe des opérateurs de translation des états quantiques** en  $x$ .

- Solution : c’est comme pour l’évolution temporelle où  $\hat{p}$  remplace  $\hat{H}$  et  $\hat{T}_\lambda$  remplace  $\hat{U}_t$ . Le générateur de ce groupe est l’opérateur auto-adjoint impulsion

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

c’est à dire que si

$$|\psi_\lambda \rangle = \hat{T}_\lambda |\psi_0 \rangle$$

alors

$$\frac{d|\psi_\lambda \rangle}{d\lambda} = \left( -\frac{i\hat{p}}{\hbar} \right) |\psi_\lambda \rangle$$

et donc

$$\hat{T}_\lambda = \exp \left( -i \frac{\hat{p}\lambda}{\hbar} \right). \quad (2.10)$$

**preuve :**  $\psi_\lambda(x) = \psi(x - \lambda)$ , donc  $\langle x | \frac{d}{d\lambda} |\psi_\lambda \rangle = (d\psi_\lambda/d\lambda)(x) = -(d\psi/dx)(x - \lambda) = -(d\psi_\lambda/dx)(x) = \langle x | \frac{-i}{\hbar} \hat{p} |\psi_\lambda \rangle$ . Ceci est vrai pour tout état  $|x\rangle$  de “base”. Par conséquent  $\frac{d|\psi_\lambda \rangle}{d\lambda} = \left( -\frac{i\hat{p}}{\hbar} \right) |\psi_\lambda \rangle$  ■.

Graphiquement, la relation de base  $(d\psi_\lambda/d\lambda)(x) = -(d\psi_\lambda/dx)(x)$  (qui est responsable de la fameuse expression “ $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ ” pour l’opérateur impulsion) est assez claire sur la figure (2.2).

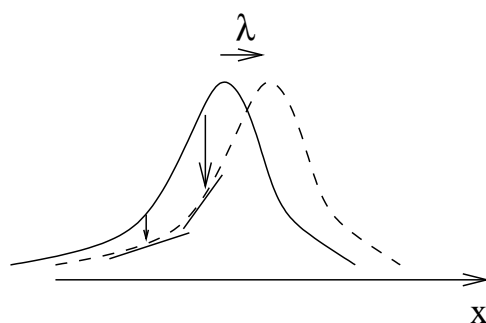


FIG. 2.2 – Schéma d’une petite translation, montrant la relation  $(d\psi_\lambda/d\lambda)(x) = -(d\psi_\lambda/dx)(x)$  entre la variation de la fonction et sa dérivée.

- L’interprétation de l’impulsion comme générateur des translations spatiales est assez fondamentale, et valable en mécanique classique comme en mécanique quantique. De plus, le calcul précédent justifie d’un certain point de vue l’expression à priori surprenante de l’opérateur impulsion  $\hat{p} = -i\hbar d/dx$  introduite dès le début de ce chapitre.

**Exercice 13** *Montrer que*

$$\langle x | \hat{T}_\lambda = \langle x - \lambda | \quad (2.11)$$

$$\hat{T}_\lambda |x \rangle = |x + \lambda \rangle \quad (2.12)$$

### 2.1.3 Groupe des translations en impulsion

On peut faire de même avec la translation en impulsion, c'est à dire considérer l'opérateur  $\hat{B}_\mu$  qui translate la fonction d'onde en représentation d'impulsion :

$$\tilde{\psi}_\mu(p) = (\hat{B}_\mu \tilde{\psi})(p) = \tilde{\psi}(p - \mu)$$

Comme  $p = mv$  (en mécanique classique), l'opérateur  $\hat{B}_\mu$  consiste à changer la vitesse par une constante. Cela s'appelle aussi un **boost**. Ce changement intervient lors d'un **changement de référentiel Galiléen** :  $x' = x + vt$ , donnant  $dx'/dt = dx/dt + v$ .

**Exercice** Montrer que  $\hat{B}_\mu$  forment un groupe à un paramètre  $\mu \in \mathbb{R}$  d'opérateurs unitaires, et que l'opérateur position  $(-\hat{x})$  est leur générateur :

$$\hat{B}_\mu = \exp\left(-\frac{i(-\hat{x})\mu}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i\hat{x}\mu}{\hbar}\right) \quad (2.13)$$

$$\frac{d|\psi_\mu\rangle}{d\mu} = \left(-i\frac{(-\hat{x})}{\hbar}\right)|\psi_\mu\rangle$$

**Résumé jusqu'à présent : (voir figure 2.3)**

- L'opérateur  $(-\hat{x})$  est le générateur des translations des fonctions d'ondes en impulsion.
- L'opérateur  $\hat{p}$  est le générateur des translations des fonctions d'ondes en espace.
- L'opérateur  $\hat{H}$  est le générateur des translations des fonctions d'ondes en temps.

Cet énoncé un peu abstrait, est utilisé dans les formulations "modernes" et géométriques des théories physiques.

### 2.1.4 Générateurs en mécanique classique

Montrer que en mécanique classique de Hamilton la situation est la même :

Un état est un point  $(x, p)$  dans l'espace de phase. Si le point  $(x(t), p(t))$  évolue en temps, il satisfait l'équation d'évolution de Hamilton :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial x} \end{pmatrix}$$

C'est équation qui est l'analogie classique de l'équation de Schrödinger, permet de dire que la fonction de Hamilton  $H$  est le générateur de l'évolution temporelle.

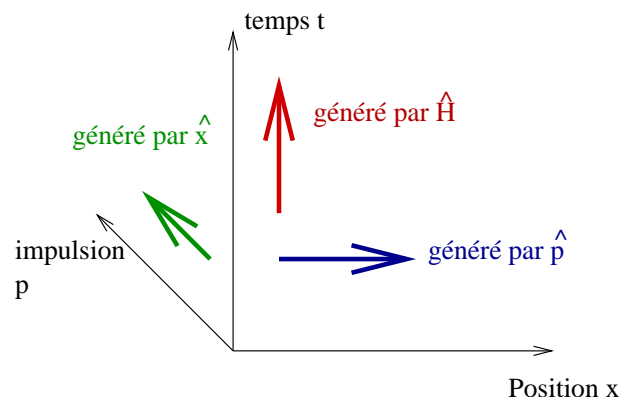


FIG. 2.3 – Résumé de l’action des générateurs des translations dans l’espace (de phase) et temps.

Si maintenant on considère les translations en espace,  $(x_\lambda, p_\lambda) = (x_0 + \lambda, p_0)$ , alors  $dx_\lambda/d\lambda = 1$ , et  $dp_\lambda/d\lambda = 0$ , soit

$$\frac{d}{d\lambda} \begin{pmatrix} x_\lambda \\ p_\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial p} \\ -\frac{\partial G}{\partial x} \end{pmatrix}$$

où le générateur est cette fois ci la fonction impulsion  $G(x, p) = p$ .

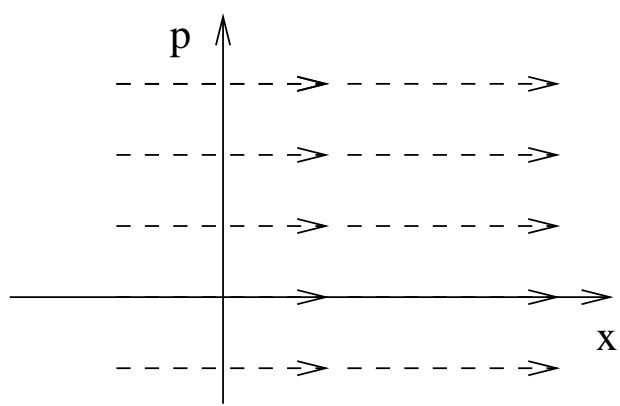


FIG. 2.4 – Trajectoires dans l’espace de phase classique  $(x, p)$  engendrée par le générateur  $G(x, p) = p$ . Ce sont des translations en  $x$ .

De même pour les translations en impulsion, le générateur est la fonction  $G(x, p) = -x$ .

---

<sup>1</sup>Attention, il y a cependant une différence entre les translations dans l’espace de phase en mécanique classique et quantique : du fait de la non commutativité  $[\hat{q}, \hat{p}] \neq 0$ , on déduit que  $[\hat{T}_\lambda, \hat{B}_\mu] \neq 0$  en

## 2.2 Le potentiel harmonique; Spectre de $\hat{H}$ et évolution

référence : Ballentine p111.

Comme signalé plus haut, il est en général impossible de résoudre de façon exact l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel quelconque  $V(x)$ . En revanche cela est possible pour un potentiel quadratique  $V(x) = ax^2 + bx + c$ . Dans cette section nous allons résoudre ce problème, et nous intéresser au **potentiel Harmonique** :

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

Le Hamiltonien correspondant est celui de l'**oscillateur harmonique** :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \quad (2.14)$$

### 2.2.1 Importance du potentiel Harmonique en physique

Si une particule se déplaçant à une dimension, subit un champ de force dérivant d'un potentiel  $F(x) = -dV/dx$ , et se trouve près d'une position d'équilibre, disons en  $x = 0$ , alors  $F(0) = -(dV/dx)(0) = 0$ ; si de plus cette position d'équilibre est stable, alors  $(dF/dx)(0) = -(d^2V/d^2x)(0) < 0$ . Dans ce cas le mouvement de la particule reste au voisinage de cette position d'équilibre, et on peut approximer la fonction potentielle par son développement limité en  $x \simeq 0$  :

$$V(x) = V(0) + x \frac{dV}{dx}(0) + \frac{1}{2}x^2 \frac{d^2V}{dx^2}(0) + o(x^2) \quad (2.15)$$

$$= \frac{1}{2}kx^2 + o(x^2) \quad (2.16)$$

en posant :

$$k = \frac{d^2V}{dx^2}(0)$$

et  $V(0) = 0$  (par choix de l'échelle d'énergie).

Voir figure 2.5.

Or cette situation est très courante, car à "basse" température, les particules ont tendance à se mettre près de leur position d'équilibre stable qui est la position de plus basse énergie.

---

général. On verra par conséquent que le groupe des translations quantiques dans l'espace de phase, appelé groupe de Weyl-Heisenberg, est un groupe de Lie de dimension 3. En mécanique classique le groupe des translations dans l'espace de phase est un groupe de Lie commutatif de dimension 2. Le troisième paramètre apparaissant en mécanique quantique est une phase dont on verra l'importance dans la section suivante.

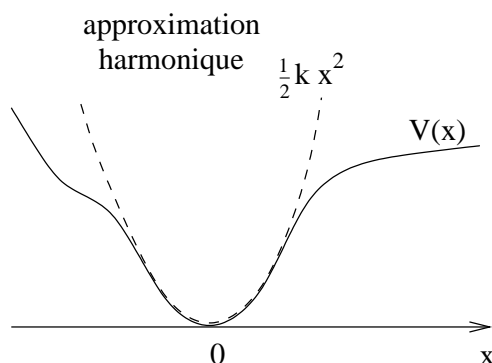


FIG. 2.5 – Approximation harmonique près de la position d'équilibre stable.

Pour ces raisons, **l'approximation harmonique est très utiles, et fondamentale en physique.**

Les équations de mouvement classique sont

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

Elles sont linéaires en les variables  $(x, p)$ , car celles ci n'apparaissent que au degré 1. Pour cette raison, on parle aussi de **l'approximation linéaire** du mouvement.

(Plus généralement, les équations de mouvement sont linéaires lorsque le Hamiltonien est quadratique en  $(x, p)$ ).

La résolution de ces équations montre que la particule a un mouvement d'oscillation à la fréquence

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

indépendante de l'énergie. Et que  $x(t) = x(0) \sin(\omega t + \varphi_0)$  est purement sinusoïdale. Le terme "harmonique" vient de cette propriété.

Rappelons nous aussi que les trajectoires  $x(t), p(t)$  dans l'espace de phase sont des ellipses (voir figure 1.7).

**Remarque :** pour un problème à plusieurs dimensions ou plusieurs degrés de liberté, cela est encore valable.

Par exemple, les équations de Maxwell sont linéaires par rapport aux champs  $\vec{E}, \vec{B}$ . Ainsi la dynamique du champ de Maxwell est harmonique, et l'analyse de cette section sera directement applicable pour comprendre la nature quantique du champ électromagnétique et le concept de **photon** (états stationnaires quantiques des oscillations du champs).

Comme autre exemple, citons les ondes de vibration d'un solide. Pour les faibles amplitudes, on peut utiliser l'approximation harmonique comme décrite ici, et les petites vibrations du solide sont alors décrite par un Hamiltonien qui est la somme d'oscillateurs

harmonique indépendants. Les **phonons** sont les états stationnaires quantiques de ces oscillations.

## 2.2.2 Résolution algébrique du spectre

Pour résoudre le spectre de l'oscillateur Harmonique nous allons essayer de mettre en évidence dans ce cas simple, une démarche générale qui est bien adaptée aux problèmes possédant une symétrie dynamique. (Cette même démarche sera utilisée plus loin pour l'étude du groupe de rotation, et s'utilise en général pour tous les groupes de symétrie continus.)

### 2.2.2.1 Changement de variable

On simplifie tout d'abord l'expression de  $\hat{H}$  en introduisant des coordonnées  $(\hat{Q}, \hat{P})$  sans dimension :

$$\hat{Q} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{q} \quad (2.17)$$

$$\hat{P} = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} \hat{p} \quad (2.18)$$

donnant :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right)$$

(on a ainsi factorisé la seule constante ayant une dimension d'énergie :  $\hbar\omega$ ).

On obtient pour les nouvelles variables :

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{q}, \hat{p}] = i\hat{I} \quad (2.19)$$

En utilisant eq.(A.2), donnant  $[\hat{Q}, F(\hat{P})] = i\frac{dF(\hat{P})}{d\hat{P}}$ ,  $[F(\hat{Q}), \hat{P}] = i\frac{dF(\hat{Q})}{d\hat{Q}}$ , ou directement, on remarque que

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{Q}] &= -i\hbar\omega\hat{P} \\ [\hat{H}, \hat{P}] &= i\hbar\omega\hat{Q} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Le problème fait donc intervenir seulement quatre opérateurs autoadjoints :  $\hat{H}, \hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$ . Nous venons de montrer une propriété remarquable qui est que les commutateurs de deux quelconques de ces opérateurs est une combinaison linéaire de ces opérateurs. On dit que l'espace vectoriel engendré par ces opérateurs est stable vis à vis de l'opération de commutation.

L'**algèbre de Lie de l'oscillateur Harmonique**, noté  $\mathcal{O}$  est l'espace vectoriel engendré par ces quatre opérateurs, c'est à dire par toutes les combinaisons linéaires possibles.

C'est un espace vectoriel de dimension 4, qui est stable par l'opération de commutation. (i.e. un élément quelconque  $\hat{A} \in \mathcal{O}$  s'écrit  $\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{H} + \delta\hat{I}$ , avec  $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$ ; et si  $\hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{O}$  alors  $\frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}] \in \mathcal{O}$ ).

Nous verrons ci-dessous page 96, que ces opérateurs sont les générateurs du groupe de Lie des déplacements dans l'espace de phase (rotation comprise).<sup>2</sup>

### 2.2.2.2 Opérateurs de création et d'annihilation

Nous allons voir qu'il est préférable de considérer d'autres opérateurs appartenant à l'algèbre de l'oscillateur Harmonique :

---

<sup>2</sup>Une algèbre de Lie d'opérateurs est un ensemble d'opérateurs *auto-adjoints* formant un espace vectoriel *réel* de dimension fini  $n$  et stable par l'opération de commutation.

En notant  $\mathcal{A}$  une telle algèbre de dimension  $n$ , cela signifie, qu'il existe des opérateurs *auto-adjoints*  $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n$  indépendants, formant une base de  $\mathcal{A}$ , et que tout élément  $\hat{A} \in \mathcal{A}$  s'écrit, comme une combinaison linéaire à coefficients réels :

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^n a_i \hat{A}_i \in \mathcal{A}, \quad a_i \in \mathbb{R}$$

et il faut aussi que  $\forall \hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{A}$  alors  $\frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \in \mathcal{A}$ .

**Remarques :**

- L'algèbre est caractérisée par sa dimension  $n$  et par les commutateurs des éléments de base  $\hat{A}_i$ , autrement dit par les coefficients  $C_{ijk} \in \mathbb{R}$  définis par :

$$\frac{1}{i} [\hat{A}_i, \hat{A}_j] = \sum_{k=1}^n C_{ijk} \hat{A}_k$$

- Deux algèbres de Lie  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{A}'$  sont dites isomorphes (i.e. "équivalentes") si il existe une bijection  $\varphi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}'$  (qui permet d'identifier  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{A}'$ ) telle que :

1.  $\varphi$  soit une application linéaire (i.e. préserve les combinaisons linéaires)

2.  $\varphi$  préserve les commutateurs :  $\frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$  alors  $\frac{1}{i} [\varphi(\hat{A}), \varphi(\hat{B})] = \varphi(\hat{C})$ .  
(On verra l'exemple d'un tel isomorphisme page 97).

- On peut considérer aussi les combinaisons à coefficients complexes. Il s'agit alors de l'**algèbre de Lie complexifiée**.
- Nous verrons que les opérateurs auto-adjoints d'une algèbre de Lie peuvent toujours être considérés comme des générateurs; et que l'on peut associer un groupe de Lie d'opérateurs unitaires.

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \quad : \text{ adjoint de } a \end{aligned}$$

qui vérifient

$$[a, a^+] = \hat{I}$$

(en effet :  $[a, a^+] = \frac{1}{2} ([\hat{Q}, -i\hat{P}] + [i\hat{P}, \hat{Q}]) = \frac{1}{2}(1 + 1) = \hat{I}$ )

On a inversement  $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$ ,  $\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$ , donnant :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( a^+ a + \frac{1}{2} \hat{I} \right)$$

On pose :

$$\hat{N} = a^+ a$$

et l'on a

$$[a, a^+] = \hat{I} \tag{2.21}$$

$$[* , \hat{I}] = 0 \tag{2.22}$$

$$[\hat{N}, a] = -a \tag{2.23}$$

$$[\hat{N}, a^+] = a^+ \tag{2.24}$$

Ainsi, les quatre opérateurs  $(\hat{N}, a^+, a, \hat{I})$  forment une autre base de la même algèbre, mais les relations de commutation sont plus simples.

On les a mis sous une forme standard appelée **décomposition de Cartan**. Cette forme standard permet de calculer le spectre de l'opérateur  $\hat{N}$ , et donc de déduire celui de  $\hat{H}$  :

**Propriété** Le spectre de  $\hat{N} = a^+a$  est formé par :

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad n \in \mathbb{N},$$

les opérateurs  $a, a^+$  sont des opérateurs “d’échelle” (voir figure 2.6) :

$$\begin{aligned} a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, & \text{pour } n \geq 0 \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, & \text{pour } n \geq 1 \end{aligned}$$

donc chaque état normalisé  $|n\rangle$  s’exprime à partir de l’état  $|0\rangle$  :

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle$$

où l’état  $|0\rangle$  est défini par :

$$a|0\rangle = 0$$

sa fonction d’onde normalisée dans la “représentation  $Q$ ”, est une fonction gaussienne :

$$\langle Q|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}Q^2}$$

Conséquence : le spectre de  $\hat{H}$  est :

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{2.25}$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \tag{2.26}$$

La relation de fermeture dans la base  $(|n\rangle)_n$  s’écrit :

$$Id = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$$

**preuve :** On cherche une base de  $\mathcal{H}$  formée par les vecteurs propres de l’opérateur autoadjoint  $\hat{N}$  :

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

où  $\nu$  est à priori un nombre réel quelconque et  $\langle \nu|\nu\rangle \neq 0$ . La phase des vecteurs  $|\nu\rangle$  est encore arbitraire.

Partant d’un état  $|\nu\rangle$  normalisé donné, on applique l’opérateurs  $a$ , et avec (2.24), on obtient :

$$\hat{N}(a|\nu\rangle) = a(\hat{N} - I)|\nu\rangle = (\nu - 1)(a|\nu\rangle)$$

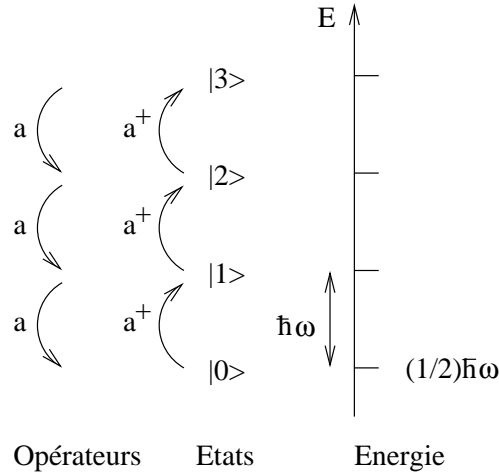


FIG. 2.6 – Schéma des opérateurs d'échelle agissant entre les états propres  $|n\rangle$ , et schéma du spectre d'énergie équidistant de l'oscillateur Harmonique. On appelle aussi  $a^+$  l'**opérateur de création**, et  $a$  l'**opérateur d'annihilation**. (Ce terme est plus approprié dans le cadre de l'électrodynamique quantique, voir plus loin).

Donc si  $a|\nu\rangle \neq 0$ , alors  $(a|\nu\rangle)$  est aussi vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $(\nu - 1)$ . On définit alors l'état  $|\nu - 1\rangle$  normalisé par

$$a|\nu\rangle = c|\nu - 1\rangle$$

où  $c \in \mathbb{R}^+$  est une constante de normalisation que l'on trouve en écrivant :

$$|c|^2 = \|c|\nu - 1\rangle\|^2 = \|a|\nu\rangle\|^2 = \langle \nu | a^+ a | \nu \rangle = \nu$$

On déduit que  $\nu > 0$  et  $c = \sqrt{\nu}$ , donc

$$a|\nu\rangle = \sqrt{\nu}|\nu - 1\rangle$$

et

$$a^+|\nu - 1\rangle = \frac{a^+ a}{\sqrt{\nu}}|\nu\rangle = \sqrt{\nu}|\nu\rangle$$

Dans le cas  $\nu = 0$ , on obtient  $a|0\rangle = 0$ .

Partant d'une valeur de  $\nu > 0$  quelconque, et de l'état  $|\nu\rangle$ , en appliquant l'opérateur  $a$ , on construit donc des états propres, de valeurs propres  $\nu' = (\nu - 1), (\nu - 2), \dots$ , et par récurrence, on déduit que ce processus s'arrête forcément avec  $\nu = 0$  avec l'état  $|0\rangle$ , et donc que **les valeurs possibles de  $\nu$  sont entières**. (Sinon, on pourrait construire un état avec  $\nu' < 0$ , ce qui est impossible).

On pose maintenant  $n = \nu \in \mathbb{N}$ .

Pour  $n = 0$ , cherchons le vecteur correspondant  $|0\rangle$ , défini par :  $a|0\rangle = 0$ . Cela donne pour sa fonction d'onde  $\psi(Q) = \langle Q|0\rangle$  :

$$0 = \langle Q|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle Q|(\hat{Q} + i\hat{P})|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)\langle Q|0\rangle, \quad \forall Q \in \mathbb{R}.$$

(se rappeler que par définition pour tout état  $|\psi\rangle$ , on a  $\langle Q|\hat{Q}|\psi\rangle = Q\langle Q|\psi\rangle$  et  $\langle Q|\hat{P}|\psi\rangle = -i\frac{d}{dQ}\langle Q|\psi\rangle$ ). On obtient donc une équation différentielle pour  $\psi(Q) = \langle Q|0\rangle$ , donnant  $d\psi/\psi = -QdQ$ , soit la solution unique normalisée (voir A.1) :

$$\langle Q|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)$$

D'après ci-dessus, on obtient les états suivants par  $|\nu+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu+1}}a^+|\nu\rangle$ , donc :

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}}a^+|0\rangle, & |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1}}(a^+)^2|0\rangle \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle \end{aligned}$$

Le spectre de  $\hat{H}$  s'obtient simplement de la relation  $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}Id\right)$ . ■.

### 2.2.3 Expression et schéma des fonctions d'ondes $\psi_n(Q) = \langle Q|n\rangle$

On a

$$\psi_n(Q) = \langle Q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \langle Q|a^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right) \psi_{n-1}(Q)$$

La fonction d'onde  $\psi_n(Q) = \langle Q|n\rangle$  s'obtient donc par une opération de dérivation à partir de la fonction  $\psi_{n-1}(Q)$ .

On a aussi

$$\psi_n(Q) = \langle Q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle Q|(a^+)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n \langle Q|0\rangle$$

La fonction d'onde  $\psi_n(Q) = \langle Q|n\rangle$  s'obtient donc par une opération de  $n$  dérivation à partir de la gaussienne  $\psi_0(Q)$ . Le résultat s'exprime explicitement avec des polynômes d'Hermites  $H_n(Q)$  :

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{n!2^n}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) H_n(Q)$$

En effet, on peut montrer que  $H_n(Q)$  vérifient les relations de récurrence (voir [CBF] page 529) :

$$\begin{aligned} H_0(Q) &= 1 \\ H_1(Q) &= 2Q \\ H_n(Q) &= 2QH_{n-1}(Q) - 2(n-1)H_{n-2}(Q) \quad \text{si } n \geq 2 \end{aligned}$$

par conséquent  $H_n(Q)$  est un polynôme de degré  $n$  en  $Q$ .

Code sous **Maple** ou sous **xcas** (qui est libre et gratuit) pour dessiner les fonctions d'ondes :

```

f0 :=exp(-x^2/2) ;
f1 :=1/(sqrt(2*1))*(x*f0-diff(f0,x)) ;
f2 :=1/(sqrt(2*2))*(x*f1-diff(f1,x)) ;
f3 :=1/(sqrt(2*3))*(x*f2-diff(f2,x)) ;
plot({f0,f1,f2,f3},x=-5..5) ;

```

Donnant la figure 2.7.

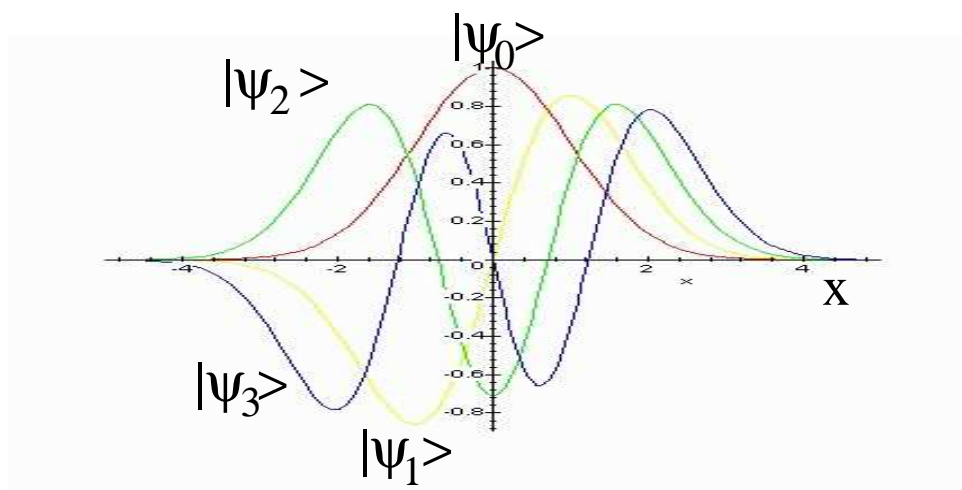


FIG. 2.7 – Fonctions d’ondes stationnaires  $\psi_n = \langle Q|n \rangle$  de l’oscillateur Harmonique.

### 2.2.3.1 Fonctions d’ondes $\psi_n(x)$

On a donné l’expression des fonctions d’onde avec la variable  $Q$  sans unité. Voici leur expression avec la variable de position  $x$ .

**Propriété** Pour le changement de variable  $\hat{Q} = \alpha \hat{x}$ , avec  $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$ , ci-dessus, on déduit, que  $|Q \rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}|x \rangle$ .

**Preuve :** Posons  $|Q \rangle = \beta|x \rangle$ . On a  $|Q \rangle = \beta|x \rangle = \beta \int dQ' |Q' \rangle \langle Q'|x \rangle = \beta \int \alpha dx' |Q' \rangle \beta \langle x'|x \rangle$ . Or  $\langle x'|x \rangle = \delta(x' - x)$ , donc  $|Q \rangle = \alpha\beta^2|Q \rangle$ , ainsi  $\beta = 1/\sqrt{\alpha}$ . ■

On obtient alors pour l’état fondamental :

$$\psi_0(x) = \langle x|0 \rangle = \sqrt{\alpha} \langle Q|0 \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

qui est le paquet d’onde Gaussien (1.6), avec  $x_0 = 0$ ,  $p_0 = 0$ , et de largeur  $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ .

### 2.2.4 Application : Modèle d'Einstein (1907) sur la capacité calorifique des matériaux

Nous discutons maintenant une conséquence expérimentale remarquable de la quantification du spectre de l'oscillateur Harmonique, très importante au niveau historique. C'est un modèle que Einstein a introduit en 1907, bien avant la connaissance de la mécanique quantique.

On modélise un atome de carbone dans un cristal de diamant, par une particule oscillant autour de sa position d'équilibre. Dans l'approximation harmonique, son mouvement selon  $x$  est décrit par le Hamiltonien (2.14). Ses niveaux d'énergie selon  $x$  sont donc quantifiés, selon :

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

A température nulle, l'atome est dans le niveau  $|0\rangle$  d'énergie le plus bas, mais à température  $T$  plus élevée, il peut être dans le niveau  $|n\rangle$ , d'énergie  $E_n$  avec la probabilité  $P_n = \frac{1}{Z} \exp(-E_n/(k_B T))$  (Loi de Boltzmann avec  $Z$  constante de normalisation).

Sans faire de calcul, on devine que tant que  $kT \ll \hbar\omega$ , l'atome a une probabilité négligeable d'atteindre les niveaux excités  $n \geq 1$ , et restera donc dans l'état fondamental  $n = 0$  (son mouvement est gelé). Son énergie moyenne reste donc constante,  $\langle E \rangle \simeq E_0$ , et sa capacité calorifique  $c(T) = d\langle E \rangle / dT \simeq 0$ .

Pour le diamant, cela correspond à  $T \ll \Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k} = 1320K$ . C'est donc le cas à température ambiante. A plus haute température, l'agitation thermique lui permet d'atteindre les premiers niveaux excités, et alors  $c(T) > 0$ .

La quantification des niveaux d'énergie explique donc que  $c(T) \rightarrow 0$  pour  $T \ll \Theta_E$ . Voir la figure 2.8.

Un calcul précis donne une expression analytique de la courbe  $c(T)$ , voir cours de physique statistique.

En particulier, le théorème d'équipartition classique donne  $c(T) \rightarrow 3R$  pour  $T \gg \Theta_E$ .

**Exercice (\*) :** Utilisant  $P_n = \frac{1}{Z} \exp(-E_n/(k_B T))$ , montrer que  $\langle E^{(x)} \rangle = \sum_{n \geq 0} P_n E_n^{(x)} = \frac{k_B \Theta}{2} \coth\left(\frac{\Theta}{2T}\right)$ . Dédurre la capacité calorifique molaire :

$$c(T) = 3R \left( \frac{\Theta}{2T} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\Theta}{2T}\right)}, \quad R = \mathcal{N}_A k_B$$

et tracer l'allure de cette courbe. Remarquer que d'après l'expression  $\Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k}$ , et utilisant la relation  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , un coefficient de raideur  $k$  élevé (c'est à dire matériau dur comme le diamant), est relié à une valeur  $\Theta$  élevée. Ainsi cette théorie relie des propriétés d'élasticité ou mécaniques du matériau à des propriétés calorifiques.

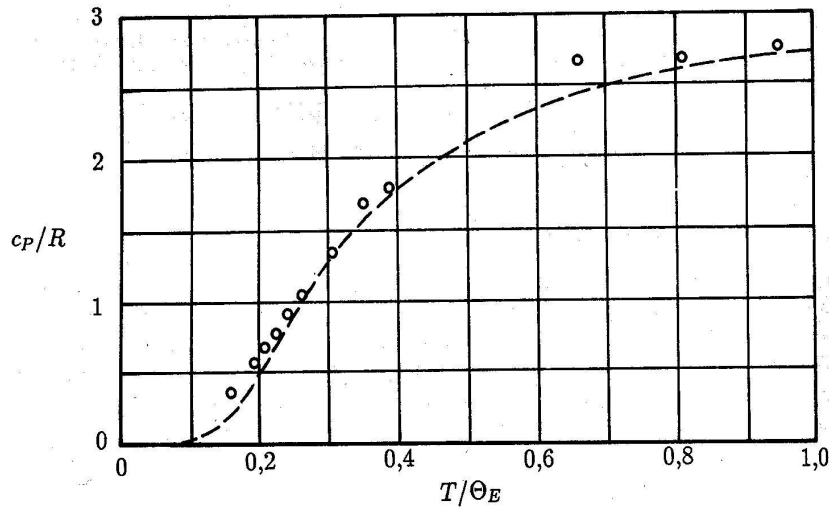


FIG. 2.8 – Capacité calorifique molaire  $c(T)$  du diamant, avec  $\Theta_E = \frac{\hbar\omega}{k} = 1320K$ . (A.Einstein, Ann. Physik, vol 22, 180, (1907)). La quantification des niveaux d'énergie explique donc que  $c(T) \rightarrow 0$  pour  $T \ll \Theta_E$ .

## 2.2.5 Application : les modes quantiques du champ électromagnétique dans le vide.

### 2.2.5.1 Les équations de Maxwell dans le vide interprétées comme une assemblée d'oscillateurs harmoniques

Bien que le modèle de l'oscillateur harmonique soit simple, il se trouve être utilisé pour décrire la dynamique du champ électromagnétique  $(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t))$  dans le vide. Cela vient du fait que **les équations de Maxwell sont des équations linéaires** par rapport aux variables  $(\vec{E}, \vec{B})$  (et leurs dérivées partielles). Le champ électromagnétique forme un système dynamique avec **un nombre infini de degrés de liberté**. Lorsque l'on résout les équations de Maxwell, on isole les degrés de liberté indépendants. **Un degré de liberté indépendant du champ électromagnétique dans le vide est une onde plane** caractérisée par son vecteur d'onde  $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ , et sa polarisation (droite ou gauche). Nous montrons maintenant que la dynamique (linéaire) de **cette onde plane s'identifie à la dynamique d'un oscillateur harmonique**.

Pour démarrer rappelons-nous d'un résultat d'électromagnétisme (voir [Jac75] par exemple), qu'une onde plane dans le vide, de vecteur d'onde  $\vec{k}$  et de polarisation circulaire gauche a pour expression (avec  $\vec{x} \equiv (x, y, z)$ ) :

$$\begin{aligned} E_x(\vec{x}, t) &= \mathbf{E} \cos(\omega t - kz) \\ E_y(\vec{x}, t) &= -\mathbf{E} \sin(\omega t - kz) \end{aligned} \quad (2.27)$$

où  $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^+$  est l'amplitude, où l'axe  $z$  est parallèle à  $\vec{k}$ , et la norme de  $\vec{k}$  est reliée à la

fréquence  $\omega$  de l'onde par

$$k = |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}.$$

Le champ  $\vec{B}(\vec{x}, t)$  quant à lui est complètement spécifié par

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} \left( \frac{\vec{k}}{k} \wedge \vec{E}(\vec{x}, t) \right)$$

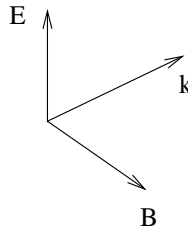


FIG. 2.9 – Triade des vecteurs  $\vec{k}, \vec{E}, \vec{B}$  orthogonaux pour une onde plane.

C'est à dire que  $\vec{k}, \vec{E}, \vec{B}$  forment une base orthogonale directe, et  $B_y(\vec{x}, t) = -\frac{1}{c}E_x$ ,  $B_x(\vec{x}, t) = \frac{1}{c}E_y$ .

La densité volumique d'énergie de l'onde plane est

$$H = \frac{\varepsilon_0}{2} (E^2(\vec{x}, t) + c^2 B^2(\vec{x}, t)) = \varepsilon_0 \mathbf{E}^2 = \varepsilon_0 (E_x^2 + E_y^2)$$

et sa densité d'impulsion est donnée par le vecteur de Poynting :

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{x}, t) \wedge \vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{\varepsilon_0}{c} \mathbf{E}^2 \begin{pmatrix} \vec{k} \\ k \end{pmatrix}$$

(Remarquer la relation relativiste  $H^2 - P^2 c^2 = 0$  entre l'énergie et l'impulsion).

D'après ci-dessus la dynamique de l'onde plane, se représente à  $\vec{x}$  fixé, par un **mouvement circulaire** dans le plan  $(E_x, E_y)$  (ou  $(B_x, B_y)$  ou...).

Cela fait naturellement penser à la dynamique de l'oscillateur harmonique dans le plan  $(q(t), p(t))$ . Pour préciser cette formulation, choisissons un point de référence, par exemple l'origine  $\vec{x} = 0$ , et définissons :<sup>3</sup>

$$q(t) = \frac{\sqrt{2\varepsilon_0}}{\omega} E_x(0, t), \quad p(t) = \sqrt{2\varepsilon_0} E_y(0, t).$$

<sup>3</sup>Pour procéder systématiquement, posons  $q = \alpha E_x$  et  $p = \beta E_y$ , avec  $\alpha, \beta$  inconnus. On a  $dE_x/dt = \omega E_y$ ,  $dE_y/dt = -\omega E_x$  et  $H = \varepsilon_0 (E_x^2 + E_y^2)$ . Donc  $dq/dt = (\alpha\omega/\beta)p$  et  $dp/dt = -(\beta\omega/\alpha)q$ . On voudrait  $dq/dt = p$  et  $dp/dt = -\omega^2 q$  et  $H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2)$ . Cela donne  $\alpha = \sqrt{2\varepsilon_0}/\omega$  et  $\beta = \alpha\omega = \sqrt{2\varepsilon_0}$ .

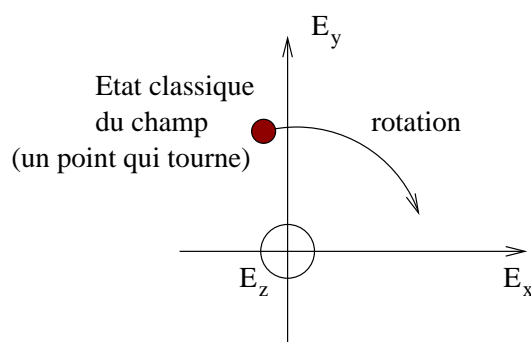


FIG. 2.10 –

Alors on vérifie que l'on a bien les relations définissant la dynamique d'un oscillateur de fréquence  $\omega$  :

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= p(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \frac{dp}{dt} &= -\omega^2 q = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{aligned}$$

Pour le mode de polarisation circulaire droite, la démarche est identique, il suffit d'inverser le rôle de  $E_x$  et  $E_y$ .

D'un point de vue dynamique, le rayonnement électromagnétique dans le vide est donc équivalent à une assemblée d'oscillateurs harmoniques. il y a une infinité de variables  $(q, p)$  différentes et indépendantes, pour chacun des modes  $mode \equiv (\vec{k}, polarisation = \pm 1)$ .

### 2.2.5.2 Quantification du champ électromagnétique

Bien qu'il s'agisse d'une onde, **le champ électromagnétique de Maxwell est de nature classique** et non quantique (l'onde n'exprime pas une amplitude de probabilité de présence d'une particule). Mais comme nous le ferons remarquer ultérieurement (3.2.5 page 138), pour la cohérence interne de la physique, il est nécessaire de considérer que **le champ classique n'est que "l'apparence classique" d'un objet quantique "le champ électromagnétique quantique"** (essentiellement cela correspond à considérer des superpositions quantiques de différentes configurations de champ électromagnétique).

Les expériences confirment tout à fait l'existence de ce champ quantique. Les manifestations sont nombreuses et les plus simples sont

- l'**effet photo-électrique**
- le **rayonnement du corps noir**.

La théorie quantique du champ électromagnétique dans le vide est très simple, il suffit de considérer que l'oscillateur harmonique décrivant une onde plane est un oscillateur harmonique quantique tout à fait standard.

L'état quantique d'un mode donné  $mode \equiv (\vec{k}, pol)$  est décrit par une fonction d'onde  $\psi(q)$  de la variable dynamique  $q$ . La dynamique n'est donc plus celle d'un point dans le plan ( $q \propto E_x, p \propto E_y$ ) mais d'une onde ("une onde quantique d'ondes électromagnétiques classiques").

### 2.2.5.3 Paquet d'onde=onde classique

Essayons de donner un sens physique à cette onde  $\psi(q)$ . Par exemple l'onde monochromatique issue d'un **Laser** que l'on décrit de façon idéale par l'onde plane classique (1.3), c'est à dire par le point de la figure (2.10), est dans la description quantique plutôt un **paquet d'onde quantique** centré sur ce point. Ce n'est donc pas un état stationnaire.

La largeur du paquet d'onde s'appelle fluctuations quantique du champ électromagnétique. Précisément, le principe d'incertitude (1.29)  $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$ , donne pour une onde plane selon  $z$  :

$$(\Delta E_x)(\Delta E_y) \geq \frac{\hbar\omega}{4\epsilon_0}$$

### 2.2.5.4 Les photons

Un état quantique stationnaire de l'oscillateur harmonique est de la forme  $|n\rangle$  avec  $n = 0, 1, 2, \dots$ , décrit en (2.25), et d'énergie :

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

On appelle cet état quantique  $|n\rangle$  un **état à  $n$  photons du mode**  $mode \equiv (\vec{k}, pol)$ .

Lorsque un atome se désexcite en émettant un photon dans le vide, il crée l'état  $|n = 1\rangle$  pour un mode donné.

Si l'espace environnant contient déjà  $n$  photon (état  $|n\rangle$ ), alors l'atome rajoute un photon, et il y a transition  $|n\rangle \rightarrow |n + 1\rangle$ . L'énergie de ce photon supplémentaire est

$$\hbar\omega = h\nu \quad : \text{énergie d'un photon de fréquence } \omega$$

Remarquer que la fonction d'onde  $\varphi(q)$  d'un état  $|n\rangle$  est un polynôme d'Hermite. Comme  $q \simeq E_x$  cette fonction d'onde est délocalisée dans les variables champs électrique et magnétique. Pour cette raison, l'état idéal  $|n\rangle$  n'existe pas longtemps : la décohérence (couplage à l'environnement) détruit rapidement un état  $|n\rangle$  pour le transformer plutôt en paquet d'onde, contenant aussi  $n$  photons mais seulement en moyenne (c'est à dire de même énergie moyenne  $E_n$ ).<sup>4</sup>

---

<sup>4</sup>Des expériences remarquables, étudient des états  $|n\rangle$  à  $n$  photons dans une cavité de miroirs, et observent à quelle vitesse la décohérence les transforme en paquet d'ondes localisés. Voir Aroche et al.

### 2.2.5.5 Le vide quantique du champ électromagnétique

Si l'espace vide est dans son état d'énergie minimal, chaque mode est dans l'état  $|n = 0\rangle$ . On appelle ces états sans photon, le **vide quantique du champ électromagnétique** :

$$|Vide\rangle \equiv (|0_{mode_1}\rangle \dots |0_{mode_k}\rangle \dots)$$

Ce qui est surprenant est qu'en mécanique quantique, ce "vide" est un état comme un autre (une fonction d'onde non nulle). Seulement c'est l'état fondamental stationnaire, il n'évolue donc pas, et ne peut fournir d'énergie. Pour cette raison il semble indétectable.

Une difficulté qui apparaît cependant est que son énergie est  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  pour chaque mode, et il y a une infinité de modes. D'après (2.47) page page 101, la densité de modes par unité de volume est  $2 d^3\vec{k}/(2\pi)^3$  (le facteur 2 est pour les deux états de polarisation).<sup>5</sup> Donc l'énergie du vide par unité de volume est (utilisant  $d^3\vec{k} = |k^2|dk \sin\theta d\theta d\varphi$  et  $\omega = ck$ ),

$$E_{vide} = 2 \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \left( \frac{1}{2}\hbar\omega \right) = \frac{\hbar}{c} \frac{(4\pi)}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} \omega^3 d\omega = \frac{\hbar}{8c\pi^2} [\omega^4]_0^{\omega_c \rightarrow +\infty} \longrightarrow_{\omega_c \rightarrow \infty} +\infty$$

ce qui montre que en principe cette **densité énergie est infinie** à cause des modes de hautes fréquence.

Par contre l'énergie du vide dans un volume  $1 m^3$ , par exemple, pour le spectre visible  $\lambda = 0,4 \rightarrow 0,8 \mu m$  est finie mais est énorme :  $E_{visible} = \frac{\hbar}{8c\pi^2} (\omega_2^4 - \omega_1^4) \simeq 2.10^{19} J$ .

La divergence de  $E_{vide}$  s'appelle la **catastrophe ultraviolette** en théorie quantique des champs. Comme il s'agit d'énergie par unité de volume, il y a une deuxième divergence pour l'énergie du vide dans l'univers, car celui-ci a un volume infini. On appelle cette seconde divergence la **catastrophe infra-rouge**. Depuis le début de la mécanique quantique, ces divergences montrent un obstacle à la compréhension parfaite de la physique des champs quantiques. On pense par exemple que les longueurs d'ondes des ondes électromagnétique ne peuvent être plus petites qu'une échelle encore inconnue (taille des cordes?), et cela mettrait une limite  $\omega_c$  à l'intégrale divergente.

Il y a des spéculations disant que cette énergie du vide "très grande" pourrait être relié à une énigme en cosmologie que l'on appelle **l'énergie noire**. Il semblerait en effet d'après des observations, que 70% de l'énergie contenue dans l'univers<sup>6</sup> et participant à

<sup>5</sup>Un mode ondulatoire occupe  $\Delta^3\vec{x}\Delta^3\vec{k} = (2\pi)^3$  dans l'espace  $(\vec{x}, \vec{k})$  où  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde. Dans un volume  $V$ , et pour un intervalle  $d^3\vec{k}$ , il y a donc  $V d^3\vec{k}/(2\pi)^3$  modes.

<sup>6</sup>Contenu en énergie/matière que l'on suppose y avoir dans l'univers qui semble être plat à grande échelle (courbure nulle) :

- 0.01 % de photons
- 0.01 à 2 % de neutrinos
- 5 à 6 % de baryons
- 25 % de matière noire (matière non identifiée) qui a une action gravitationnelle, en particulier pour le mouvement de rotation des galaxies.
- 70 % "d'énergie noire" (non identifiée, mais correspondant à la constante cosmologique des équations d'Einstein, nécessaire pour la courbure nulle de l'univers)

son expansion serait une énergie de nature encore inconnue et reliée à la valeur de la constante cosmologique dans la théorie de la relativité générale. Pourtant l'énergie du vide quantique du champ électromagnétique et des autres champs est trop grande (malgré  $\omega_c$ ) pour expliquer la constante cosmologique. Voir "Pour la science" mars 2003.

Malgré ces difficultés, la théorie quantique des champs est considérée comme un grand succès de la science, car on arrive à se "débarasser" de ces infini, et prédire des phénomènes expérimentaux très précis. Un des résultats les plus remarquables est le calcul du facteur gyromagnétique de l'électron, voir (4.9.2, page 161) :

$$\frac{g_{\text{experimental}} - 2}{2} = 0.001159652188(4)$$

$$\frac{g_{\text{theorique}} - 2}{2} = 0.001159652192(74)$$

La section suivante en donne un exemple de calcul en théorie quantique des champs où l'on parvient à prédire des effets physiques, malgré la divergence ultra-violette.

### 2.2.6 Un effet surprenant du "vide quantique" de photons : la force de Casimir (1948)

Référence : Milonni p.54 [Mil94].

Il s'agit d'une manifestation de la présence du vide quantique de photons, calculée par Casimir en 1948, et observée en 1958 par Sparnay, et encore récemment avec une grande précision.

Considérons deux plaques métalliques (conducteurs parfaits) très proches, d'une distance  $l \simeq 1\mu m$ .

On va montrer que le vide quantique électromagnétique induit une force attractive entre ces deux plaques, de surface  $S$ , appelée **force de Casimir** :

$$F_{\text{Casimir}}(l) = - \left( \frac{\pi^2 \hbar c}{240 l^4} \right) S \quad (2.28)$$

Remarquer que cette force décroît très vite avec la distance (en  $1/l^4$ ), et que son expression fait intervenir seulement les constantes fondamentales  $\hbar c$ . Sa valeur est très faible :

$$F_{\text{Casimir}} \simeq 10^{-7} N \text{ pour } l = 1\mu m \text{ et surface } S = 1cm^2.$$

Pour justifier cette force, l'idée simple est que comme les plaques sont conductrices, les champs électriques s'annulent à leur surface, et donc les seuls modes électromagnétique qui peuvent exister dans l'espace les séparant, sont ceux de longueur d'onde  $\lambda$  selon  $z$  (direction transverse) tel que  $l = n(\lambda/2)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Il y en a un nombre infini et donc l'énergie du vide  $\mathcal{E}(l)$  entre les deux plaques est infinie.

Considérons une plaque à la position  $l$ , libre de bouger selon  $z$ , dans une enceinte de longueur  $L$ . Voir figure (2.11).

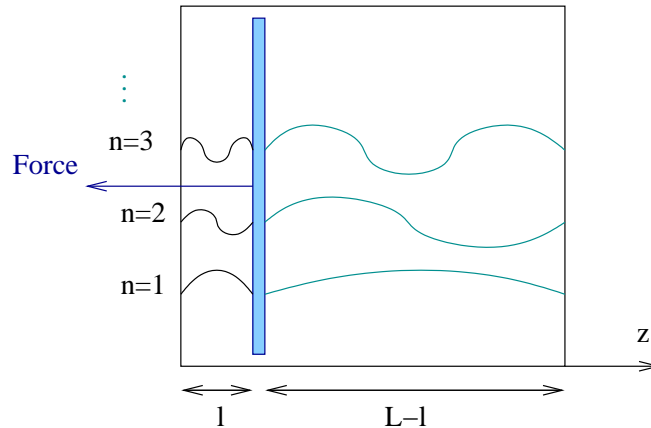


FIG. 2.11 – Miroir libre de bouger selon  $z$  dans une enceinte aux murs réfléchissants. Le vide quantique des modes électromagnétiques  $n = 1, 2, 3 \dots$  est responsable de la force de Casimir.

L'énergie interne de l'enceinte est  $U(l) = \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l)$ . La force de Casimir exercée sur la plaque est alors  $F_{\text{Casimir}}(l) = -\frac{dU}{dl}$ . On calcule ci-dessous que cette force est finie.

Pour montrer que la différence est finie, malgré le nombre infini de modes, on introduit une fréquence de coupure  $\omega_c$  arbitraire, qui stoppe la divergence de l'intégrale, et rend toutes les quantités finies (mais divergentes si  $\omega_c \rightarrow \infty$ ). Seulement à la fin du calcul on fait  $\omega_c \rightarrow \infty$ , et l'on observe étonnement que  $F_{\text{Casimir}}(l)$  ne diverge pas. Physiquement, cette fréquence de coupure peut être la fréquence de coupure dans les métaux, appelée aussi fréquence plasma (pour  $\omega < \omega_c$  le métal est réfléchissant, et pour  $\omega > \omega_c$  le métal est transparent).

**Exercice 14** 1. Soit une boîte rectangulaire aux parois conductrices, de côtés  $L_x = L_y$  et d'épaisseur très fine  $L_z = l \ll L_x$ . Exprimer les vecteurs d'ondes  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  des modes pouvant exister dans cette cavité. Dédurre une expression formelle de l'énergie du vide quantique électromagnétique dans cette cavité  $\mathcal{E}(l)$ , comme somme sur ces modes (en tenant compte des deux états de polarisation possibles). Quelle est l'origine de la divergence de  $\mathcal{E}(l)$  ?

2. On introduit une **fréquence de coupure**  $\omega_c$  et on décide de tronquer les hautes fréquences en introduisant le facteur  $\exp(-\omega/\omega_c)$  qui rend l'expression de  $\mathcal{E}(l)$  convergente. Comme  $l \ll L_x$ , on pourra remplacer la somme sur les modes selon  $x, y$  par une intégrale. Montrer que

$$\mathcal{E}(l) = \frac{\hbar c \pi^2 L_x^2}{2l^3} \frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{1}{x(e^x - 1)} \right)$$

avec  $x = \pi c / (\omega_c l)$ .

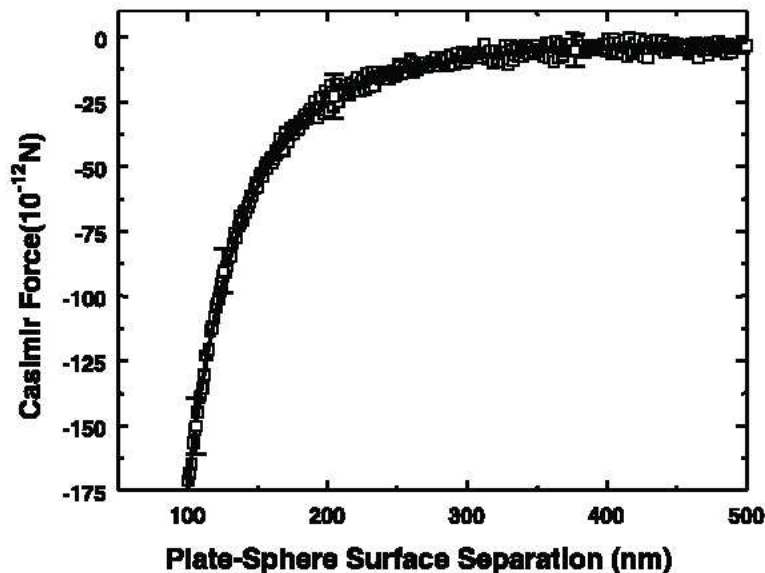
3. Utiliser l'expansion :

$$\frac{1}{x(e^x - 1)} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{12} - \frac{1}{30.24}x^2 + \mathcal{O}(x^3)$$

pour exprimer l'énergie du vide  $\mathcal{E}(l)$  en puissances de  $\omega_c$ . Montrer que  $\mathcal{E}(l)$  diverge comme  $\omega_c^4$  dans la limite  $\omega_c \rightarrow \infty$ , et calculer les termes sous dominants jusqu'au terme fini.

4. L'énergie dans l'enceinte de largeur  $L \ll L_x$  contenant une paroi mobile à la position  $l$  a pour énergie  $U(l) = \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l)$ . Calculer  $U(l)$  et déduire l'expression de la force de Casimir  $F_{\text{Casimir}}(l) = -\frac{dU}{dl}$ .

- La force de Casimir est observée expérimentalement avec une très grande précision. Pour cela il faut corriger l'expression (2.28), par différents effets : la géométrie des miroirs, la réponse optique des miroirs, et les effets thermiques. Voici une courbe qui compare la théorie et les mesures expérimentales, obtenue par A.Roy, C. Lin, U.Mohideen, Phys.Rev.D vol.60, p.,111101, (1999) :



- Dans le calcul ci-dessus de la force de Casimir, on a choisi une fonction de troncation  $e^{-\omega/\omega_c}$ . Le résultat ne dépend pas du choix de cette fonction, voir Milonni [Mil94] (faire exercice @@).
- On peut obtenir l'expression de la force de Casimir, sans utiliser l'énergie du vide, mais la pression de radiation (l'impulsion) des fluctuations du vide sur le miroir. Voir Milonni [Mil94]. Faire exercice @@

## 2.2.7 Les états cohérents et leur évolution par l'oscillateur harmonique

On a obtenu que l'état fondamental de l'oscillateur Harmonique  $|0\rangle$  est ni plus ni moins qu'un paquet d'onde Gaussien  $|q_0, p_0, \sigma\rangle$ , eq.(1.6) avec  $q_0 = 0$ ,  $p_0 = 0$  et de largeur

$\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Autrement dit :

$$|0\rangle = (|x_0 = 0, p_0 = 0, \sigma\rangle)$$

Nous avons déjà observé sur les calculs numériques, que lors de l'évolution, un paquet d'onde Gaussien se déplace, mais reste un paquet d'onde Gaussien, de façon complètement analogue à une particule classique. Voir figures 1.6,1.8. Nous allons le démontrer ici.

### 2.2.7.1 Expression algébrique d'un paquet d'onde gaussien

Dans tout ce paragraphe, le paramètre  $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$  qui est la largeur du paquet d'onde est fixé. On omet de le mentionner.

Les coordonnées  $(q, p)$  et  $(Q, P)$  sont reliées par (2.17). On utilisera les coordonnées  $(Q, P)$  sans dimension dans la suite.

**Propriété** *Le paquet d'onde  $|Q, P\rangle$  défini par (1.6), s'obtient à partir de l'état  $|0\rangle$  par action des opérateurs de translation en position  $\hat{T}_Q = \exp(-iQ\hat{P})$  et de translation en impulsion  $\hat{B}_P = \exp(iP\hat{Q})$ , définis par (2.10,2.13) :*

$$|Q, P\rangle = \hat{B}_P \hat{T}_Q |0\rangle$$

*En utilisant la coordonnée complexe :*

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \in \mathbb{C} : \text{ point de l'espace de phase}$$

*on a aussi*

$$|Q, P\rangle = \exp\left(\frac{iPQ}{2}\right) \hat{D}(z)|0\rangle$$

*où*

$$\hat{D}(z) = \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp(z\hat{a}^+ - \bar{z}\hat{a}) \quad (2.29)$$

*est l'opérateur Déplacement sur l'espace de phase, voir figure 2.12.*

Pour simplifier la suite, on utilise la coordonnée complexe  $z \in \mathbb{C}$  qui est plus commode, et l'on pose (on change seulement une phase dans la définition du paquet d'onde) :

$$|z\rangle = \exp\left(-i\frac{PQ}{2}\right) |Q, P\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle \quad (2.30)$$

**Preuve :** on a énoncé cette propriété car elle est intuitive. Elle devrait même servir à définir

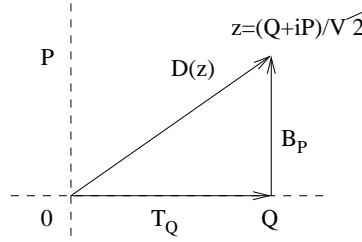


FIG. 2.12 – Schéma du déplacement de  $z = (Q + iP)/\sqrt{2} \in \mathbb{C}$  dans l'espace de phase, engendré par l'opérateur  $\hat{D}(z)$ .

un paquet d'onde Gaussien de position moyenne  $x_0$ , et d'impulsion moyenne  $p_0$ . On calcule :

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{B}_{p_0} \hat{T}_{x_0} | 0 \rangle &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \langle x | \hat{T}_{x_0} | 0 \rangle \\ &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \langle x - x_0 | 0 \rangle \\ &= \exp\left(\frac{i p_0 x}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{\pi \sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x - x_0)^2\right) \\ &= \langle x | x_0, p_0 \rangle \end{aligned}$$

On a utilisé 2.11. Ensuite, on a

$$\exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \hat{B}_p \hat{T}_q = \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp\left(za^+ - \bar{z}a\right)$$

en utilisant la relation (A.4), qui s'applique car  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar Id$ ,  $[a, a^+] = Id$ . ■

### 2.2.7.2 Évolution d'un paquet d'onde gaussien

Supposons que à l'instant  $t = 0$ , la fonction d'onde est un paquet d'onde Gaussien  $|\psi(0)\rangle = |z_0\rangle$  avec  $z_0 \in \mathbb{C}$ , alors à l'instant  $t$ , la fonction d'onde est d'après (2.1) :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |z_0\rangle$$

avec  $\hat{U}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)$ . Or pour l'oscillateur Harmonique, on a  $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \hbar\omega (a^+a + \frac{1}{2}Id) = \hbar\omega \hat{n}$ , avec :

$$\hat{n} = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$$

Alors  $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{n}\omega t)$ .

En mécanique classique, les points tournent dans l'espace de phase avec la vitesse angulaire  $\omega$  (dans le sens indirect). Nous allons voir que la situation est similaire en mécanique quantique, et posons à cet effet :

$$\hat{R}(\theta) = \exp(-i\hat{n}\theta)$$

On va montrer que c'est l'opérateur de rotation dans l'espace de phase, d'un angle  $\theta$ , dans le sens indirect. On a  $\hat{U}(t) = \hat{R}(\omega t)$ .

**Propriété :** On a la relation :

$$\hat{R}(\theta) \hat{D}(z) = \hat{D}(e^{-i\theta} z) \hat{R}(\theta) \tag{2.31}$$

Cette relation entre les déplacements et les rotations est intuitive car elle est aussi vraie en mécanique classique. Voir figure 2.13.

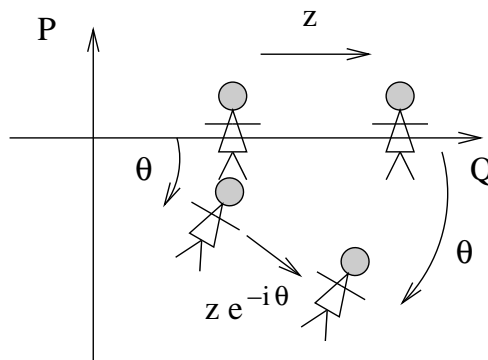


FIG. 2.13 – Cette figure montre que sur le plan  $z \in \mathbb{C}$ , on a  $R(\theta) D(z) = D(e^{-i\theta} z) R(\theta)$ , où  $R$  est une rotation, et  $D(z)$  un déplacement de  $z$ .

**Preuve :** voir exercice page 98. ou de façon plus élégante avec le Lemme de Shur, voir Segal p.129 [Seg95].

**Propriété :**

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |z_0\rangle = \exp\left(-i\frac{1}{2}\omega t\right) |z(t)\rangle$$

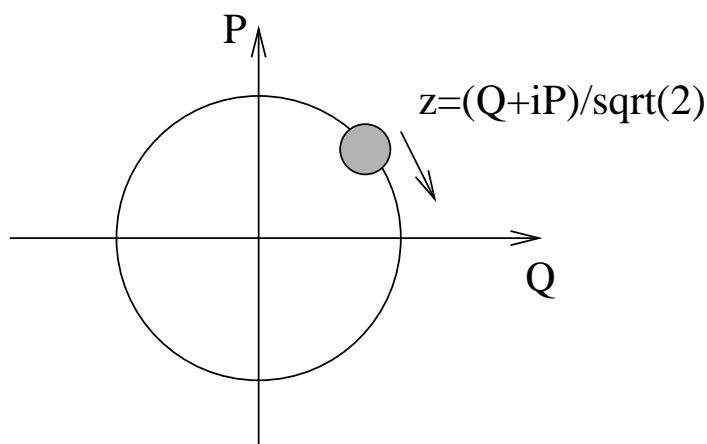
avec

$$z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

montrant que l'état  $|\psi(t)\rangle$  est à tout moment un paquet d'onde  $|z(t)\rangle$  situé à l'emplacement de la particule classique. Le paquet d'onde se déplace donc sur un cercle dans l'espace de phase, sans se déformer. Voir figures 1.6, 1.8 page 28, et figure (2.14).

Pour cette raison, on appelle aussi un paquet d'onde Gaussien, **un état cohérent**, (ou plus précisément état cohérent du groupe de l'oscillateur Harmonique).

**Preuve :** on a  $|\psi(t)\rangle = \hat{R}(\omega t) \hat{D}(z_0) |0\rangle = \hat{D}(e^{-i\omega t} z_0) \hat{R}(\omega t) |0\rangle$ . Or  $\hat{R}(\theta) |0\rangle = e^{-i\theta/2} e^{-ia^+ a \theta} |0\rangle$ . Mais  $a^+ a |0\rangle = 0$ , donc  $e^{-ia^+ a \theta} |0\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} (-ia^+ a \theta)^n |0\rangle = |0\rangle$ . Donc  $|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \hat{D}(e^{-i\omega t} z_0) |0\rangle = e^{-i\omega t/2} |z(t)\rangle$  avec  $z(t) = e^{-i\omega t} z_0$ . ■

FIG. 2.14 – Évolution du paquet d'onde :  $|z(t)\rangle$ , avec  $z(t) = z(0) e^{-i\omega t}$ 

### 2.2.7.3 Algèbre et groupe de Weyl-Heisenberg (\*)

Dans cette section, on présente de façon plus complète (et dans le langage de la théorie des groupes), les opérations de translation dans l'espace de phase utilisées ci-dessus.

On a vu page 75, que les opérateurs  $\hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$ , avec la relation de commutation  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$ , forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 3, appelée **algèbre de Weyl-Heisenberg**, notée  $\mathcal{W}$ . Un élément quelconque de cette algèbre peut s'écrire comme combinaison linéaire :

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} \in \mathcal{W}, \quad (\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{R}^3$$

(Remarquer que  $\hat{A}$  est un opérateur auto-adjoint).

**Remarque :** les trois opérateurs  $a, a^+, \hat{I}$  sont une autre base de cette même algèbre, mais avec des coefficients complexes (donc ce ne sont pas des opérateurs auto-adjoints; ils appartiennent à l'**algèbre de Lie complexifiée**).

**Propriété :** Les opérateurs  $\hat{A} \in \mathcal{W}$  sont les générateurs d'un groupe appelé le **groupe de Weyl-Heisenberg** noté  $W$ . Les éléments de ce groupe (qui sont des opérateurs unitaires) sont obtenus, comme expliqué page 68, en prenant l'exponentielle d'un élément de l'algèbre (d'un générateur) :

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{A}) = \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I}\right)\right) \in W, \quad (2.32)$$

(La propriété que ces opérateurs forment un groupe signifie qu'ils vérifient les 3 règles énoncés page 67. La moins évidente de ces propriétés est la loi composition qui est que si  $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in W$  alors le produit  $\hat{U}_3 = \hat{U}_2\hat{U}_1 \in W$  c'est à dire est aussi de la forme (2.32)).<sup>7</sup>

<sup>7</sup>Cette propriété découle d'un théorème important et très général : les opérateurs obtenus en prenant l'exponentielle des éléments d'une algèbre de Lie d'opérateurs  $\mathcal{G}$  (et aussi multiplication par certains éléments : le centre de  $G$ ), forment un groupe de Lie  $G$ .

De plus l'élément  $\hat{U} \in W$  ci-dessus peut s'écrire aussi :

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \exp(-i\gamma + i\alpha\beta/2) \exp(-i\alpha\hat{Q}) \exp(-i\beta\hat{P}) \\ &= e^{-i\gamma+i\alpha\beta/2} \hat{B}_{-\alpha} \hat{T}_\beta\end{aligned}$$

et s'interprète donc comme un opérateur de translation de  $(\beta, -\alpha)$  dans l'espace de phase (le premier terme est juste une phase multiplicative ; on verra son importance et sa signification à la section (2.3.2)).

**preuve :** Utiliser la relation (A.4), qui s'applique car  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}$ . Pour la dernière formule, on a  $[-i\alpha\hat{Q}, -i\beta\hat{P}] = -i\alpha\beta\hat{I}$  et

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I}\right)\right) = e^{-i\gamma} \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P}\right)\right) \\ &= e^{-i\gamma} e^{i\alpha\beta/2} \exp(-i\alpha\hat{Q}) \exp(-i\beta\hat{P})\end{aligned}$$

Vérifions les trois règles page 67, permettant d'affirmer que les opérateurs de la forme (2.32) forment un groupe de Lie de dimension 3. Tout d'abord la loi de composition : si  $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in W$  alors le produit s'écrit

$$\begin{aligned}\hat{U}_3 &= \hat{U}_2 \hat{U}_1 = e^{-i\gamma_2} \exp\left(-i\left(\alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right)\right) e^{-i\gamma_1} \exp\left(-i\left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P}\right)\right) \\ &= e^{-i\gamma_1 - i\gamma_2} \exp\left(i\left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)\right) \exp\left(-i\left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P} + \alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right)\right)\end{aligned}$$

où on a utilisé (A.4) et  $[\left(\alpha_2\hat{Q} + \beta_2\hat{P}\right), \left(\alpha_1\hat{Q} + \beta_1\hat{P}\right)] = i\left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)\hat{I}$ . Donc  $\hat{U}_3 \in W$ , avec  $\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2$ ,  $\beta_3 = \beta_1 + \beta_2$  et  $\gamma_3 = \gamma_1 + \gamma_2 - \left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)$ . On verra le sens physique de cette phase  $\left(\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2\right)$  à la section (2.3.2).

L'élément neutre est  $\hat{I} \in W$ , et pour  $\hat{U} \in W$ , son inverse est  $\hat{U}^{-1} = \exp\left(-i\left(-\alpha\hat{Q} - \beta\hat{P} - \gamma\hat{I}\right)\right) \in W$ . Donc les opérateurs de la forme (2.32) forment bien un groupe de Lie de dimension 3. ■

**Exercice 15** 1. Montrer que l'opérateur déplacement dans l'espace de phase, noté  $\hat{D}(z)$ , défini en (2.29) (et figure 2.12) appartient au groupe de Weyl-Heisenberg  $W$ , et montrer les expressions équivalentes suivantes pour cet opérateur :

$$\hat{D}(z) = \exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \exp(iP\hat{Q}) \exp(-iQ\hat{P}) = \exp\left(-\frac{iPQ}{2}\right) \hat{B}_p \hat{T}_q \quad (2.33)$$

$$= \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp(za^+ - \bar{z}a) \quad (2.34)$$

$$= \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp(za^+) \exp(-\bar{z}a) \quad (2.35)$$

$$= \exp\left(\frac{|z|^2}{2}\right) \exp(-\bar{z}a) \exp(za^+) \quad (2.36)$$

$$(2.37)$$

2. Dédurre les expressions suivantes pour un paquet d'onde Gaussien :

$$\begin{aligned}
 |x_0, p_0\rangle &= \hat{B}_{p_0} \hat{T}_{x_0} |0\rangle \\
 &= \exp(iP\hat{Q}) \exp(-iQ\hat{P}) |0\rangle \\
 &= \exp\left(i\frac{PQ}{2}\right) \hat{D}(z) |0\rangle \\
 &= \exp\left(i\frac{PQ}{2}\right) \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \exp(za^+) |0\rangle
 \end{aligned}$$

Remarquer que la phase  $\exp(-\frac{iPQ}{2})$  fait intervenir la surface  $S = (QP)/2$  dans l'espace de phase, voir figure 2.12. La notation complexe  $z = (Q + iP)/\sqrt{2} \in \mathbb{C}$  permet d'identifier l'espace de phase avec le plan complexe.

3. Montrer que :

$$a|q_0, p_0\rangle = z|q_0, p_0\rangle$$

ainsi un paquet d'onde Gaussien est vecteur propre de l'opérateur  $a$ , avec la valeur propre  $z \in \mathbb{C}$ . Remarquer que cette valeur propre n'est pas réelle, et que l'opérateur  $a$  n'est pas auto-adjoint.

#### 2.2.7.4 Algèbre et groupe de l'oscillateur Harmonique (\*)

Il s'agit du groupe des déplacements dans l'espace de phase : translations et rotation (quantiques).

Rappel : on pose  $\hat{n} = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$ .

On a vu page 75, que les opérateurs  $\hat{n}, \hat{Q}, \hat{P}, \hat{I}$ , avec les relations de commutation (2.20), forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 4, appelée **algèbre de l'oscillateur Harmonique**, notée  $\mathcal{O}$ . Un élément quelconque de cette algèbre peut s'écrire comme combinaison linéaire :

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n} \in \mathcal{O}, \quad (\alpha, \beta, \gamma, \theta) \in \mathbb{R}^3$$

(Remarquer que  $\hat{A}$  est un opérateur auto-adjoint).

**Remarque :** les trois opérateurs  $a, a^+, \hat{I}, \hat{n}$  sont une autre base de cette même algèbre mais avec des coefficients complexes (donc ce ne sont pas des opérateurs auto-adjoints; ils appartiennent à l'**algèbre de Lie complexifiée**). Dans cette base les relations de commutation sont (2.24).

**Propriété :** Les opérateurs  $\hat{A} \in \mathcal{O}$  sont les générateurs d'un groupe appelé le **groupe de l'oscillateur Harmonique** noté  $\mathcal{O}$ . Les éléments de ce groupe (qui sont des opérateurs unitaires) sont obtenus, comme expliqué page 68, en prenant l'exponentielle d'un élément de l'algèbre (d'un générateur) :

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{A}) = \exp\left(-i\left(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n}\right)\right) \in \mathcal{O}, \quad (2.38)$$

(La propriété que ces opérateurs forment un groupe signifie qu'ils vérifient les 3 règles énoncés page 67. La moins évidente de ces propriétés est la loi composition qui est que si  $\hat{U}_1, \hat{U}_2 \in O$  alors le produit  $\hat{U}_3 = \hat{U}_2 \hat{U}_1 \in O$  c'est à dire est aussi de la forme (2.38)).

De plus l'élément  $\hat{U} \in O$  ci-dessus peut s'écrire aussi :

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \exp(-i\gamma'\hat{I}) \exp(-i\alpha'\hat{Q}) \exp(-i\beta'\hat{P}) \exp(-i\theta\hat{n}) \\ &= e^{-i\gamma'} \hat{B}_{-\alpha'} \hat{T}_{\beta'} \hat{R}_\theta\end{aligned}\tag{2.39}$$

avec (en posant  $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta - i\alpha)$  et de même pour  $z'$ )

$$z' = -i \left( \frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta} \right) z,$$

$$\gamma' = \gamma - \frac{1}{2} \Im(z'^2) + \frac{(\sin\theta - \theta)}{\theta^2} |z|^2$$

L'équation (2.39) s'interprète donc comme un opérateur de rotation de l'angle  $\theta$  suivit d'une translation de  $(\beta', -\alpha')$  dans l'espace de phase (le premier terme est juste une phase multiplicative).

**Preuve :** Dans cette preuve sous forme d'exercice, on donne aussi une méthode utile permettant de calculer des expressions équivalentes de  $\hat{U}$  et généralisable à d'autres groupes (voir [WDG90] pour d'autres exemples). Cette méthode consiste à utiliser un isomorphisme  $\varphi$  de l'algèbre  $\mathcal{O}$  qui nous intéresse vers une algèbre de matrice  $3 \times 3$  (donc simples à utiliser). Cet isomorphisme  $\varphi$  est défini sur les éléments de base (on utilise la base  $\hat{I}, a, a^+, \hat{n}$  où les expressions sont plus simples) :

$$\begin{aligned}\varphi(a) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi(a^+) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \varphi(\hat{I}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi(\hat{n}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Ainsi chaque élément  $\hat{A}$  de l'algèbre  $\mathcal{O}$  est tout simplement représenté par une matrice  $3 \times 3$ .

**Exercice 16** 1. vérifier que  $\varphi$  est un isomorphisme d'algèbres de Lie (i.e. conserve les commutateurs).

2. De cet isomorphisme, on déduit que par exponentiation, l'algèbre des matrices va engendrer un groupe isomorphe au groupe  $O$  qui nous intéresse. Autrement dit par l'opération  $\exp(\cdot)$ , l'isomorphisme  $\varphi$  s'étend au groupe  $O$  par :  $\varphi(\exp(\hat{A})) = \exp(\varphi(\hat{A}))$ , et tout élément du groupe  $O$  est tout simplement représenté par une matrice  $3 \times 3$ . Montrer que :

$$\begin{aligned}\varphi(\exp(-i\alpha'\hat{Q})) &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{-i\alpha'}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{4}\alpha'^2 \\ 0 & 1 & \frac{-i\alpha'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \varphi(\exp(-i\beta'\hat{P})) &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{-\beta'}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{4}\beta'^2 \\ 0 & 1 & \frac{\beta'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{2.40}$$

$$\varphi(\exp(-i\theta'\hat{n})) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta'} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\varphi(\exp(-i\gamma'\hat{I})) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i\gamma' \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\tag{2.41}$$

$$\exp(-i(\alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{I} + \theta\hat{n})) = \begin{pmatrix} 1 & A & B \\ 0 & e^{-i\theta} & C \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\tag{2.42}$$

$$A = i\left(\frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta}\right)\bar{z}, \quad C = -i\left(\frac{1 - e^{-i\theta}}{\theta}\right)z,$$

$$B = -i\gamma - \frac{1}{\theta^2}(1 - i\theta - e^{-i\theta})|z|^2, \quad z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta - i\alpha)\tag{2.43}$$

En déduire (2.39). Cela clot la démonstration ■.

**Exercice** En utilisant la représentation matricielle ci-dessus, montrer (2.31).

**Exercice** On pose  $r, l, \delta, \eta \in \mathbb{C}$ . Montrer les relations suivantes du groupe (complexifié) de l'oscillateur Harmonique :

$$\begin{aligned}& \exp(\delta)\exp(ra^+)\exp(\eta\hat{n})\exp(la) \\ &= \exp(\delta')\exp(l'a)\exp(\eta\hat{n})\exp(r'a^+) \\ &= \exp(\delta')\exp(\eta\hat{n})\exp(la)\exp(r'a^+)\end{aligned}$$

## 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

avec

$$\begin{aligned} r &= r' e^\eta \\ l &= l' e^\eta \\ \delta' &= \delta - r l e^{-\eta} \end{aligned}$$

**Solution :** utiliser la représentation matricielle  $3 \times 3$  ci-dessus.

## 2.3 Correspondances classique-quantique à l'aide du paquet d'onde Gaussien

### 2.3.1 Comptage semi-classique du nombre d'états

Considérons une particule dans un puits de potentiel  $V(x)$ . Dans ce paragraphe nous allons donner une règle très simple, et très utile qui permet d'estimer la position des niveaux d'énergie  $E_n, n = 1, 2, \dots$ , (les valeurs propres de l'opérateur  $\hat{H}$ ).

Pour illustrer cela nous pouvons considérer le potentiel harmonique  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ .

En mécanique classique, l'énergie d'un point  $(x, p)$  de l'espace de phase est :

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

Pour  $E$  donné, appelons  $S(E)$  la surface occupée par les points l'espace de phase qui ont une énergie inférieure à  $E$ . Voir figure 2.15.

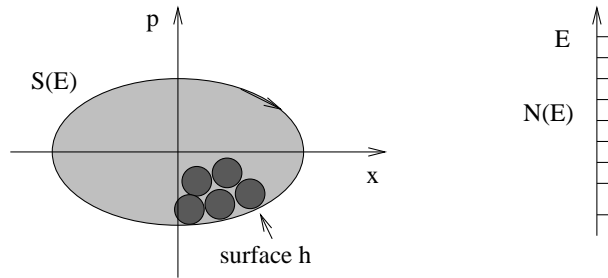


FIG. 2.15 – Pour l'oscillateur harmonique, les points  $(x, p)$  d'énergie inférieure à  $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$  forment une ellipse de surface  $S(E) = \pi \sqrt{\frac{2E}{k}} \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega}$ . On estime le nombre de niveaux d'énergie inférieure à  $E$ , comme étant le nombre de cellules de Planck de surface  $h$  contenue dans  $S(E)$ . Ainsi  $N(E) \simeq S(E)/h$ , ce qui donne  $E \simeq \hbar\omega N$ .

Voici tout d'abord un argument heuristique qui va nous conduire au résultat. Ce résultat, appelé **Formule de Weyl semi-classique**, ou **Formule de Thomas-Fermi** (en physique nucléaire).

En mécanique quantique, nous avons vu qu'un paquet d'onde occupe une certaine surface élémentaire dans l'espace de phase, voir figure (1.24). Cela découle du principe d'incertitude :  $\Delta x \Delta p \simeq h$ . Admettons pour le moment que cette surface élémentaire appelée **cellule de Planck** est exactement  $h$  ( en non  $\hbar/2$  par exemple). On déduit que dans la surface  $S(E)$ , il y a un nombre fini d'états quantiques différents, dont le nombre est estimé à :

$$\boxed{N(E) \simeq \frac{S(E)}{h}} \quad (2.44)$$

$N(E)$  est précisément le nombre de niveaux d'énergie inférieur à  $E$ .

Par exemple pour l'oscillateur Harmonique, on trouve  $N(E) \simeq \frac{E}{\omega \hbar}$ . Cela permet de d'estimer inversement que l'énergie du niveau  $n$  est

$$E_n \simeq \hbar \omega n$$

(C'est presque le résultat exact (2.25), sauf le terme  $1/2$ , ce qui est négligeable si  $n$  est grand).

Comparer la facilité avec laquelle on obtient ici ce résultat par rapport à la compléxité du calcul algébrique exact page 78.

### Remarques :

- La formule (2.44) pour un système à 1 degré de liberté est démontrée dans le paragraphe (2.3.2) page 104.
- L'étude précédente s'adapte très bien pour des problèmes à plusieurs dimensions  $(x, y, z)$ , ou plusieurs particules. Par exemple, pour une particule à trois dimensions, l'espace de phase  $(\vec{x}, \vec{p}) = (x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  est de dimension 6. Les points  $(\vec{x}, \vec{p})$  d'énergie inférieure à  $E$  donné forment un volume noté  $\mathcal{V}(E)$ . Le principe d'incertitude est  $\Delta x \Delta p_x \simeq h$ , et  $\Delta y \Delta p_y \simeq h$ , et  $\Delta z \Delta p_z \simeq h$ , donnant une cellules de Planck élémentaire dans l'espace de phase de volume  $h^3$ . La formule est donc dans ce cas :

$$N(E) \simeq \frac{\mathcal{V}(E)}{h^3} \quad (2.45)$$

Cette formule appelée **formule de Weyl semi-classique** est énoncée et démontrée par exemple dans [dV02] chapitre 2.

- Pour un spectre d'énergies, on appelle **densité de niveaux**, le nombre moyen de niveaux par intervalle d'énergie. C'est à dire :

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} : \quad \text{densité de niveaux}$$

Pour l'oscillateur harmonique, on trouve  $\rho(E) = \frac{1}{\hbar \omega}$ , qui est une constante, montrant que les niveaux d'énergie de l'oscillateur Harmonique sont équidistribués.

## 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

- Il est utile de retenir le résultat sous la forme

$$\boxed{1 \text{ état quantique occupe le volume } h^d \text{ dans l'espace de phase } (x, p) \text{ à } d \text{ degrés de liberté.}} \quad (2.46)$$

- La densité de niveau est une grandeur très importante en physique statistique par exemple, car la densité de niveaux est reliée aux nombres d'états, ou de configurations, que peut prendre un système près d'une énergie donnée  $E$ . Cela est précisément relié à l'entropie statistique microcanonique du système, définie par  $\mathcal{S}(E) = k \log(\rho(E))$ .
- Lorsque  $N(E)$  obtenu est un nombre fini, on déduit que le spectre est discret. Cela est possible si  $S(E)$  est fini. Comme contre exemple, il y a la particule libre, avec  $V = 0$ , et ayant un spectre continu. Dans ce cas, pour  $E > 0$ , la surface dans l'espace de phase  $S(E)$  est infinie, car la particule peut partir à l'infini. On explique ainsi le résultat mentionné dans la figure 1.20.
- La formule de Weil semi-classique (2.46) dépasse le seul cadre quantique, et **s'applique plus généralement à tout problème ondulatoire** dont les équations sont linéaires (ondes quantiques, ondes électromagnétiques classiques, ondes acoustiques,...), dans le régime semi-classique, c'est à dire lorsque la "longueur d'onde est très petite devant la taille du système". Tenant compte de la relation  $p = \hbar k$  entre l'impulsion et le vecteur d'onde, l'énoncé général en mécanique ondulatoire est :

$$1 \text{ état ondulatoire occupe le volume } \Delta\vec{x}\Delta\vec{k} = (2\pi)^d \quad (2.47)$$

$$\text{dans l'espace de phase } (\vec{x}, \vec{k}) \text{ à } d \text{ degrés de liberté} \quad (2.48)$$

On montre diverses applications ci-dessous (spectre du corps noir, équidistribution de l'énergie des ondes sismiques,...)

### Exercice 17 *Electrons dans un métal*

1. Utilisant la loi de Weyl semi-classique (2.44) calculer le nombre d'états quantiques  $N(E)$  ayant une énergie inférieure à  $E$ , pour une particule libre à une dimension entre deux murs de largeur  $L$ .
2. Même question pour une particule libre dans une boîte de volume  $V$ . En déduire la densité d'états  $\rho(E)$ .
3. Application : pour des électrons libres dans un métal comme le sodium, appliquer la règle de remplissage de Fermi, et estimer l'énergie et la vitesse des électrons à la surface de Fermi, sachant que la densité est  $N/V = 2,6 \cdot 10^{22}$  électrons/cm<sup>3</sup>.

### Exercice 18 *Spectre du corps noir : gaz de photons à l'équilibre thermique*

Soit un volume  $V$  fixé, qui contient un gaz de photons à l'équilibre thermodynamique à la température  $T$  fixée. Cela signifie que ces photons sont en contact avec de la matière qui a la température  $T$ , car il n'y a pas d'interaction directe entre les photons.

La distribution d'énergie de ces photons s'appelle la **loi de Planck** ou **spectre du corps noir**. L'allure de ce spectre dépend de la température  $T$ .

Exemples :

- A la surface du Soleil, le magma a la température  $T = 6000^0 K$ .
- Dans un four, on peut avoir  $T = 600^0 K$ . Cf Diu p826-917 pour une barre de fer. Le forgeron a des tables de couleurs, lui donnant la température, à partir de la couleur observée.
- Le rayonnement fossile de l'univers suit la loi de Plank pour  $T = 2,725 K \pm 0.002$ .

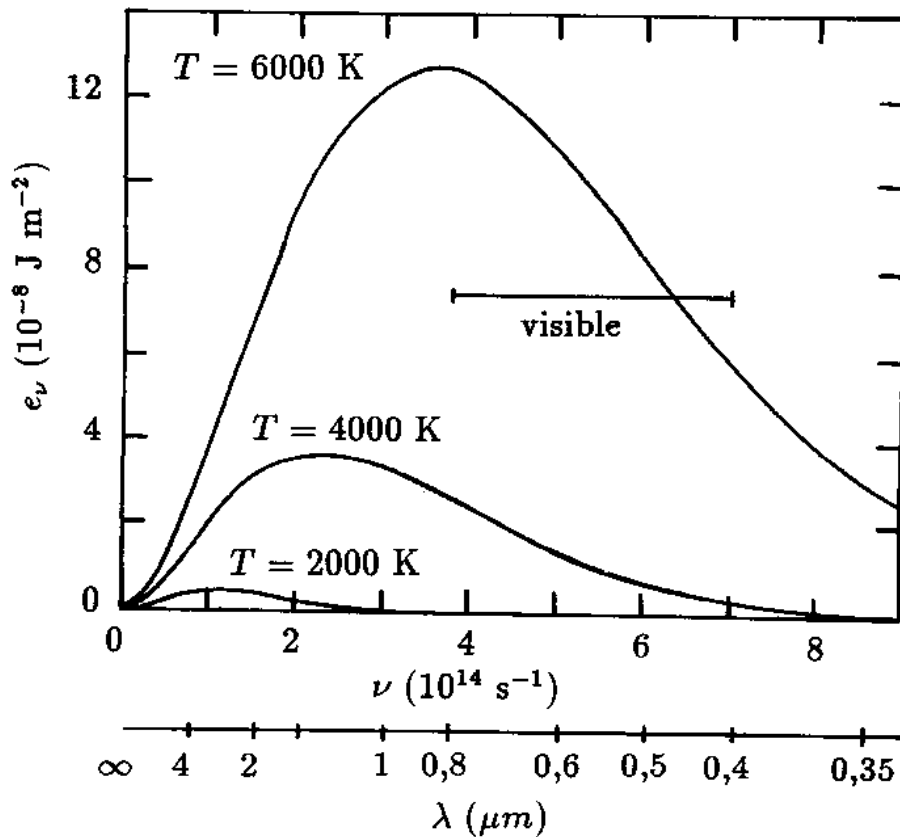
On va établir la loi de Planck qui donne la distribution d'énergie  $u(\nu) d\nu$  (par intervalle de fréquence et par unité de volume) d'un gaz de photons à l'équilibre thermique.

**Questions** Pour un intervalle de fréquence  $\nu \in [\nu; \nu + d\nu]$ ,

1. En utilisant la formule de Weyl sur le comptage d'états ondulatoires (2.47), trouver le nombre de modes électromagnétiques par intervalle de fréquence  $\frac{dn}{d\nu}$ , et dans un volume  $V$ .
2. Considérons un mode de fréquence  $\nu$ , noté (mode). D'après la quantification du champ électromagnétique, un mode de fréquence  $\nu$  ayant  $N$  photons a une énergie  $E_N = h\nu(N + 1/2)$ . De plus la loi de Boltzmann, stipule que cet état à  $N$  photons a la probabilité  $P_N = \frac{1}{Z} \exp(-E_N/(kT))$  d'apparaître. Dédurre la loi de Bose-Einstein sur le remplissage de ce mode, donnant le nombre moyen de photons dans ce mode  $\langle N_{mode} \rangle = \frac{dN}{dn}$ . Dédurre le nombre moyen de photons  $\frac{dN}{d\nu}$  par intervalle de fréquence.
3. En déduire l'énergie contenue par ces photons, notée  $u(\nu)$ , par unité de volume et par intervalle de fréquence ? Tracer l'allure de  $u(\nu)$ , appelée **Loi de Planck** :

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)} : \text{loi de Planck}$$

### 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN



#### Exercice 19 *Equidistribution de l'énergie des ondes sismiques*

La croûte terrestre est solide, et inhomogène. Les ondes sismiques sont des ondes de vibration élastiques dans ce milieu. Leur origine est diverse : tremblements de terre pour les fortes amplitudes (qui sont relativement rare et localisées). Mais il y a toujours un "bruit de fond" d'ondes sismiques dont l'origine est essentiellement par exemple le fracas des vagues sur les côtés océaniques. Sauf près des autoroutes par exemple, où le passage des poids lourds a un effet dominant. Dans la croûte les ondes élastiques ont trois polarisations possibles :

- 2 états de polarisation pour les ondes transverses (**ondes P** comme primaires), qui ont une vitesse  $v_P$
- 1 état de polarisation pour les ondes longitudinales (**ondes S**, comme secondaires), qui ont une vitesse plus faible  $v_S = v_P/1.73$

Dans certaines régions, la croûte terrestre contient de nombreuses inhomogénéités. Dans ces régions les ondes du bruit de fond se comportent de façon très complexe (subissent des réflexions, des interférences...). Il est donc raisonnable de supposer que tous les modes sont excités de façon identique en moyenne. C'est une hypothèse sur l'équidistribution de l'énergie entre les différents modes, semblable à l'hypothèse ergodique en physique statistique.

1. En utilisant la formule de Weyl sur le comptage d'états ondulatoires (2.47), considérer un intervalle de fréquence  $d\nu$  et un volume  $V$ , et calculer le nombre de modes  $dn_P$  d'ondes P et le nombre de modes  $dn_S$  d'ondes S.

2. Avec l'hypothèse d'équidistribution de l'énergie entre ces différents modes, déduire le rapport  $E_P/E_S$  entre l'énergie contenue par les ondes  $P$  et  $S$  dans un intervalle de fréquence  $d\nu$ . Cette prédominance en énergie des ondes  $S$  sur les ondes  $P$  n'a été étudiée que récemment [PRJK] (1995), et observée dans une région du Mexique en 2001 [HTS<sup>+</sup>01], qui forme une cavité propice à la diffusion des ondes. Il faut noter la difficulté qu'il y a de mesurer la polarisation des ondes sismiques.

### Exercice 20 Densité de niveaux semi-classique du spectre de l'atome H

1. Utilisant la loi de Weyl semi-classique (2.44) calculer le nombre d'états quantiques  $N(E)$  ayant une énergie inférieure à  $E$  pour un électron dans l'atome d'hydrogène.
2. Déduire la densité de niveaux semi-classique  $\rho_{sc}(E) = \frac{dN}{dE}$ .
3. Comparer aux résultats exacts connus à partir de l'expression  $E_n = -\frac{\varepsilon_1}{n^2}$  avec  $\varepsilon_1 = \frac{m_e^4}{2\hbar^2} = 13,6$  eV. (Sans oublier la dégénérescence du niveau  $E_n$  qui est  $n^2$ ).

### 2.3.2 Règle de quantification semi-classique

Dans ce paragraphe, on utilise encore le changement de variables  $Q = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} q$ , et  $P = \left(\frac{1}{m\hbar\omega}\right)^{1/2} p$ .

**Exercice 21** 1. Montrer que les translations en position et impulsion ne commutent pas :

$$\hat{T}_q \hat{B}_p = \exp(-iS/\hbar) \hat{B}_p \hat{T}_q$$

où la phase  $S$  est une quantité que l'on interprétera géométriquement. Quand est-ce que les opérateurs  $\hat{T}_q$  et  $\hat{B}_p$  commutent ?

2. Soit deux points  $(q_1, p_1)$  et  $(q_2, p_2)$ . On note

$$\hat{D}_{1,2} = \exp\left(i(P_2 - P_1)(\hat{Q} - Q_1) - i(Q_2 - Q_1)(\hat{P} - P_1)\right)$$

qui est l'opérateur déplacement du point 1 au point 2. Pour trois points consécutifs 1, 2, 3 montrer que

$$\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \exp(iS/\hbar) \hat{D}_{1,3}$$

et interpréter géométriquement  $S$ . Voir figure 2.16.

3. En déduire que pour  $N$  points consécutifs

$$\hat{D}_{N-1,N} \dots \hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \exp(iS/\hbar) \hat{D}_{1,N}.$$

**Exercice 22** 1. Soit une dynamique spécifiée par la fonction de Hamilton classique  $H(q, p)$ . Soit un point  $(q_0, p_0)$  de l'espace de phase. Donner l'expression de la fonction  $H(q, p)$  linéarisée au voisinage de  $(q_0, p_0)$ . Voir figure 2.17.

### 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

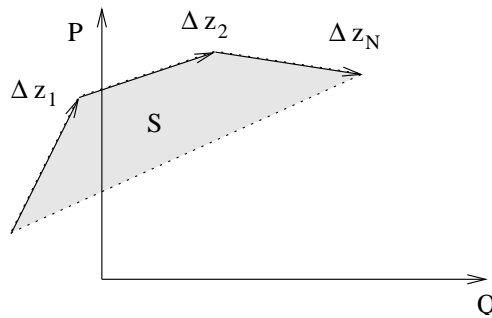


FIG. 2.16 – Composition de déplacements.

2. *Considérons un état cohérent  $|q_0, p_0\rangle$  (paquet d'onde Gaussien). Comme cet état est localisé en  $(q_0, p_0)$ , l'action de l'opérateur  $\hat{H}$  sur  $|q_0, p_0\rangle$  s'obtient approximativement en utilisant l'expression linéarisée de  $\hat{H}$ . Donner ainsi une expression approximative de  $\hat{H}|q_0, p_0\rangle$  ?*
3. *En déduire que  $\hat{U}(\Delta t)|q_0, p_0\rangle \simeq \exp(-iE\Delta t/\hbar)\hat{D}_{0,1}|q_0, p_0\rangle$  où  $\hat{U}(\Delta t) = \exp(-i\hat{H}\Delta t/\hbar)$  est l'opérateur d'évolution sur un temps court  $\Delta t$ , et où  $E$  et  $\hat{D}_{0,1}$  seront précisés ?  
Interprétation ?*
4. *En déduire une expression de l'évolution d'un paquet d'onde sur un temps fini  $\hat{U}(t)|q_0, p_0\rangle$  ? (Utiliser l'exercice précédent)*
5. *Considérons une trajectoire fermée (périodique) d'énergie  $E$ , de période  $T$ , passant par le point  $(q_0, p_0)$ . On a l'idée de construire un état stationnaire localisé sur cette trajectoire, en superposant des états cohérents. Voir figure 2.18. On considère ainsi :*

$$|\phi\rangle = \int_0^T e^{iEt/\hbar} \hat{U}(t)|q_0, p_0\rangle dt$$

*En appliquant l'opérateur  $\hat{U}(t')$  à  $|\phi\rangle$ , montrer que  $|\phi\rangle$  est un état stationnaire (approximatif) d'énergie  $E$  à condition que  $e^{iET/\hbar}\hat{U}(T)|q_0, p_0\rangle = |q_0, p_0\rangle$  ?*

6. *Exprimer cette dernière condition comme une condition sur l'action  $S$  de la trajectoire :*

$$S = n h, \quad n \in \mathbb{N}$$

*appelée **règle de quantification de Bohr-Sommerfeld** : la surface doit contenir un nombre entier de cellules de Planck. Application : pour l'oscillateur Harmonique ?*

#### Remarques

1. Cette construction permet non seulement d'obtenir une formule approchée pour les niveaux d'énergie, mais aussi une expression pour les états stationnaires  $|\phi_n\rangle$ , montrant qu'ils sont concentrés sur une orbite classique spécifique.

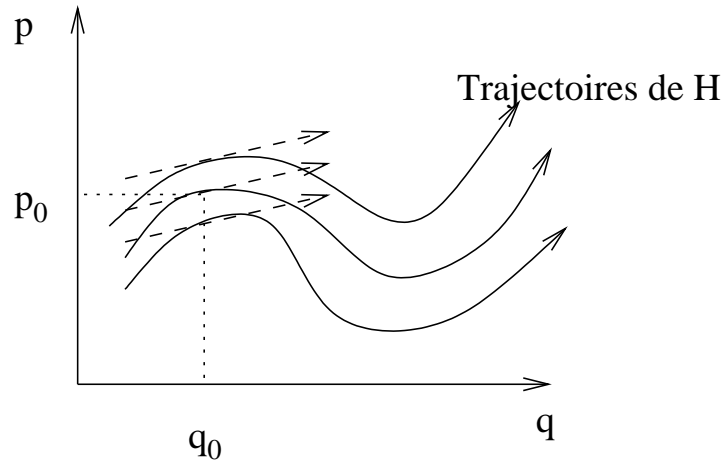


FIG. 2.17 – L'approximation linéaire de  $H(q, p)$  près du point  $(q_0, p_0)$  revient à approximer les trajectoires classiques au voisinage de ce point, par un mouvement translation.

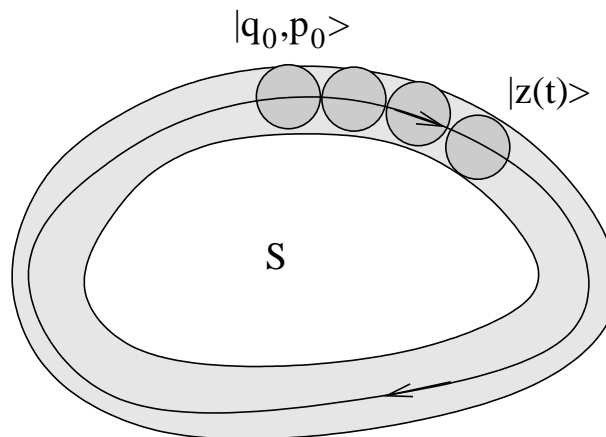


FIG. 2.18 – Construction d'un état stationnaire, en superposant l'évolution d'un état cohérent. On obtient la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld.

## 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIEN

2. On n'obtient pas l'indice  $1/2$  correct du spectre de l'oscillateur Harmonique. Cela est dû à l'approximation linéaire de  $H(q, p)$ . Une approximation quadratique l'aurait donné, et montré que c'est un indice "topologique" appelé **indice de Maslov**.
3. Pour des problèmes à plusieurs dimensions, cette construction n'est pas assez précise pour donner les états stationnaires. Elle peut s'appliquer cependant aux orbites périodiques, et donne une formule semi-classique très intéressante pour la densité de niveaux, appelée **formule de Gutzwiller**, ou **formule des traces semi-classique**. Voir [Gut91]. La formule de Weyl énoncée ci-dessus constitue le premier ordre de cette formule, et se démontre autrement.
4. On a choisit arbitrairement de mettre la phase  $e^{iEt/\hbar}$  dans la construction de  $|\phi\rangle$ . Ce choix peut se justifier, car c'est celui qui donne un état stationnaire le plus concentré sur la trajectoire. (interférences constructives entre les paquets d'ondes). Cela a un rapport direct avec la phase géométrique, ou phase de Berry. Exercice : le montrer. (L'opérateur de déplacement  $\hat{D}$  ci-dessus réalise "un transport parallèle").
5. Finalement, tout cela est lié au fait que  $\hat{T}_q$  et  $\hat{T}_p$  ne commutent pas. cette observation se généralise, et donne lieu à la théorie de "**la quantification géométrique**". Voir [Woo92], [F. 00].

### 2.3.3 Représentation quantique dans l'espace de phase

Rappelons ce qu'est "la représentation en position" d'un état quantique mentionné page 43.  $|x\rangle$  est un état de position car bien localisé à la position  $x$ . On a la relation de fermeture  $\hat{I} = \int dx |x\rangle\langle x|$  qui montre que tout état quantique se décompose comme superposition de tels états :  $|\psi\rangle = \int dx |x\rangle (\langle x|\psi\rangle)$ . Les coefficients de cette décomposition sont  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ , qui la fonction d'onde de l'état quantique.

Nous avons aussi vu que les choses sont analogues pour la représentation en impulsion, donnant une fonction  $\tilde{\psi}(p)$ .

En suivant cette même démarche, nous allons voir que l'on peut naturellement définir une **représentation dans l'espace de phase**, i.e. en variables  $(x, p)$  simultanément, appelée aussi **représentation de Husimi**. L'intérêt de cette représentation est grand. Il se devine lorsque l'on sait que la mécanique classique (de Hamilton) qui est une limite (couramment utilisée) de la mécanique pour des actions grandes ( $S/\hbar \gg 1$ ) se formule naturellement dans l'espace de phase  $(x, p)$ , et que de nombreux phénomènes de mécanique classique n'ont une explication claire que lorsqu'ils sont explicités dans l'espace de phase (comme les structures des trajectoires pour les systèmes réguliers, ou chaotiques, voir [Arn76]) ; il en est de même pour de nombreux phénomènes quantiques, comme entrevu ci-dessus.

Le paragraphe (1.3.2), présentant l'évolution de paquets d'ondes a clairement montré l'avantage de la représentation de Husimi d'un état quantique par rapport à la représentation en position  $\psi(x)$  : elle permet de comprendre l'évolution en terme classique, sur une durée plus longue. Elle permet aussi de mieux comprendre la structure des états stationnaires.

La représentation de Husimi dans l'espace des phases présentée ci-dessous, permet de donner un sens précis aux représentations schématiques dans l'espace de phase, faites ci-dessus à propos de l'évolution d'un paquet d'onde, figure (2.14), ou de la distribution d'un état stationnaire quelconque, figure (2.18).

### 2.3.3.1 Relation de Fermeture par les états cohérents

Nous avons vu en eq.(1.26), que le paquet d'onde  $|q, p, \sigma\rangle$  défini par eq.(1.6), est "assez bien localisé" à la fois à la position  $x$  et à l'impulsion  $p$ , avec les incertitudes respectives  $\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$ ,  $\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma}$ . Une famille de paquets d'ondes  $|q, p, \sigma\rangle$  avec  $\sigma$  fixé, et  $(q, p) \in \mathbb{R}^2$  serait donc un bon candidat pour définir une représentation dans l'espace de phase. Il reste à vérifier que l'on a une relation de fermeture.

Dans la suite, on considère que le paramètre  $\sigma$  est fixé, et on l'omet dans les notations. Pour simplifier, on utilise les coordonnées sans dimension  $Q, P$  eq.(2.17) et la coordonnée complexe

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \in \mathbb{C} : \quad \text{point de l'espace de phase} \\ Q &= \frac{q}{\sigma}, \quad P = \frac{\sigma}{\hbar} p \end{aligned}$$

On prendra l'expression  $|z\rangle$  du paquet d'onde définie page (91) :

$$\begin{aligned} |x, p, \sigma\rangle &= \exp\left(\frac{iPQ}{2}\right) |z\rangle \\ |z\rangle &= D(z)|0\rangle \\ D(z) &= \exp\left(iP\hat{Q} - iQ\hat{P}\right) = \exp(z\hat{a}^\dagger - \bar{z}\hat{a}) \end{aligned}$$

On utilisera aussi si besoin, les expressions équivalentes (2.33) pour  $\hat{D}(z)$ .

**Exercice 23** Montrer que pour  $\sigma$  fixé, on a la relation de fermeture :

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp |x, p, \sigma\rangle \langle x, p, \sigma|$$

### 2.3.3.2 Représentation de Husimi d'un état quantique

**Définition :** Pour un état quantique  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  on associe la fonction suivante sur l'espace de phase, à valeurs complexes, appelée **distribution de Bargmann** de  $|\psi\rangle$  :

$$\text{Barg}_\psi(x, p) = \langle z|\psi\rangle$$

on associe aussi la fonction positive sur l'espace de phase, appelée **distribution de Husimi** de  $|\psi\rangle$  :

### 2.3. CORRESPONDANCES CLASSIQUE-QUANTIQUE À L'AIDE DU PAQUET D'ONDE GAUSSIENNE

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

De la relation de fermeture, on déduit que **la distribution de Bargmann**  $Barg_\psi(x, p)$  **caractérise l'état**  $|\psi\rangle$ .

**preuve :** si  $\forall x, p \text{ } Barg_\psi(x, p) = Barg_\phi(x, p)$ , alors  $|\psi\rangle = \iint dx dp |z\rangle Barg_\psi(x, p) = \iint dx dp |z\rangle Barg_\phi(x, p) = |\phi\rangle$ . ■

Cela est moins clair pour la distribution de Husimi car il semble que l'on perd l'information sur la phase en chaque point  $(x, p)$ . Pourtant il n'en est rien et **la distribution de Husimi caractérise l'état**  $|\psi\rangle$  **à une phase globale près**.

**preuve :** On a  $Barg_\psi(x, p) e^{|z|^2/2} = e^{|z|^2/2} \langle z|\psi\rangle = \langle 0|e^{\bar{z}a}|\psi\rangle$  qui est donc analytique en  $\bar{z}$ . Il résulte de la théorie des fonctions à variables complexes que cette fonction est déterminée (à une phase près) par son module seulement. ■

La norme de l'état  $|\psi\rangle$  s'obtient à partir de la distribution de Husimi par :

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} Hus_\psi(x, p)$$

**preuve :** on utilise simplement la relation de fermeture :  $\langle \psi|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} \langle \psi|qp\rangle \langle qp|\psi\rangle = \int \frac{dx dp}{h} Hus_\psi(x, p)$ . ■

#### 2.3.3.3 Exemples simples et importants

**Onde plane** si  $|\psi\rangle = |p_0\rangle$  est une onde plane d'impulsion  $p_0$ , alors

$$Barg_{|p_0\rangle}(x, p) = \langle z|p_0\rangle = \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(i\frac{x_0 p_0}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{x_0 p}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

et donc

$$Hus_{|p_0\rangle}(x, p) = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

qui est une ligne en  $p = p_0$  qui a une forme transversale Gaussienne, de largeur  $\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}$ . C'est un résultat attendu. Voir figure 2.19.

**Etat de position** si  $|\psi\rangle = |x_0\rangle$  est un état de position en  $x_0$ , alors

$$Barg_{|x_0\rangle}(x, p) = \langle z|x_0\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-i\frac{x_0 p_0}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

(d'après (1.6), et donc

$$Hus_{|x_0\rangle}(x, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{\sigma^2}\right)$$

qui est une ligne en  $x = x_0$  qui a une forme transversale Gaussienne, de largeur  $\Delta x = \sigma$ . C'est un résultat attendu. Voir figure 2.19.

Remarquer que  $Hus_{|x_0\rangle}(x, p)$  et  $Hus_{|p_0\rangle}(x, p)$  ne sont pas normalisables (norme infinie); cela est du au fait que  $|p_0\rangle, |x_0\rangle \notin L^2(\mathbb{R})$ .

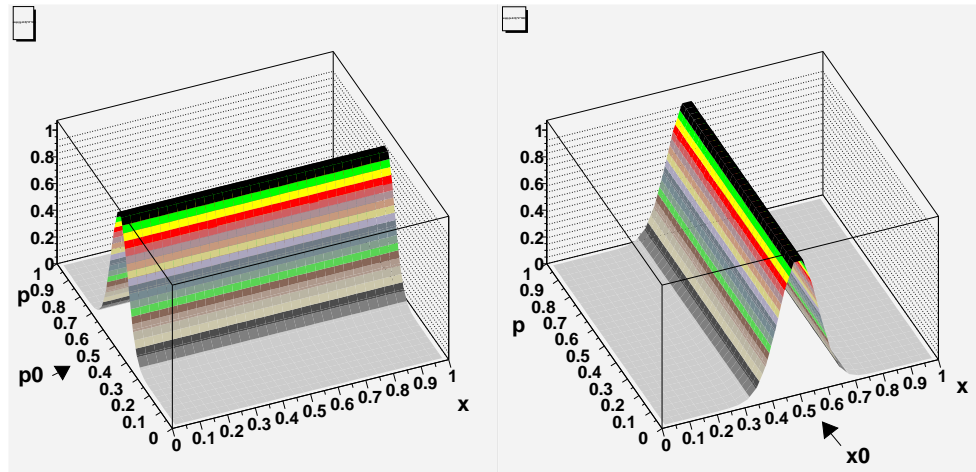


FIG. 2.19 – Distributions de Husimi  $Hus_{p_0}(x, p)$  et  $Hus_{x_0}(x, p)$  des états  $|p_0\rangle$  et  $|x_0\rangle$  dans l'espace de phase. Les unités sont arbitraires

**Etat cohérent** si  $|\psi\rangle = |x_0, p_0\rangle$  est un paquet d'onde Gaussien de position moyenne  $x_0$  et impulsion moyenne  $p_0$ , alors

$$Barg_{|x_0, p_0\rangle}(x, p) = \langle z|z_0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z-z_0|^2} e^{i\Im(\bar{z}z_0)}$$

et donc

$$\begin{aligned} Hus_{|x_0, p_0\rangle}(x, p) &= e^{-|z-z_0|^2} = e^{-\frac{1}{2}(Q-Q_0)^2 - \frac{1}{2}(P-P_0)^2} \\ &= e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-x_0)^2 - \frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2} \end{aligned}$$

qui est une gaussienne centrée en  $(x_0, p_0)$  de largeurs  $\Delta x = \sigma$ ,  $\Delta p = \frac{\hbar}{\sigma}$ . Voir figure 2.20. C'est un résultat attendu, qui donne un sens rigoureux à l'image (1.24).

**preuve :** on utilise (2.33), et  $e^{\bar{z}a} e^{z_0 a^\dagger} = e^{\bar{z}z_0} e^{z_0 a^\dagger} e^{\bar{z}a}$ . On a

$$\langle z|z_0\rangle = \langle 0|e^{\bar{z}a} e^{z_0 a^\dagger}|0\rangle e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} = e^{\bar{z}z_0} \langle 0|e^{z_0 a^\dagger} e^{\bar{z}a}|0\rangle e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} = e^{\bar{z}z_0} e^{-\frac{|z_0|^2}{2}} e^{-\frac{|z|^2}{2}}$$

soit  $\langle z|z_0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z-z_0|^2} e^{i\Im(\bar{z}z_0)}$  ■.

**Etat stationnaire de l'oscillateur Harmonique** Si  $|\psi\rangle = |n\rangle$  état propre de l'oscillateur harmonique (voir page 78), alors

$$Barg_{|n\rangle}(x, p) = \langle z|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \bar{z}^n$$

et donc en coordonnées polaires  $z = \rho e^{i\theta}$

$$Hus_{|n\rangle}(x, p) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \rho^{2n} e^{-\rho^2}$$

qui est une distribution dont le maximum est sur le cercle  $\rho_{max} = \sqrt{n}$ . Voir figure 2.20. Ce cercle coïncide avec la trajectoire classique d'énergie  $E_n^{class} = \hbar\omega n$ , comme observé numériquement sur la figure (1.9). (Remarquer qu'il y a un petit décalage par rapport à l'énergie du niveau  $n : E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$ , mais ce décalage est plus petit que la largeur de la distribution).

**preuve :**  $\langle z|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \langle 0|e^{\bar{z}a}|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n' \geq 0} \frac{1}{n'!} \langle 0|(\bar{z}a)^{n'}|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n' \geq 0} \frac{1}{\sqrt{n'!}} \bar{z}^{n'} \langle n'|n\rangle = e^{-|z|^2/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \bar{z}^n$ .

Le maximum de  $Hus$  et sa largeur se trouvent en dérivant par rapport à  $\rho$ . Ensuite, le hamiltonien classique  $H = \frac{\hbar\omega}{2} (P^2 + Q^2) = \hbar\omega |z|^2 = \hbar\omega \rho^2$  ■

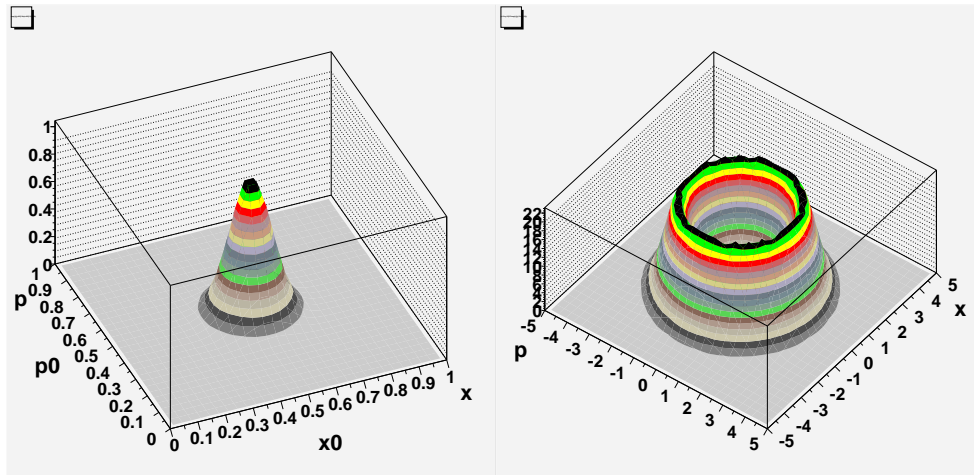


FIG. 2.20 – Distributions de Husimi  $Hus_{|x_0p_0\rangle}(x, p)$  et  $Hus_{|n\rangle}(x, p)$  des états  $|x_0p_0\rangle$  et  $|n\rangle$  dans l'espace de phase. Les unités sont arbitraires

## 2.4 Conseils de Lecture

– Cohen-Tannoudji [CBF], chapitre V.

**Pour approfondir :**

- **L'application du comptage d'états à la physique statistique :**
  - Diu et al. [DGLR89],
- **Pour approfondir les aspects mathématiques,**
  - Sur la théorie des groupes : Cours de Segal dans [Seg95]. Livre de Bacry [Bac].
  - Sur les états cohérents (paquets d'ondes) en physique : [WDG90]

## 2.5 Solution des exercices

**Exercice 12 page 69** on a  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = \left(\hat{I} - i\frac{t}{\hbar}\hat{H} - \frac{t^2}{2\hbar^2}\hat{H}^2 + o(t^2)\right)|\psi(0)\rangle$ .

Alors  $\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle = 1 - i\frac{t}{\hbar}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \frac{t^2}{2\hbar^2}\langle\psi|\hat{H}^2|\psi\rangle + o(t^2)$  et donc

$$\begin{aligned} |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 &= \left(1 - \frac{t^2}{2\hbar^2}\langle\hat{H}^2\rangle\right)^2 + \left(\frac{t}{\hbar}\langle\hat{H}\rangle\right)^2 + o(t^2) = 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\hat{H}^2\rangle + \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\hat{H}\rangle^2 + o(t^2) \\ &= 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}\left(\langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2\right) + o(t^2) = 1 - \frac{t^2}{\hbar^2}(\Delta E)^2 + o(t^2) \end{aligned}$$

**Exercice 13 page 70** par définition,  $\langle x|\hat{T}_\lambda|\psi\rangle = \langle x - \lambda|\psi\rangle$ ,  $\forall |\psi\rangle$ . Donc  $\langle x|\hat{T}_\lambda = \langle x - \lambda|$ . Donc  $\hat{T}_\lambda^+|x\rangle = |x - \lambda\rangle$ . Ensuite,  $\hat{T}_\lambda$  est un opérateur unitaire, et  $\hat{T}_\lambda^+ = \hat{T}_\lambda^{-1} = \hat{T}_{-\lambda}$ . donnant  $\hat{T}_{-\lambda}|x\rangle = |x - \lambda\rangle$ .

**Exercice 14 page 89**

1. On a  $\lambda_x = 2L/a$ ,  $\lambda_y = 2L/b$ ,  $\lambda_z = 2L/d$ , avec  $a, b, d \in \mathbb{N}^*$  entiers. Donc  $k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = \frac{\pi}{L}a$ , etc.... La fréquence de ce mode  $(a, b, d)$  est  $\omega_{a,b,d} = ck = c(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} = \pi c \left(\frac{a^2}{L^2} + \frac{b^2}{L^2} + \frac{d^2}{L^2}\right)^{1/2}$ . L'énergie du vide quantique dans la boîte est alors (en pensant aux deux états de polarisations possibles)

$$\mathcal{E}(l) = 2 \sum_{a,b,d>0} \frac{1}{2} \hbar \omega_{a,b,d}$$

La divergence de  $\mathcal{E}(l)$  est due aux hautes fréquences  $\omega$ ; appelée **divergence ultraviolette**.

2. On a

$$\mathcal{E}(l) = \hbar \sum_{a,b,d>0} \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

et  $\omega_{a,b,d} = \frac{\pi c}{L} \left(\left(\frac{l}{L}\right)^2 (a^2 + b^2) + d^2\right)^{1/2}$ . Comme  $(l/L) \ll 1$ , on peut traiter  $a, b$  comme des variables continues dans la somme (approximation de Riemann d'une intégrale), et donc

$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar \sum_{d>0} \int da db \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

Ensuite, on utilise des coordonnées polaires  $(a, b) \rightarrow (u, \theta)$ , c'est à dire  $(a^2 + b^2) = u^2$  et  $dad b = u du d\theta$ , et  $\theta = 0 \rightarrow \pi/2$ . Alors

$$\mathcal{E}(l) \simeq \hbar \left(\frac{\pi}{2}\right) \sum_{d>0} \int_0^\infty du u \omega e^{-\omega/\omega_c}$$

Finalement, le changement de variable  $u \rightarrow \omega = \frac{\pi c}{l} \left( \left( \frac{l}{L} \right)^2 u^2 + d^2 \right)^{1/2}$ , donne  $\omega d\omega = u du \left( \frac{\pi c}{L} \right)^2$  et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(l) &\simeq \hbar \left( \frac{\pi}{2} \right) \left( \frac{L}{\pi c} \right)^2 \sum_{d>0} \int_{\omega_0}^{\infty} d\omega \omega^2 e^{-\omega/\omega_c} \\ &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \sum_{d>0} \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_{\omega_0}^{\infty} d\omega e^{-\alpha\omega} \\ &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \sum_{d>0} \frac{d^2}{d\alpha^2} \left( \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha\omega_0} \right) \end{aligned}$$

avec  $\omega_0 = \frac{\pi c}{l}d$ , et  $\alpha = 1/\omega_c$ . Ensuite  $\sum_{d>0} e^{-\alpha\omega_0} = \sum_{d>0} \left( e^{-\alpha \frac{\pi c}{l}} \right)^d = \frac{e^{-\alpha \frac{\pi c}{l}}}{1 - e^{-\alpha \frac{\pi c}{l}}} = \frac{1}{e^{\alpha \frac{\pi c}{l}} - 1}$  (suite géométrique). Donc

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar L^2}{2\pi c^2} \frac{d^2}{d\alpha^2} \left( \frac{1}{\alpha} \frac{1}{e^{\alpha \frac{\pi c}{l}} - 1} \right) \\ &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2l^3} \frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{1}{x(e^x - 1)} \right) \end{aligned}$$

avec  $x = \alpha \pi c / l = \pi c / (\omega_c l)$ .

3. Ensuite

$$\frac{1}{x(e^x - 1)} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{12} - \frac{1}{30 \times 24} x^2 + O(x^3)$$

donc

$$\frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{1}{x(e^x - 1)} \right) = \frac{6}{x^4} - \frac{1}{x^3} - \frac{1}{15 \times 24} + O(x)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(l) &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2l^3} \left( 6 \left( \frac{\omega_c l}{\pi c} \right)^4 - \left( \frac{\omega_c l}{\pi c} \right)^3 - \frac{1}{15 \times 24} + O(1/\omega_c) \right) \\ &= \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left( 6 \left( \frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 l - \left( \frac{\omega_c}{\pi c} \right)^3 - \frac{1}{15 \times 24} \frac{1}{l^3} + O(1/\omega_c) \right) \end{aligned}$$

4. On a

$$\begin{aligned} U(l) &= \mathcal{E}(l) + \mathcal{E}(L-l) = \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left( 6 \left( \frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 L - \frac{1}{15 \times 24} \left( \frac{1}{l^3} + \frac{1}{(L-l)^3} \right) + \dots \right) \\ &\simeq \frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left( 6 \left( \frac{\omega_c}{\pi c} \right)^4 L - \frac{1}{15 \times 24} \left( \frac{1}{l^3} \right) + \dots \right), \end{aligned}$$

pour  $L \gg l$ . Donc  $F_{Casimir}(l) = -\frac{dU}{dl} = -\frac{\hbar c \pi^2 L^2}{2} \left( \frac{3}{15 \times 24} \frac{1}{l^4} + \dots \right)$  et pour  $\omega_c \rightarrow \infty$ , les termes suivants s'annulent, donc

$$F_{Casimir}(l) = -\frac{\hbar c \pi^2 L^2}{240} \frac{1}{l^4}$$

**Exercice 15 page 95**

1. Utiliser la relation (A.4), qui s'applique car  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar Id$ ,  $[a, a^+] = Id$ .
2. Utiliser les expressions (2.33), et pour montrer la dernière ligne, le fait que  $a|0\rangle = 0$ , donc  $\exp(-\bar{z}a)|0\rangle = \sum_n \frac{(-\bar{z}a)^n}{n!}|0\rangle = |0\rangle$ .
3. Calculer  $d(e^{\alpha a}|qp\rangle)/d\alpha$  en  $\alpha = 0$ .

**Exercice 16 page 97**

1. On vérifie que cette représentation par des matrices  $3 \times 3$  vérifie bien les règles (2.24). Par exemple, on calcule :  $[\varphi(a), \varphi(a^+)] = \varphi(a)\varphi(a^+) - \varphi(a^+)\varphi(a) = \dots = \varphi(\hat{I})$ ; etc...

2. On a  $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+)$ , donc  $\varphi(-i\alpha'\hat{Q}) = (-i\alpha')\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ , et  $\varphi(\exp(-i\alpha'\hat{Q})) = \exp(\varphi(-i\alpha'\hat{Q})) = \begin{pmatrix} 1 & (-i\alpha')/\sqrt{2} & -\alpha'^2/4 \\ 0 & 1 & (-i\alpha')/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Pour cette dernière égalité,

on utilise le fait que, posant  $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ , on a  $M^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$  et

$M^n = 0$  pour  $n > 2$ . Donc  $\exp(\lambda M) = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!}(\lambda M)^n = M^0 + \lambda M + \frac{1}{2}\lambda^2 M^2 = \begin{pmatrix} 1 & \lambda & \lambda^2/2 \\ 0 & 1 & \lambda \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ . On procède de même pour les quatre autres expressions. Finalement,

on calcule le produit de matrices,<sup>8</sup> :

$$\begin{aligned} \varphi(\exp(-i\gamma'\hat{I}))\varphi(\exp(-i\alpha'\hat{Q}))\varphi(\exp(-i\beta'\hat{P}))\varphi(\exp(-i\theta\hat{n})) \\ = \begin{pmatrix} 1 & A' & B' \\ 0 & e^{-i\theta} & C' \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$A' = -\bar{z}'e^{-i\theta}, \quad B' = -i\gamma' + \frac{1}{2}|z'|^2 - \frac{i}{2}\Im(z'^2), \quad C' = z'$$

que l'on identifie avec (2.42), pour obtenir (2.39).

**Exercice 17 page 101**  $E_F \simeq 3eV$ ,  $V_F \simeq 10^6 m/s$ .

<sup>8</sup>Pour ces produits de matrices, ainsi que ces exponentielles de matrices, on aura intérêt à utiliser un logiciel de calcul formel (comme Maple, Mathematica ou Xcas qui est un logiciel gratuit et libre).

**Exercice 18 page 101**

1. Un mode occupe  $\Delta^3 \vec{x} \Delta^3 \vec{k} = (2\pi)^3$ . Considérons un intervalle de fréquence  $d\nu$ . Cela correspond à  $dk = \frac{2\pi}{c} d\nu$ , et un volume dans l'espace  $\vec{k}$  de  $\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$  (volume de la sphère de rayon  $k$  et épaisseur  $dk$ ). Donc dans un volume  $V$  et un intervalle de fréquence  $d\nu = \frac{c}{2\pi} dk$  contiennent  $dn = 2(V \mathcal{V}_k) / (2\pi)^3$  modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode (droite/gauche). Donc

$$\frac{dn}{d\nu} = \frac{8\pi V \nu^2}{c^3} d\nu$$

2. On a  $\langle N_{mode} \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} P_N N$ , avec  $P_N = \frac{1}{Z} \exp(-E_N/kT)$ . Comme  $1 = \sum_N P_N$ , on déduit

$$Z = \sum_N \exp(-E_N/kT) = e^{-\alpha/2} \sum_{N \geq 0} e^{-\alpha N} = e^{-\alpha/2} \frac{1}{1 - e^{-\alpha}}$$

avec  $\alpha = (\hbar\omega) / kT$ . Alors

$$\begin{aligned} \langle N_{mode} \rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} P_N N \\ &= \frac{1}{Z} \sum_N N \exp(-\alpha(N + 1/2)) \\ &= \frac{1}{Z} \left( -\frac{d}{d\alpha} Z \right) = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} \\ &= \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1} \end{aligned}$$

appelée **distribution de Bose-Einstein**. Ensuite

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{dN}{dn} \frac{dn}{d\nu} = \langle N_{mode} \rangle \frac{dn}{d\nu}$$

$$3. u(\nu) = \frac{1}{V} (h\nu) \frac{dN}{d\nu} = \dots = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)}$$

**Exercice 19 page 103**

1. Un mode occupe  $\Delta^3 \vec{x} \Delta^3 \vec{k} = (2\pi)^3$ . Considérons un intervalle de fréquence  $d\nu$ . Pour les ondes S, cela correspond à  $dk = \frac{2\pi}{v_s} d\nu$ , et un volume dans l'espace  $\vec{k}$  de  $\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$  (volume de la sphère de rayon  $k$  et épaisseur  $dk$ ). Donc dans un volume  $V$  et un intervalle de fréquence  $d\nu = \frac{v_s}{2\pi} dk$  contiennent  $dn_S = 2(V \mathcal{V}_k) / (2\pi)^3$  modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode. Donc

$$dn_S = \frac{2(4\pi)V\nu^2 d\nu}{v_s^3}$$

de même pour les ondes P :

$$dn_P = \frac{(4\pi) V \nu^2 d\nu}{v_P^3}$$

2. D'après l'hypothèse d'équidistribution entre les modes, le rapport d'énergie est égal au rapport du nombre de modes :

$$\frac{E_P}{E_S} = \frac{dn_P}{dn_S} = \frac{1}{2} \left( \frac{v_S}{v_P} \right)^3 = \frac{1}{2(1,73)^3} \simeq \frac{1}{10}$$

**Exercice 21 page 104**

- On a  $\hat{T}_q \hat{B}_p = \exp(-iq\hat{p}/\hbar) \exp(ip\hat{x}/\hbar)$ . Utiliser (A.4), avec  $A = -iq\hat{p}/\hbar$ ,  $B = ip\hat{x}/\hbar$ ,  $[A, B] = (qp/\hbar^2)(-\hbar)$  donnant  $e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]}$  donc  $\hat{T}_q \hat{B}_p = e^{-iS/\hbar} \hat{B}_p \hat{T}_q$ , avec  $S = qp$  qui est la surface du carré dans l'espace de phase concerné par les translations. En terme de mécanique analytique, c'est une action. Les opérateurs commutent lorsque  $S = nh$ ,  $n \in \mathbb{N}$  c'est à dire lorsque la surface contient un nombre entier de cellules de Planck.
- Utiliser (A.4) :  $e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]}$ . On a  $B = i(P_2 - P_1) (\hat{Q} - Q_1) - i(Q_2 - Q_1) (\hat{P} - P_1)$ ,  $A = i(P_3 - P_2) (\hat{Q} - Q_2) - i(Q_3 - Q_2) (\hat{P} - P_2)$ , et  $\frac{1}{2}[A, B] = -\frac{i}{2}(P_2 - P_1)(Q_3 - Q_2) + \frac{i}{2}(Q_2 - Q_1)(P_3 - P_2) = -\frac{i}{2} \vec{23} \wedge \vec{12} = -i S/\hbar$  : produit vectoriel et  $S$  est la surface hachurée (dans les unités  $q, p$ ). On a  $S/\hbar = \frac{1}{2} (P_2 Q_3 - P_1 Q_3 + P_1 Q_2 - Q_2 P_3 + Q_1 P_3 - Q_1 P_2)$ . On a donc

$$\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = e^{-iS/\hbar} \exp(A + B) = e^{-iS/\hbar} \exp\left(i(P_3 - P_1)\hat{Q} - i(Q_3 - Q_1)\hat{P}\right) \exp\left(i(-P_2 Q_1 + Q_2 P_1 - P_3 Q_2 + Q_3 P_2)\right)$$

. Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \hat{D}_{1,3} &= \exp\left(i(P_3 - P_1) (\hat{Q} - Q_1) - i(Q_3 - Q_1) (\hat{P} - P_1)\right) \\ &= \exp\left(i(P_3 - P_1)\hat{Q} - i(Q_3 - Q_1)\hat{P}\right) \exp\left(i(-P_3 Q_1 + Q_3 P_1)\right) \end{aligned}$$

. Finalement,  $\hat{D}_{2,3} \hat{D}_{1,2} = \hat{D}_{1,3} e^{-iS/\hbar} e^{i2S/\hbar} = e^{+iS/\hbar} \hat{D}_{1,3}$ .

3. Par récurrence.

**Exercice 22 page 104**

- $H(q, p) = H(q_0, p_0) + (q - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (p - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p} + o(\Delta q, \Delta p)$ , avec  $\Delta q = q - q_0$ ,  $\Delta p = p - p_0$ .
- $\hat{H}|q_0, p_0\rangle \simeq \left( H(q_0, p_0) Id + (\hat{q} - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (\hat{p} - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p} \right) |q_0, p_0\rangle$ . (On a remplacé  $q$  et  $p$  par les  $\hat{q}$  et  $\hat{p}$ ).

3. Ainsi

$$\begin{aligned} \hat{U}(\Delta t)|q_0, p_0 \rangle &= \exp\left(-i\hat{H}\Delta t/\hbar\right)|q_0, p_0 \rangle \\ &\simeq \exp\left(-i\left(H(q, p)Id + (\hat{q} - q_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + (\hat{p} - p_0) \cdot \frac{\partial H}{\partial p}\right)\Delta t/\hbar\right)|q_0, p_0 \rangle \end{aligned}$$

donc  $\hat{U}(\Delta t)|q_0, p_0 \rangle = \exp(-iE\Delta t/\hbar)\hat{D}_{0,1}|q_0, p_0 \rangle$ , avec  $q_1 - q_0 = \frac{\partial H}{\partial p}\Delta t$  et  $p_1 - p_0 = -\frac{\partial H}{\partial q}\Delta t$  sont les déplacements du point  $(q_0, p_0)$  par la dynamique classique, et  $E = H(q_0, p_0)$  est l'énergie du point classique, conservée au cours du temps. Sur la durée  $\Delta t$  infinitésimale, le paquet d'onde est donc translaté dans l'espace de phase, comme le point classique.

4. Alors en sommant des déplacements infinitésimaux,

$$\hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle \simeq \exp(-iEt/\hbar)\prod_{i=0}^{N-1}\hat{D}_{i,i+1}|q_0, p_0 \rangle = \exp(-iEt/\hbar)\exp(iS/\hbar)\hat{D}_{0,M(t)}|q_0, p_0 \rangle$$

, où  $M(t)$  est l'évolution classique.

5. On a  $\hat{U}(t')|\phi \rangle = \int_0^T e^{iE(t+t'-t')/\hbar}\hat{U}(t+t')|q_0, p_0 \rangle = e^{-iEt'/\hbar}\int_0^{T+t'} e^{iEt/\hbar}\hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt = e^{-iEt'/\hbar}|\phi \rangle$ , à condition que  $e^{iET/\hbar}\hat{U}(T)|q_0, p_0 \rangle = |q_0, p_0 \rangle$ , car alors

$$\int_T^{T+t'} e^{iEt/\hbar}\hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt = \int_0^{t'} e^{iEt/\hbar}\hat{U}(t)|q_0, p_0 \rangle dt$$

6. D'après ci-dessus, la condition s'écrit :  $\exp(iS/\hbar)\hat{D}_{0,M(T)}|q_0, p_0 \rangle = |q_0, p_0 \rangle$ , où  $S$  est la surface de la trajectoire (action). Or  $M(T) = M(0)$ , donc il faut  $\exp(iS/\hbar) = 1$ , soit

$$S = hn, \quad n \in \mathbb{N}$$

appelée **règle de quantification de Bohr-Sommerfeld** : la surface doit contenir un nombre entier de cellules de Planck.

Pour l'oscillateur Harmonique, cela donne (voir section précédente)  $E_n \simeq \hbar\omega n$ . (Il manque l'indice 1/2).

**Exercice 23 page 108** (Voir [CBF] p571). On a  $J = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp |x, p, \sigma\rangle \langle x, p, \sigma| = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx dp D(z)|0\rangle \langle 0|D^+(z)$ . Or  $D(z)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)\exp(za^+)\exp(-\bar{z}a)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)e^{za^+}|0\rangle$ . Or  $e^{za^+}|0\rangle = \sum_{n \geq 0} \frac{z^n a^{+n}}{n!}|0\rangle = \sum_{n \geq 0} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ .

Donc  $J = \sum_{n, n'} \int \frac{dx dp}{h} \frac{z^n \bar{z}^{n'}}{\sqrt{n!n'}} e^{-|z|^2}|n\rangle \langle n'|$ . Mais d'une part  $\frac{dx \wedge dp}{h} = dQ \wedge dP$  et  $\int dQ dP z^n \bar{z}^{n'} e^{-|z|^2} = \int d\rho d\theta e^{-\rho^2} \rho^{n+n'} e^{i\theta(n-n')} = n! \delta_{n, n'}$  en coordonnées polaires  $(\rho, \theta)$  et intégration sur  $\rho$  par parties. Donc  $J = \sum_{n \geq 0} |n\rangle \langle n| = \hat{I}$ . De façon plus élégante, cette relation de fermeture est une simple conséquence du lemme de Schur (théorie des groupes) voir [Per86] p.15.

**Exercice 20 page 104** @@ revoir @@

1. Le Hamiltonien classique est :

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Soit une valeur  $E < 0$  fixée. On cherche le volume de l'espace de phase des points :

$$\Sigma_E = \{(\vec{x}, \vec{p}) / H(\vec{x}, \vec{p}) \leq E\}$$

On utilise naturellement les coordonnées sphériques :  $\vec{p} \equiv (p, \varphi_p, \theta_p)$  et  $\vec{x} \equiv (r, \varphi, \theta)$ . Alors (utilisant  $d\vec{x} = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$ )

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(E) &= \text{Vol}(\Sigma_E) = \int_{\Sigma_E} d\vec{x} d\vec{p} \\ &= (4\pi)^2 \int_{E \geq \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}} r^2 p^2 dr dp \\ &= (4\pi)^2 \frac{e^4}{3(4\pi\epsilon_0)^2} \int_0^\infty p^2 dp \frac{1}{\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)^3} \\ &= (4\pi)^2 \frac{e^4}{3(4\pi\epsilon_0)^2} \left( \frac{m^{3/2}\pi}{4\sqrt{2}(-E)^{3/2}} \right) = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{12\sqrt{2}(-E)^{3/2} \epsilon_0^2} \end{aligned}$$

Ensuite d'après (2.45),

$$N(E) = \frac{\mathcal{V}(E)}{h^3} = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{12\sqrt{2}(-E)^{3/2} \epsilon_0^2 h^3}$$

2. On déduit la densité de niveaux semi-classique  $\rho_{sc}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{e^4 m^{3/2} \pi}{8\sqrt{2}(-E)^{5/2} \epsilon_0^2 h^3}$ , qui est une expression valable lorsque les niveaux deviennent denses, c'est à dire pour  $E \rightarrow 0^-$ .
3. A partir de l'expression  $E_n^{exact} = -\frac{\epsilon_1}{n^2}$  avec  $\epsilon_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$ , on a (sans oublier la dégénérescence du niveau  $E_n$  qui est  $n^2$ )  $dN = n^2 dn$  donc  $dN/dE = n^2 dn/dE = \frac{1}{2} \frac{m^{3/2} e^6}{2^{3/2} \hbar^3 (-E)^{5/2}}$ .

@@

# Chapitre 3

## Une particule à 3 dimensions sans spin

Dans le chapitre précédent nous avons par simplicité considéré une particule se déplaçant seulement selon une direction  $x$  (mouvement à une dimension). Dans ce chapitre nous montrons tout d'abord comment le formalisme du chapitre précédent s'étend pour décrire une particule dans l'espace  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  de dimension 3.

Nous traitons ensuite le cas d'une particule chargée qui subit l'influence d'un champ électromagnétique décrit par les champs de potentiel  $\vec{A}$  et  $V$ .

### 3.1 Une Particule sans spin à 3 dimensions

#### 3.1.1 Espace des états $\mathcal{H}$

L'état quantique d'une particule est maintenant décrit par une fonction d'onde  $\psi(x, y, z)$  à 3 variables, et toujours à valeurs complexes. On utilisera toujours la notation de Dirac  $|\psi\rangle$ . On posera aussi :

$$\vec{X} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$$

Le *produit scalaire* entre deux fonctions d'onde est naturellement :

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_1(\vec{X})} \psi_2(\vec{X}) d\vec{X}$$

(où  $d\vec{X} = dx dy dz$ . C'est une intégrale triple). Et l'espace des états est constitué des fonctions d'ondes  $|\psi\rangle$  de norme finie :  $\langle \psi | \psi \rangle < \infty$ , noté :

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

Les *opérateurs différentielles* de base sont les opérateurs position et impulsion que l'on regroupe en **opérateurs vectoriels** (i.e. vecteurs dont les composantes sont des opérateurs) :

$$\hat{\vec{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \tag{3.1}$$

$$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \tag{3.2}$$

qui sont définis comme ci-dessus, par

$$\begin{aligned}(\hat{x}\psi)(x, y, z) &= x\psi(x, y, z) \\ (\hat{p}_x\psi)(x, y, z) &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}(x, y, z)\end{aligned}$$

etc...

On note aussi :

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

avec  $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$  appelé **opérateur nabla**.

(On notera souvent  $\partial_x$  pour  $\partial/\partial x$ , etc..).

### 3.1.2 L'espace $\mathcal{H}$ comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$

Nous connaissons déjà des bases pour l'espace des fonctions à une variable. Pour l'espace  $\mathcal{H}_x = L^2(\mathbb{R})$  des fonctions d'ondes  $\psi(x)$  à une variable  $x$ , étudié dans le chapitre précédent, nous connaissons la "base" de position  $|x\rangle, x \in \mathbb{R}$ , la "base" d'impulsion  $|p_x\rangle, p_x \in \mathbb{R}$ , la base de l'oscillateur Harmonique  $|n_x\rangle, n_x \in \mathbb{N} \dots$  (il y a une infinité d'autres bases possibles). C'est la même chose pour les espaces  $\mathcal{H}_y$  et  $\mathcal{H}_z$ .

Nous aimerions ici construire des bases de l'espace  $\mathcal{H}$  (fonctions à trois variables) à partir de ces bases de fonctions à une variable. Autrement dit, comprendre comment l'espace  $\mathcal{H}$  se construit à partir des espaces  $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y$  et  $\mathcal{H}_z$ . Nous allons voir que cette construction se fait par le produit tensoriel. Le produit tensoriel sera essentiel pour décrire plus généralement l'espace quantique d'une particule avec des degrés de liberté interne, ou pour décrire l'espace quantique de plusieurs particules. Nous décidons donc illustrer cette construction dans ce cadre simple de fonctions à trois variables, ce qui reste intuitif.

Supposons que  $|n_x\rangle, n_x \in \mathbb{N}$  est une base de  $\mathcal{H}_x$ , et de même  $|n_y\rangle$  et  $|n_z\rangle$  des bases respectives de  $\mathcal{H}_y$  et  $\mathcal{H}_z$ . Ainsi on note :

$$\phi_{n_x}(x) = \langle x | n_x \rangle, \quad n_x \in \mathbb{N}$$

sont les fonctions de base de  $\mathcal{H}_x$ , etc...

On considère tout d'abord que  $y, z$  sont fixes, donc que  $\psi(x, y, z)$  dépend seulement de  $x$ , et on écrit :

$$\psi(x, y, z) = \langle x | \psi(y, z) \rangle = \sum_{n_x} \psi_{n_x}(y, z) \phi_{n_x}(x)$$

La fonction  $\psi_{n_x}(y, z)$  est ici une "composante". On continue de même avec cette fonction, en considérant  $z$  fixe et  $y$  variable, donnant

$$\psi_{n_x}(y, z) = \sum_{n_y} \psi_{n_x, n_y}(z) \phi_{n_y}(y)$$

et puis finalement

$$\psi_{n_x, n_y}(z) = \sum_{n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_z}(z)$$

Au total cela donne :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) \quad (3.3)$$

Qui montre que en général une fonction  $\psi(x, y, z)$  n'est pas juste un produit factorisé de trois fonctions respectivement en  $x, y, z$  mais peut toujours s'écrire comme une combinaison linéaire de termes factorisés de la forme  $\phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$ . De plus on a montré que cette décomposition est unique.

En notation de Dirac, on ré-écrit (3.3) :

$$\langle x, y, z | \psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \langle x | n_x \rangle \langle y | n_y \rangle \langle z | n_z \rangle$$

ou encore :

$$|\psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} |n_x \rangle \otimes |n_y \rangle \otimes |n_z \rangle$$

Le signe  $\otimes$  s'appelle **produit tensoriel**. Il signifie que la fonction  $|n_x \rangle \otimes |n_y \rangle \otimes |n_z \rangle \in \mathcal{H}$  est  $\langle x | n_x \rangle \langle y | n_y \rangle \langle z | n_z \rangle = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$ .

La décomposition de  $|\psi \rangle$  que l'on a obtenue montre que  $|n_x \rangle \otimes |n_y \rangle \otimes |n_z \rangle$  **forment une base orthonormée de  $\mathcal{H}$** . (On vérifie facilement l'orthonormalité). On dit que  $\mathcal{H}$  est l'**espace produit tensoriel** :

$$\boxed{\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z}$$

On obtient de même la base de position de  $\mathcal{H}$  :

$$|\vec{X} \rangle = |x, y, z \rangle = |x \rangle \otimes |y \rangle \otimes |z \rangle$$

(et de même pour les vecteurs duaux  $\langle \vec{X} | = \langle x, y, z | = \langle x | \otimes \langle y | \otimes \langle z |$ .)

### Remarques

- Ne pas confondre le produit tensoriel d'espaces vectoriels avec la somme directe d'espaces vectoriels. Voici un rappel de ces deux notions. Si  $F$  est un espace vectoriel (e.v.) de dimension  $N_f$ , de base  $|n_f \rangle, n_f = 1 \rightarrow N_f$  et  $G$  est un autre e.v. de dimension  $N_g$ , de base  $|n_g \rangle, n_g = 1 \rightarrow N_g$ , alors nous venons de voir que l'**espace produit tensoriel** est noté

$$E = F \otimes G \quad (3.4)$$

et a pour base  $|n_f, n_g \rangle = |n_f \rangle \otimes |n_g \rangle$  et est donc de dimension  $N_f N_g$ . Par contre, l'**espace somme directe**, noté

$$E = F \oplus G$$

a pour base la réunion des vecteurs  $|n_f \rangle$  et  $|n_g \rangle$ , et est donc de dimension  $N_f + N_g$ . Par exemple  $\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^2 \oplus \mathbb{R}$ . Voir figure 3.1.

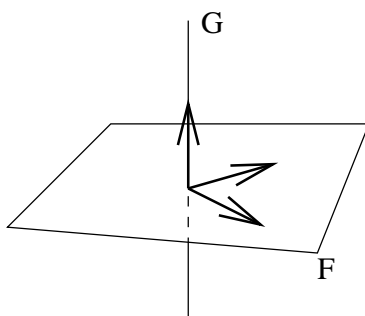


FIG. 3.1 – L'espace total  $E$  de dimension 3 est la somme directe  $E = F \oplus G$ , avec  $\dim F = 2$ ,  $\dim G = 1$ .

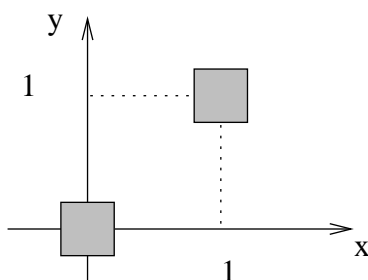


FIG. 3.2 – Cette fonction  $\psi(x, y) = 1$  sur les carrés gris, et  $\psi(x, y) = 0$  ailleurs, est non factorisable.

- Voici un schéma (figure 3.2) montrant une fonction  $\psi(x, y)$  non factorisable en deux fonctions de  $x$  et  $y$ . Cela traduit une corrélation évidente entre les variables  $x$  et  $y$ . En terme de mesure de la position de la particule, si on observe la particule en  $x = 1$ , forcément,  $y = 1$  (respect.  $x = 0$  et  $y = 0$ ). Donc  $x$  et  $y$  sont des **grandeurs corrélées** dans cet exemple.

Voici maintenant un schéma montrant une fonction  $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$  factorisable en deux fonctions de  $x$  et  $y$ , figure 3.3. Cela correspond au fait qu'il n'y a pas de corrélation entre les grandeurs  $x$  et  $y$  : Si on observe la particule en  $x = 1$ , on ne sait pas pour autant si  $y = 0$  ou  $y = 1$ . On dit que  $x$  et  $y$  sont **dé-corrélés**.

- Dans cette section, on a montré que  $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$ . Plus généralement, on a donc pour  $a, b \in \mathbb{N}$  :

$$L^2(\mathbb{R}^{a+b}) = L^2(\mathbb{R}^a) \otimes L^2(\mathbb{R}^b)$$

**Exercice 24 action d'une rotation :** Si une particule a la fonction d'onde  $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$ , donner l'expression de la fonction d'onde de la même particule dans un repère  $\vec{x}'$  obtenu par une rotation  $\vec{x}' = R\vec{x}$  ? (puisque que la transformation  $\psi(\vec{x}) \rightarrow \psi'(\vec{x}')$  correspond à un changement de repère, on parle de **transformation passive**. Il pourrait s'agir d'un dispositif qui fasse tourner la particule ; on parlerait de **transformation active**.)

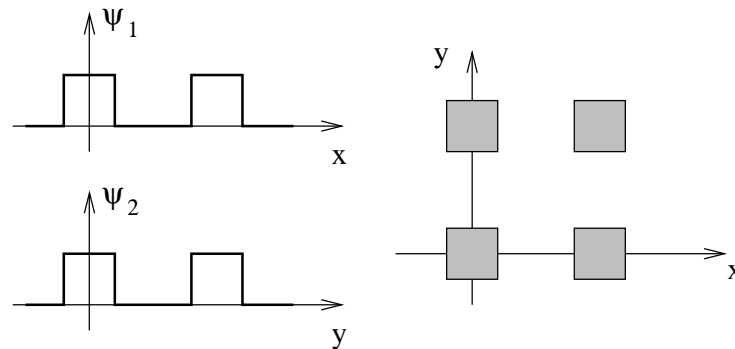


FIG. 3.3 – Cette fonction  $\psi(x, y) = 1$  sur les carrés gris, et  $\psi(x, y) = 0$  ailleurs est factorisable :  $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$

### 3.1.3 L'oscillateur Harmonique à 2 dimensions (TD) (\*)

@@

- donner H dimension 2 avec deux fréquences.
- Calcul du spectre dans la base produit tensoriel.
- Remarque sur la dégénérescence si rapports rationnels des fréquences.

## 3.2 Particule chargée dans un champ électromagnétique

Dans cette section, on cherche à décrire une **particule quantique** subissant les effets d'un **champ électro-magnétique extérieur classique**. On supposera donc que l'influence de la particule sur le champ est négligeable (ex : rayonnement, champ électrostatique ou magnétostatique, cf discussion page 138).

La dynamique d'une particule quantique isolée est décrite par l'équation de Schrödinger eq.(1.10). Dans cette équation intervient l'opérateur Hamiltonien qui contient toutes les informations sur la nature de la particule et les forces qu'elle subit.

En général, cet opérateur  $\hat{H}$  s'obtient à partir de la fonction de Hamilton classique  $H(\vec{x}, \vec{p})$  (qui est l'énergie totale) qui sert à décrire la dynamique de la particule dans le cadre de la mécanique classique, en remplaçant les variables classiques  $x, p_x$  par les opérateurs  $\hat{x}, \hat{p}_x$  etc.. (Cela s'appelle le **principe de correspondance**).

Dans ce paragraphe nous allons donc tout d'abord faire un rappel de mécanique classique et d'électromagnétisme classique, et établir la fonction de Hamilton  $H(\vec{x}, \vec{p})$  d'une particule classique chargée, dans un champ électromagnétique. Puis à l'aide du principe de correspondance, on obtiendra l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  qui permet de décrire la particule quantique.

Attention : dans ce chapitre, on ne décrira pas le spin de la particule (on le supposera figé par exemple). Nous décrirons l'interaction du spin avec le champ, seulement à la fin du chapitre sur le spin 1/2.

### 3.2.1 Expression du Hamiltonien classique

Soit une particule classique chargée (électron ou autre), de charge  $q$ , se déplaçant sous l'effet d'un champ électromagnétique. On part de la connaissance de la **force de Lorentz** : La particule chargée subit la force :

$$\vec{F} = q \left( \vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right)$$

Et son mouvement est décrit par l'équation de Newton :

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F} \quad (3.5)$$

Les champs  $\vec{E}(\vec{x}, t)$  et  $\vec{B}(\vec{x}, t)$  sont reliés aux potentiels  $U(\vec{x}, t)$  et  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  par les relations :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}(U) - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \overrightarrow{\text{rot}} \vec{A}$$

Dans la suite, on suppose connu quelques éléments de mécanique analytique.

#### 3.2.1.1 Fonction Lagrangien :

La fonction Lagrangien est

$$L(\vec{x}, \vec{v}, t) = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + q \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \vec{v} - qU(\vec{x}, t)$$

**preuve :** L'expression générale du Lagrangien est  $L = T - V$  avec  $T = 1/2 m v^2$  (énergie cinétique) et

avec  $V(\vec{x}, \vec{v}, t)$  énergie potentielle dont on recherche l'expression. Les équations de Euler-Lagrange sont

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \vec{x}}$$

or

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} &= m \vec{v} - \frac{\partial V}{\partial \vec{v}} \\ \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} &= -\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} \end{aligned}$$

donnant

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} + \frac{d}{dt} \frac{\partial V}{\partial \vec{v}} = \vec{F} \quad \text{: equation de Newton}$$

donc

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} + \frac{d}{dt} \frac{\partial V}{\partial \vec{v}}$$

Montrons que  $V = -q\vec{A}\cdot\vec{v} + qU(\vec{x})$  convient. En effet,  $\frac{\partial V}{\partial x_i} = -q\partial_i(\vec{A}\cdot\vec{v}) + q\partial_i U$  et  $\frac{\partial V}{\partial v_i} = -qA_i(\vec{x}, t)$ . Donc  $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial v_i}\right) = -q\partial_t A_i - q\sum_j(\partial_{x_j} A_i)\frac{dx_j}{dt}$  que l'on peut écrire aussi  $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial \vec{v}}\right) = -q\partial_t \vec{A} - q(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})\vec{A}$ . Alors  $\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial \vec{v}}\right) = q\vec{\nabla}(\vec{A}\cdot\vec{v}) - q\vec{\nabla}U - q\partial_t \vec{A} - q(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})\vec{A} = -q\vec{\nabla}U - q\partial_t \vec{A} + q\vec{v} \wedge (\vec{\nabla} \wedge \vec{A})$ . Donc  $\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \wedge \vec{B}$  comme attendu. Remarquer que la fonction Lagrangien ci-dessus n'est pas l'unique fonction donnant la force de Lorentz. ■

### 3.2.1.2 Impulsion généralisée :

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A}$$

### 3.2.1.3 Fonction de Hamilton :

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t))^2 + qU(\vec{x}, t)$$

preuve :

La transformée de Legendre donne  $H(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{p}\vec{v} - L$ . Or d'après ci-dessus,  $\vec{v} = (\vec{p} - q\vec{A})/m$ .  
Donc

$$L = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + \frac{q}{m} \vec{A} (\vec{p} - q\vec{A}) - qU$$

et

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}}{m} (\vec{p} - q\vec{A}) - \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \frac{q}{m} \vec{A} (\vec{p} - q\vec{A}) + qU \\ &= \frac{1}{m} (\vec{p} - q\vec{A}) \left( \vec{p} - \frac{\vec{p}}{2} + \frac{q}{2} \vec{A} - q\vec{A} \right) + qU \\ &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qU \end{aligned}$$

■

### 3.2.1.4 Équations de mouvement classique

Nous rappelons que les équations de mouvement de Hamilton de la particule classique  $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$  sont :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{x}}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \\ \frac{d\vec{p}}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \end{aligned}$$

Ces équations du premier ordre en temps sont équivalentes à l'équation de Newton (3.5) qui est du deuxième ordre.

### 3.2.1.5 Invariance de Jauge classique

D'après les équations de mouvement de Newton  $m d\vec{v}/dt = \vec{F}$ , et l'expression de  $\vec{F}$ , nous savons que le mouvement de la particule est imposées par  $\vec{E}, \vec{B}$  et non pas directement par  $\vec{A}, U$ . Or différents champs  $\vec{A}, U$  donnent les mêmes champs  $\vec{E}, \vec{B}$ . En effet, la transformation suivante sur les champs  $(\vec{A}, U)$  est appelé **changement de Jauge** et laisse les champs  $\vec{E}, \vec{B}$  invariants (et donc la trajectoire classique inchangée) :

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \overrightarrow{\text{grad}}(\chi) \\ U &\rightarrow U' = U - \frac{\partial \chi}{\partial t}\end{aligned}\quad (3.6)$$

avec  $\chi(\vec{x}, t)$  une fonction quelconque.

**preuve :**  $\vec{E}' = -\overrightarrow{\text{grad}}U' - \partial \vec{A}' / \partial t = -\overrightarrow{\text{grad}}U + \partial(\text{grad}\chi) / \partial t - \partial \vec{A} / \partial t - \partial(\text{grad}\chi) / \partial t = \vec{E}$ .  
et  $\vec{B}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} + \overrightarrow{\text{rot}}\text{grad}\chi = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} = \vec{B}$ . ■

### 3.2.2 Équation de Schrödinger et invariance de Jauge

Comme expliqué ci-dessus, l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  s'obtient à partir du Hamiltonien classique en substituant les variables positions et impulsions par les opérateurs différentiels correspondants eq(3.1). Cela donne :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + qU(\vec{x}, t) \quad (3.7)$$

et l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution de la fonction d'onde de la particule chargée s'écrit toujours comme eq.(1.10) :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (3.8)$$

Il est un phénomène surprenant en mécanique quantique, appelé l'effet Aharonov-Bohm découvert en 1957, lié au fait que l'expression de  $\hat{H}$  dépend des potentiels  $\vec{A}, U$  et non pas directement des champs  $\vec{E}, \vec{B}$ . Pour le comprendre, il nous faut d'abord étudier l'invariance de Jauge en mécanique classique et mécanique quantique.

#### 3.2.2.1 Invariance de Jauge quantique

L'équation de Schrödinger est aussi invariante par ce changement de Jauge, à condition de faire aussi le changement suivant sur la fonction d'onde :

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = \exp\left(iq\frac{\chi(\vec{x}, t)}{\hbar}\right) \psi(\vec{x}, t) \quad (3.9)$$

qui est un changement de la phase de la fonction d'onde *différent en chaque point de l'espace-temps*.

**preuve :**

supposons que l'équation  $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$  est vérifiée. On va montrer que  $i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi'$  est alors vérifiée. On calcule  $i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \exp(iq\chi/\hbar) \left( \hat{H}\psi - q(\partial_t\chi)\psi \right)$  et avec  $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ,  $(\vec{p} - q\vec{A}')(\exp(iq\chi/\hbar)\psi) = \dots = \exp(iq\chi/\hbar) (\vec{p} - q\vec{A})\psi$ . Donc  $(\vec{p} - q\vec{A}')^2 (\exp(iq\chi/\hbar)\psi) = \exp(iq\chi/\hbar) (\vec{p} - q\vec{A})^2 \psi$ , et on déduit  $\hat{H}'\psi' = \exp(iq\chi/\hbar) \left( \hat{H}\psi - q(\partial_t\chi)\psi \right)$  et donc le résultat voulu. ■

### 3.2.3 Effet Aharonov-Bohm

Le changement de phase locale de la fonction d'onde lors d'un changement de Jauge laisse penser que contrairement à la mécanique classique, il serait possible de distinguer des potentiels  $\vec{A}, U$  différents associés cependant aux mêmes champs  $\vec{E}, \vec{B}$ .

Une première réponse est non, car lors d'une mesure, on observe seulement le module local de la fonction d'onde et non sa phase. Un examen plus attentif, montre que par des expériences d'interférences, on peut observer des modifications de la phase de la fonction d'onde, comme dans l'expérience suggérée par Aharonov et Bohm que voici.

Dans le dispositif expérimental décrit par la figure (3.4), un faisceau cohérent d'électrons part de  $x_0$ , puis est séparé en deux, et se recombine dans la région d'interférences  $x$ . Cela est similaire à l'expérience des doubles fentes de Young en optique, sauf que la région hachurée entourée par les faisceaux contient un champ magnétique  $\vec{B}$  perpendiculaire à la figure. Le champ  $\vec{B}$  est nul sur le trajet des faisceaux.

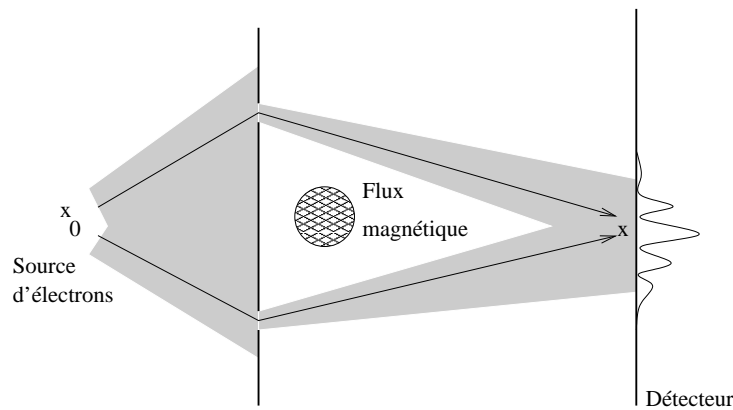


FIG. 3.4 – La fonction d'onde d'un électron est quasiment nulle hors des régions grisées. Le champ magnétique est nul hors de la zone noircie. Cependant les figures d'interférence observées dépendent directement du flux magnétique.

Cependant on montre que la présence du champ  $\vec{B}$  nulle en dehors d'une petite région, est associée à un *potentiel vecteur*  $\vec{A}$  qui n'est cependant pas nul à l'emplacement des trajets des électrons. En effet si l'on considère la boucle fermée  $\Gamma$ , allant de  $x_0$  à  $x$  par le chemin

du haut, et revenant par le chemin du bas, on a

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{l} = \int_{\text{disque}} \text{rot}(\vec{A}) d^2\vec{s} = \int_{\text{disque}} \vec{B} d^2\vec{s} = \phi_B$$

où  $\phi_B$  est le flux (non nul) du champ  $\vec{B}$  à travers la boucle  $\Gamma$ . On déduit que  $\vec{A}$  est donc **non nul sur le trajet des électrons**. A cause de sa présence dans le Hamiltonien  $\hat{H}$ , ce potentiel vecteur  $\vec{A}$  est responsable d'une différence de phase entre les deux trajets qui est précisément :  $\frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} d\vec{l} = \frac{e}{\hbar} \phi_B$  (voir exercice ci-dessous). Par conséquent, l'intensité  $I(x)$  des figures d'interférence observées au point  $x$ , dépendent directement du flux magnétique  $\phi = \int_{\text{disque}} \vec{B} d\vec{s}$ .

On montre que l'intensité de l'onde au point  $x$  du détecteur est (cf exercice ci-dessous) :

$$I(x) \simeq \left( 1 + \cos \left( \frac{e}{\hbar} \phi_B \right) \right)$$

La conséquence surprenante de cette expérience, est qu'un champ magnétique  $\vec{B}$  peut influencer le mouvement d'électrons qui ne le traversent même pas. (Mais dont la fonction d'onde le contourne).

Ce phénomène d'interférences est observé dans des structures semi-conducteurs. Il permet de détecter des changements de champs magnétique très faibles.

Il y a un paradoxe apparent. Voici un argument qui est faux : l'invariance de Jauge semble dire que seuls  $\vec{E}$  et  $\vec{B}$  comptent, et comme  $\vec{B} = 0$  sur le chemin de l'électron, alors par un changement de Jauge, on devrait pouvoir annuler  $\vec{A}$  partout. Par conséquent la phase de la fonction d'onde est insensible à  $\phi_B$ , il n'y a pas d'interférences. Plus précisément, sur le chemin de l'électron,  $\text{rot}\vec{A} = \vec{B} = 0$  donc on devrait trouver une fonction  $\chi$  telle que  $\text{grad}\chi = \vec{A}$ . Le changement de Jauge  $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \text{grad}(\chi)$  donnerait alors  $\vec{A}' = 0$ .

Réponse : l'erreur de l'argument précédent est que la propriété mathématique  $\text{rot}\vec{A} = 0 \Rightarrow \exists \chi, tq \vec{A} = \text{grad}\chi$  n'est valable que sur un domaine  $\mathcal{D}$  de l'espace **simplement connexe**, c'est à dire où tout chemin en boucle peut se déformer continument vers un point en restant dans ce domaine. Or le domaine où l'électron est présent (en gris sur la figure (3.4)), n'est pas simplement connexe. D'ailleurs, une preuve que l'on ne peut annuler  $\vec{A}$  est que  $\oint \vec{A} d\vec{l} = \phi_B \neq 0$ .

Plus généralement, les formules bien connues de calcul différentiel

$$\begin{aligned} \text{grad} f = 0 &\Rightarrow f = cste \\ \text{rot}\vec{u} = 0 &\Rightarrow \exists f, tq \vec{u} = \text{grad} f \\ \text{div}\vec{v} = 0 &\Rightarrow \exists \vec{u}, tq \vec{v} = \text{rot}\vec{u} \end{aligned}$$

sont valable sur un domaine  $\mathcal{D}$  de l'espace qui est contractible, c'est à dire déformable en un point ; et ne contenant donc pas de trous.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Cette propriété s'appelle le lemme de Poincaré. Plus précisément, la condition nécessaire et suffisante sur le domaine  $\mathcal{D}$  est que son groupe de cohomologie de De-Rham soit nul, c'est à dire  $H_{DR}^0(\mathcal{D}) = 0$ , ou  $H_{DR}^1(\mathcal{D}) = 0, H_{DR}^2(\mathcal{D}) = 0$ , pour respectivement les trois formules ci-dessus, voir [Nak].

**Exercice :** chercher un contre exemple simple à chacune de ces trois règles.

**Solution :**

1. soit le domaine  $\mathcal{D} = \mathbb{R} \setminus \{0\}$ . Sur  $\mathbb{R}^+$ ,  $f(x) = 1$ , et  $\mathbb{R}^-$ ,  $f(x) = 0$ .
2. soit le domaine  $\mathcal{D} = \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ . En coordonnée polaires,  $\vec{u} = \frac{1}{r}\vec{u}_\theta$ .
3. soit le domaine  $\mathcal{D} = \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ . En coordonnée sphériques,  $\vec{v} = \frac{1}{r^2}\vec{u}_r$ .

### Exercice (TD)

1. Donner une expression possible pour  $\vec{A}$  dans la région où  $B = 0$ , en fonction du flux magnétique  $\phi = \iint B.ds$ .
2. Considérons l'équation de Schrödinger pour des électrons en présence du potentiel vecteur  $\vec{A}(x)$  et d'un potentiel  $V$  indépendants du temps ( $x \in \mathbb{R}^3$ )

$$\frac{1}{2m} \left( \vec{p} - e\vec{A} \right)^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (3.10)$$

Supposons que  $\psi^0$  satisfasse l'équation pour  $\vec{A} = 0$ . Dans une région où  $\vec{B} = 0$ , montrer que

$$\psi(x) = \psi^0(x) \exp \left[ \frac{ie}{\hbar} \int_{x_0}^x \vec{A}(x') \cdot d\vec{s}' \right]$$

satisfait à l'équation de Schrödinger (3.10). Ici l'intégrale curviligne se fait sur un chemin  $\gamma$  partant du point  $x_0$  fixé et jusqu'au point  $x$ . Montrer que l'intégrale ne dépend pas du chemin  $\gamma$  suivi tant que celui-ci se trouve dans une région où  $B = 0$ .

3. On note  $\psi_1(x)$  et  $\psi_2(x)$  l'amplitude de la fonction d'onde de l'électron au point  $x$ . On suppose que lorsque le flux magnétique  $\phi = \iint B.ds$  est nul, on a  $\psi_1^0(x) = \psi_2^0(x)$ . Quelle est l'expression de la probabilité de présence  $I$  de l'électron en  $x$  en fonction de  $\phi$ ?
4. Ce phénomène d'interférences est observé dans des structures semi-conducteurs. Il permet de détecter des changements de champs magnétique très faibles. Supposons que la surface entourée par les chemins soit de  $20\mu m \times 20\mu m$ . Calculer la variation de champ magnétique  $\Delta B$  que l'on peut détecter à travers ce dispositif interférométrique. (comparer au champ magnétique terrestre de  $40\mu T$ ).

### 3.2.4 Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (\*)

Dans ce paragraphe, nous donnons une introduction à la description de l'électromagnétisme comme étant "**une théorie de Jauge**". Cette description introduite par les physiciens dans les années 1970', utilise des outils de géométrie introduits par les mathématiciens (H. Whitney, H. Hopf, Pontrjagin, Chern ...) dans les années 1930'-40', comme

la notion de **fibré vectoriel** et **connexion sur un fibré vectoriel**,<sup>2</sup>, que nous allons expliquer.

Cette interprétation a un aspect esthétique certain, mais aussi un gros avantage conceptuel, car cette description se généralise aux autres forces fondamentales de la nature, comme la force nucléaire, la force de gravitation. Cette description a par ailleurs permis en 1973, l'unification de la force électromagnétique avec la force nucléaire faible, dans la théorie dite "**théorie de Jauge électro-faible**", dont la vérification expérimentale a été faite en 1983, avec la découverte des bosons  $Z_0, Z_{\pm}$ .

De plus la description géométrique en terme de fibré vectoriel est indispensable pour décrire des phénomènes topologiques ; cela sera discuté dans un chapitre ultérieur.

Nous rappelons d'un point de vue physique, nous décrivons une particule chargée *quantique* (décrite par une fonction d'onde  $\psi$ ), et un champ électromagnétique *classique*. Nous supposons que ce champ influence la particule, mais que celle-ci n'influence pas le champ<sup>3</sup>

### 3.2.4.1 Nécessité d'une description géométrique

La situation décrite plus haut est insatisfaisante pour deux raisons :

1. L'expérience de Aharonov-Bohm montre que les champs  $\vec{E}, \vec{B}$  ne suffisent pas à décrire l'effet du champs électromagnétique sur une particule quantique : il faut l'expression des potentiels  $\vec{A}, U$ .
2. Cependant, ces potentiels  $\vec{A}, U$  ne sont pas uniquement déterminés : un changement de choix de Jauge arbitraire ne change pas leur effet sur la particule quantique.

Nous allons voir qu'il peut y avoir une description unique et complète du champ électromagnétique, en utilisant une description géométrique adéquate. De la même manière que les coordonnées polaires ou cartésiennes sont des choix différents pour décrire un point dans le plan, différents choix de Jauge, décrivent le même champs électromagnétique.

### 3.2.4.2 Autre écriture de l'équation de Schrödinger avec la dérivée covariante

On peut écrire l'équation de Schrödinger (3.8), sous la forme :

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + qU\right)\psi + \left(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2\psi = 0$$

Soit :

$$-i\hbar D_t\psi + \left(-i\hbar\vec{D}\right)^2\psi = 0,$$

avec l'opérateur appelé **dérivée covariante** :

$$D : \begin{cases} D_t = \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{qU}{\hbar}\right) \\ D_x = \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{qA_x}{\hbar}\right), \quad D_y = etc... \end{cases}$$

<sup>2</sup>"Connection on a vector bundle" en anglais.

<sup>3</sup>Voir discussion à la section 3.2.5 à propos de cette hypothèse.

qui a une expression identique sur les quatre axes de l'espace-temps.

Nous allons maintenant donner une description géométrique de la dérivée covariante définie ci-dessus, qui montrera la signification du changement de Jauge.

### 3.2.4.3 La fonction d'onde comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps

La fonction d'onde  $\psi(\vec{x}, t) \in \mathbb{C}$  est une fonction qui associe une valeur complexe à chaque point de l'espace-temps. D'après (3.9), la phase de cette valeur complexe n'est pas uniquement déterminée.

Cela nous amène à supposer que à chaque point  $m$  de l'espace-temps  $M$ , est associé un plan vectoriel complexe, appelé fibre  $F_m$ , identique à  $\mathbb{C}$ , mais *sans choix d'axe réel précisé*. Cependant la norme d'un point  $f \in F_m$  est définie, si bien que chaque fibre a une "invariance par rotation autour de l'origine"; Ainsi si l'on veut associer un nombre complexe  $c \in \mathbb{C}$  à  $f \in F_m$ , il y a le choix arbitraire d'une phase à faire, comme voulu.

La fibre  $F_m$  pour chaque  $m \in M$  est un plan complexe de dimension 1. Considérant, tous les points  $m$  de l'espace temps, l'ensemble de ces fibres forment **un espace fibré sur l'espace-temps**. La fonction d'onde d'une particule quantique est le choix continu d'un point  $s(m) \in F_m$  dans chaque fibre : on dit que c'est une **section de l'espace fibré** (car la section "coupe" chaque fibre). Voir figure 3.5.

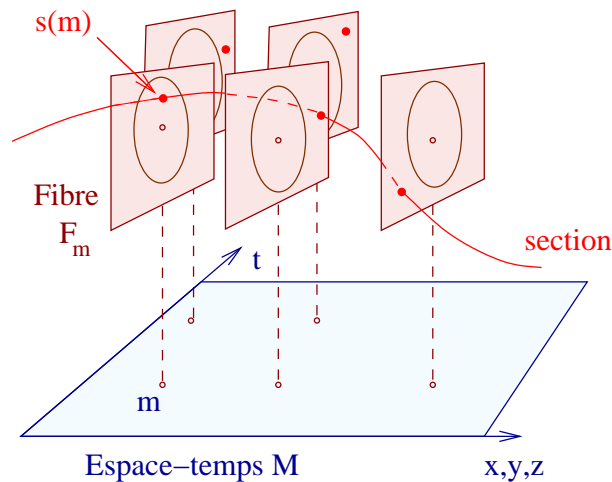


FIG. 3.5 – La fonction d'onde vue comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps. Les cercles représentent les vecteurs de norme 1.

### 3.2.4.4 Le champ électromagnétique comme une connexion sur ce fibré vectoriel

L'espace fibré est une collection de plans complexes  $F_m$  les uns "collés" aux autres, mais comme nous l'avons dit il n'y a pas d'axe réel privilégié dans aucun plan, et donc

pas d'identification privilégié entre un point d'une fibre et un point d'une fibre voisine, à priori.

Cependant, c'est "le rôle" du champ électromagnétique que d'identifier les fibres voisines entre elles, de les "connecter". Nous donnons d'abord la description géométrique de cette connexion sur la figure 3.6, puis nous verrons comment l'exprimer en formules mathématiques plus loin.

Si  $m$  et  $m + \delta m$  sont deux points infiniment proches de l'espace temps (distants par un vecteur tangent "infinitésimal" noté  $\delta m$ ), chaque point de la fibre  $F_m$  est connecté à un point de la fibre  $F_{m+\delta m}$ . Cette connexion préserve la norme, et l'invariance par rotation dans chaque fibre<sup>4</sup>. On suppose que cette connexion existe entre tous points voisins  $m$  et  $m + \delta m$  de l'espace-temps.

**Affirmation : la section  $s(m)$  et la connexion sont les seuls objets géométriques nécessaires pour décrire la particule quantique et le champ électromagnétique interagissant avec elle.**

Nous allons justifier cela dans la suite en retrouvant les expressions habituelles de l'électromagnétisme à partir de ces seuls objets.

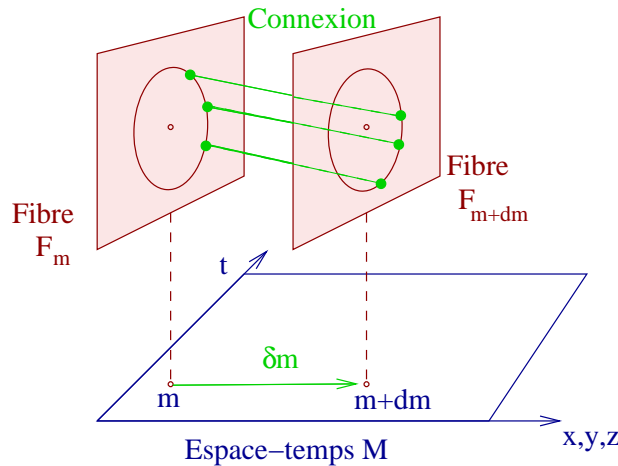


FIG. 3.6 – Le champ électromagnétique est représenté par une connexion qui connecte la fibre  $F_m$  à chaque fibre voisine  $F_{m+\delta m}$ .

### 3.2.4.5 Signification géométrique de la dérivée covariante $\mathcal{D}$ et courbure de la connexion

À partir de ces deux objets géométriques voyons ce que l'on peut dire. En un point donné  $m \in M$  de l'espace-temps, et pour un déplacement  $\delta m$  donné, on peut comparer la

<sup>4</sup>On dit alors que cette connexion a le groupe d'invariance  $U(1)$  (qui est précisément le groupe des transformations de  $\mathbb{C}$  préservant la norme).

section et la connexion. Plus précisément, voir comment la section s'écarte de la connexion. Voir figure 3.7. Cet écart est un vecteur de la fibre  $F_m$ , et noté :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s \in F_m$$

et appelé **dérivée covariante de la section selon le vecteur  $\delta m$** .

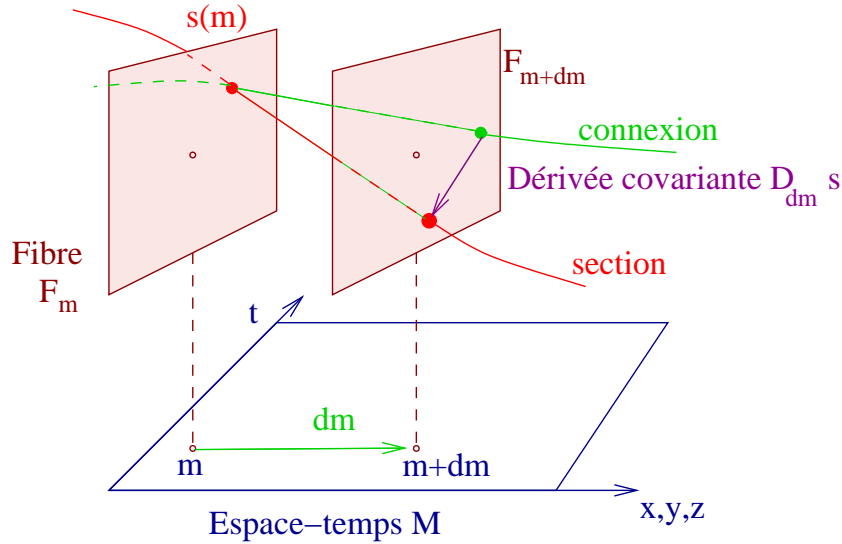


FIG. 3.7 – La dérivée covariante exprime l'écart entre la section et la connexion (ou transport parallèle)

Par ailleurs considérons deux vecteurs tangents de l'espace temps  $\delta m_1, \delta m_2$ , et le petit parcours qu'ils définissent, partant du point  $m$ . Si l'on part d'un point de la fibre  $f \in F_m$ , et que l'on passe d'une fibre à une autre, au dessus de ce parcours, en suivant la connexion, on revient à la fibre de départ  $F_m$ , mais en un autre point  $f^*$ . L'écart obtenu, appelé **holonomie du parcours** est une phase infinitésimale  $\exp i\delta\varphi$  que l'on note :

$$\delta\varphi = \mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$$

Le nombre réel  $\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$  est appelé **courbure de la connexion au point  $m$ , selon les directions  $\delta m_1, \delta m_2$** .

**Remarques :**

- $\mathcal{F}_{(\delta m_2, \delta m_1)} = -\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}$ , montrant que  $\mathcal{F}$  est antisymétrique (c'est un champ de tenseurs de rang 2 anti-symétrique, ou 2-forme).<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Rappelons qu'un **tenseur contravariant de rang  $k$**  est un objet géométrique en un point  $m$  de l'espace-temps qui s'applique sur  $k$  vecteurs tangents linéairement et renvoie un nombre. Un tenseur contravariant antisymétrique de rang  $k$  est aussi appelé une  **$k$ -forme**.

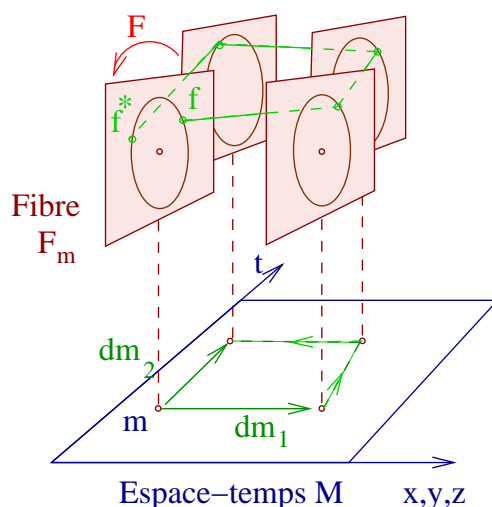


FIG. 3.8 – La courbure  $\mathcal{F}$  exprime la différence de phase obtenue après avoir suivi la connexion au-dessus d'une petite boucle de l'espace-temps.

- Remarquons aussi pour une généralisation future à d'autres théories de Jauge, que le changement de phase  $\exp i\delta\varphi$  est la seule transformation autorisée dans la fibre  $F_m$  qui préserve la norme. On dit que  $\mathcal{F}$  est un générateur (élément de l'algèbre de Lie) du groupe  $U(1)$ .

### 3.2.4.6 On retrouve les expressions habituelles de l'électromagnétisme et l'invariance de Jauge

La dérivée covariante et la courbure vient d'être décrite sur un schéma de façon précise mais géométrique. Pour faire des calculs, il nous faut des expressions numériques, et pour cela il faut faire le choix de coordonnées dans chacune des fibres.

Le **choix d'une Jauge** (auss appelé trivialisation du fibré) est le choix d'un axe réel de référence dans chacune des fibres  $F_m$ . Ce choix est arbitraire, mais permet d'exprimer les objets géométriques précédents. (Comme le choix d'axes gradués sur le plan permet de repérer les points par des coordonnées). Dans chaque fibre  $F_m$ , le choix de Jauge revient donc à associer le nombre 1 à un point arbitraire (de module 1)  $r(m)$ , appelé **section de référence**.

**La fonction d'onde :** Par rapport à la section de référence  $r(m)$ , la valeur section  $s(m)$  est caractérisée par le nombre complexe  $\psi(m) \in \mathbb{C}$  en écrivant  $s(m) = \psi(m)r(m)$ . La section  $s$  est donc caractérisée par la **fonction d'onde complexe**  $\psi(m)$ .

**Le potentiel électromagnétique  $\mathcal{A}$  :** En un point donné  $m \in M$ , et pour un vecteur tangent  $\delta m$  donné, l'écart que fait la section de référence  $r$  avec la connexion s'exprime

par la dérivée covariante  $(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) \in F_m$ . Cet écart est une phase infinitésimale car  $r(m)$  est de module 1, et que la connexion conserve la norme. Cet écart s'exprime donc comme

$$(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) = (i\mathcal{A}_{\delta m}) r(m) \quad (3.11)$$

où  $\mathcal{A}_{\delta m}$  est un nombre réel (i.e.  $\mathcal{A}$  est un tenseur de rang 1, ou 1-forme). Voir figure 3.9.

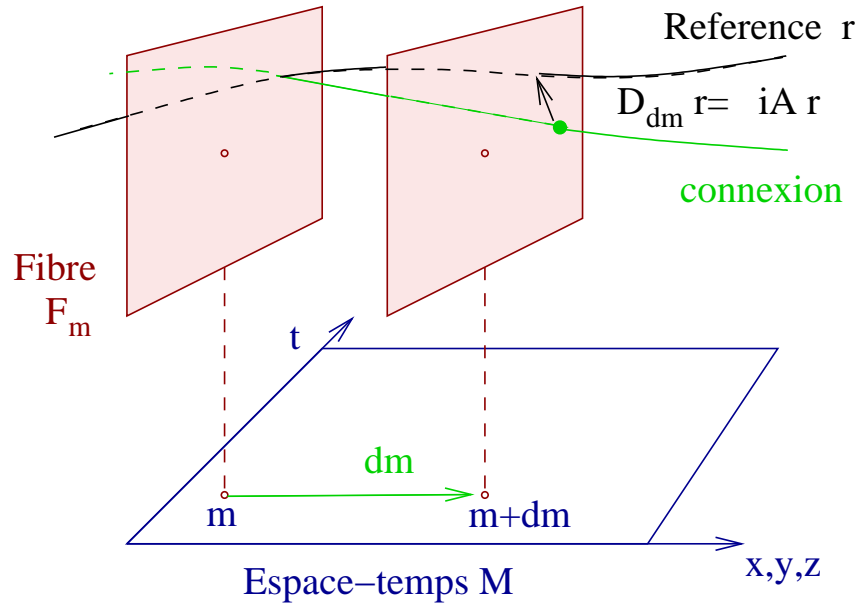


FIG. 3.9 – Le potentiel électromagnétique  $\mathcal{A}$  exprime comment la section de référence  $r$  s'écarte du transport parallèle (ou connexion).

**La dérivée covariante :** L'écart de la section  $s$  par rapport à la section de référence, selon la direction  $\delta m$  est  $ds_{\delta m} = (d\psi)_{\delta m} r$ . Noter que cet écart dépend du choix de  $r$  et n'a donc pas de signification physique. Mais en utilisant cet section de référence, la dérivée covariante se décompose en deux termes, d'après la figure 3.10<sup>6</sup> :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s = ((d\psi)_{\delta m} + i\mathcal{A}_{\delta m} \psi(m)) r$$

Chacun de ces deux termes dépend du choix de  $r$  mais la somme n'en dépend pas.

Ainsi en prenant pour  $\delta m$  tour à tour les quatre vecteurs tangents  $\delta m = \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial t}$ , d'un référentiel donné, la dérivée covariante s'écrit  $\mathcal{D}_{\partial/\partial x} s = (D_x \psi) r$  avec la dérivée covariante de la fonction d'onde déjà introduite plus haut :

$$D_x \psi = \left( (d\psi)_{\partial/\partial x} + i\mathcal{A}_{\partial/\partial x} \psi \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{qA_x}{\hbar} \right) \psi$$

<sup>6</sup>Cette relation s'écrit aussi  $\mathcal{D}(\psi r) = (d\psi) r + \psi \mathcal{D}(r)$ , et s'appelle **la règle de Leibnitz**. Elle sert de définition à la dérivée covariante dans les ouvrages de géométrie.

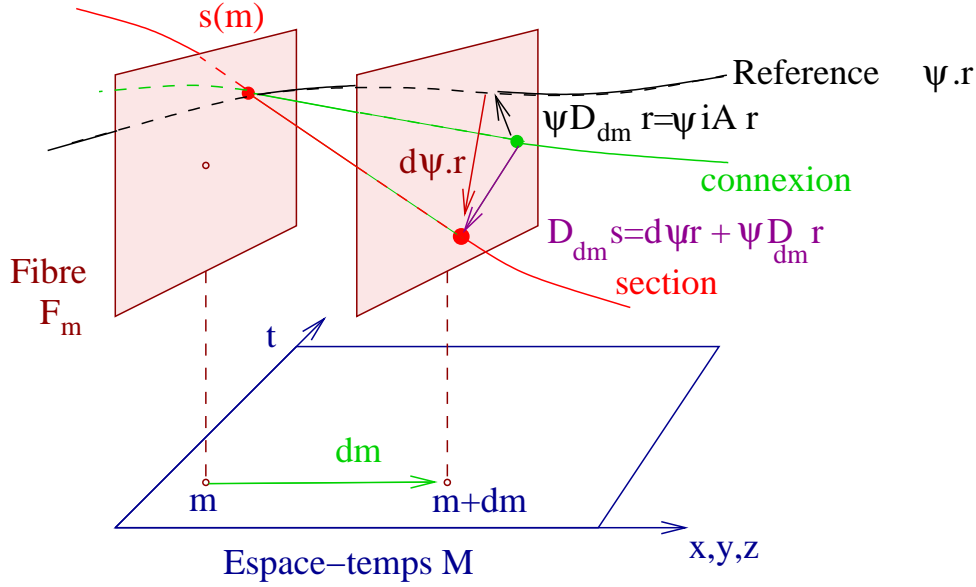


FIG. 3.10 – Décomposition de la dérivée covariante, en utilisant la section de référence  $\psi_m r$  (ici  $\psi_m$  est une constante).

( de même pour  $D_y, D_z, D_t$ ) à condition de poser :

$$\mathcal{A}_{\partial/\partial x} = -\frac{qA_x}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial y} = -\frac{qA_y}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial z} = -\frac{qA_z}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial t} = \frac{qU}{\hbar},$$

**Le tenseur électromagnétique et la courbure  $\mathcal{F}$  :** Montrons que la courbure  $\mathcal{F}$  définie ci-dessus s'identifie avec le tenseur électromagnétique  $F$  de l'électromagnétisme.

Considérons l'exemple où l'on choisit les deux vecteurs déplacements selon des axes du référentiel :  $\delta m_1 = \partial/\partial x$  et  $\delta m_2 = \partial/\partial y$ . Alors on calcule d'après la figure (3.8), et utilisant (3.11),

$$\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} = (\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x)$$

On retrouve donc le tenseur électromagnétique de composante  $F_{x,y} = -\frac{\hbar}{q} \mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} = (\partial_x A_y - \partial_y A_x)$ , etc.. pour les autres composantes. @@@

**Effet d'un changement de Jauge :** Si on change de choix de  $r(m)$  par  $r'(m) = e^{-iq\chi(m)/\hbar} r(m)$  (par une phase car  $r'$  est aussi de module 1), alors comme par définition,  $s(m) = \psi(m)r(m) = \psi'(m)r'(m)$  la valeur de  $\psi'(m)$  est changée par une phase, comme sur la relation (3.9).

De même la valeur de  $\mathcal{A}$  va changer selon les formules de transformation de Jauge (3.6).

**preuve :** car  $i\mathcal{A}'_{\delta m} r' = (\mathcal{D}_{\delta m} r') = (\mathcal{D}_{\delta m} e^{-iq\chi/\hbar} r(m)) = \dots$  ensuite on utilise la règle de Leibnitz évoquée plus haut.  $\dots = -iqe^{-iq\chi/\hbar} d\chi_{\delta m}/\hbar r + e^{-iq\chi/\hbar} \mathcal{D}_{\delta m} r(m) = (-iqd\chi_{\delta m}/\hbar + i\mathcal{A}_{\delta m}) r'$ . Donc  $\mathcal{A}'_{\delta m} = \mathcal{A}_{\delta m} + qd\chi_{\delta m}/\hbar$ , donnant  $A'_x = A_x - \frac{\partial\chi}{\partial x}$ , etc... @@@ problème de signe à trouver...

### Résumé

- En théorie de Jauge de l'électromagnétisme, la particule quantique est une section d'un fibré vectoriel sur l'espace-temps.
- Le champ électromagnétique est en fait décrit par une connexion de ce fibré. La courbure du fibré exprime la présence de champs électrique et magnétique (c'est le tenseur  $F_{\mu\nu}$ ).
- L'équation d'évolution de Schrödinger fait intervenir la dérivée covariante qui exprime l'écart que fait la section avec la connexion du fibré.
- Un choix de Jauge est le choix d'un repère dans chacune des fibres, et permet d'obtenir des expressions en terme de fonction numériques (et champs de tenseur). Mais ces expressions dépendent du choix fait.

#### 3.2.4.7 Généralisation : Théories de Jauge de Yang-Mills

Il se trouve que qu'il est facile de généraliser la description précédente en considérant d'autres espace fibrés vectoriels possibles. Cette simple généralisation permet de décrire les autres théories de Jauges de la nature que sont la **force électro-faible** (électromagnétique et nucléaire faible) et la **force nucléaire forte**, aussi appelée théorie de la **Chromo-Dynamique**.

La force électro-faible nécessite la notion de Champs de Higgs, et la brisure spontanée de symétrie. Pour simplifier, nous esquisserons ici seulement la Chromo-Dynamique.

Cette théorie permet de décrire **les quarks** (qui sont les particules quantiques ; leur fonction d'onde sera la section d'un fibré) qui subissent l'effet d'un champ de Jauge qui est **le champ de gluons** (ce sera la connexion du fibré). Tous ces objets là se trouvent dans les noyaux nucléaires, et forment l'essentiel de celui-ci.

La différence essentielle est que chaque fibre  $F_m$  est maintenant un espace de dimension complexe 3. Ainsi **chaque fibre est isomorphe à  $\mathbb{C}^3$** , mais il n'y a pas de repère privilégié, et donc une invariance par les rotations dans  $\mathbb{C}^3$  qui sont représentées justement par **le groupe SU(3)**.

On peut reprendre la description précédente, et voici les modifications majeures :

- Une section du fibré est une fonction d'onde de quarks. Par rapport à un repère de référence (choix de Jauge) cette section est représentée par 3 fonctions d'ondes ( $\psi_{Rouge}, \psi_{Vert}, \psi_{Bleu}$ ) appelées **les trois couleurs des quarks**. (Bien sur un autre choix de Jauge mélange ces couleurs, qui sont donc arbitraires. Chaque fibre de dimension 3 est appelée "**espace des couleurs**").
- La courbure de la connexion est une rotation infinitésimale dans la fibre  $F_m$  de dimension 3 ; par conséquent cette courbure est un générateur du groupe SU(3). Comme ce groupe est de dimension 8 cela signifie que la courbure est un champ à 8 composantes. Ce sont les **8 champs de gluons** possibles.<sup>7</sup>

---

<sup>7</sup>**Exercice** : Plus généralement, montrer que le groupe  $SU(n)$  est de dimension  $n^2 - 1$ . Aide : montrer que les générateurs de ce groupe (i.e. l'algèbre de Lie) sont des matrices hermitique de trace nulle, et par conséquent compter la dimension des matrices hermitique de trace nulle.

- L'équation de Schrödinger s'écrira de la même manière, en faisant intervenir la dérivée covariante.

En fait, pour que la Chromo-dynamique ait une utilité par rapport à l'expérience, il est nécessaire d'apporter deux améliorations par rapport à la description donnée ici :

1. Considérer la **version relativiste** (en effet les quarks sont "légers" (5 MeV) et toujours en régime ultra-relativiste dans les noyaux nucléaires : par exemple l'essentiel de la masse du proton et du neutron (938 MeV) provient de l'énergie cinétique des quarks et gluons, qui se manifeste par une masse d'après  $E = mc^2$ . La matière ordinaire de notre monde de tous les jours est donc faite d'énergie cinétique en quasi-totalité.
2. Les quarks influencent les gluons, et il est donc important de **quantifier le champ de gluons** (d'après une remarque de la section suivante). Cela consiste à quantifier la connexion...ce qui n'est pas chose aisée. De nombreux physiciens et mathématiciens cherchent encore une formulation élégante et géométrique de cela.

### 3.2.5 Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique

Le Hamiltonien précédent (3.7) décrit la dynamique d'une particule *quantique sous l'influence* d'un champ électromagnétique *classique* dit extérieur. Il est très important de comprendre qu'il n'est pas possible de décrire l'action inverse i.e. l'influence de la particule quantique sur le champ classique, bien que cette influence réciproque est bien présente dans la nature. Nous allons montrer que pour le faire il est ***nécessaire de considérer le champ électromagnétique comme quantique***.

Ceci est très général : on peut parfaitement avoir un modèle physique cohérent décrivant l'influence d'un sous système classique sur un sous-système quantique, mais pas l'inverse. On peut bien sûr avoir un modèle cohérent décrivant l'interaction entre deux systèmes classiques (par exemple l'électrodynamique classique, qui décrit un champ classique avec des particules chargées classiques), ou entre deux systèmes quantiques.

L'exemple suivant explique simplement pourquoi.

En électrodynamique classique, un électron accéléré émet une onde électromagnétique (rayonnement), issue du lieu  $x$  où l'électron est présent.

Si maintenant, cet électron est une fonction d'onde quantique localisée en  $x_1$  (toujours accéléré) notée  $|x_1\rangle$  on s'attend à ce qu'il émette une onde électromagnétique issue de  $x_1$  notée  $|em_1\rangle$ , le résultat serait alors  $|x_1\rangle \otimes |em_1\rangle$ . De même si l'électron est en  $|x_2\rangle$ , on obtient  $|x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$ . Mais la mécanique quantique de l'électron permet un état superposé comme  $|\psi\rangle = |x_1\rangle + |x_2\rangle$ , (où l'onde de l'électron est dé-localisée) et qui d'après le *principe de superposition*, devrait donner :

$$|\text{etat final}\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$$

c'est à dire une superposition de deux ondes électromagnétiques, ce qui ne rentre pas dans le cadre de l'électromagnétisme classique, mais nécessite bien une description quantique.

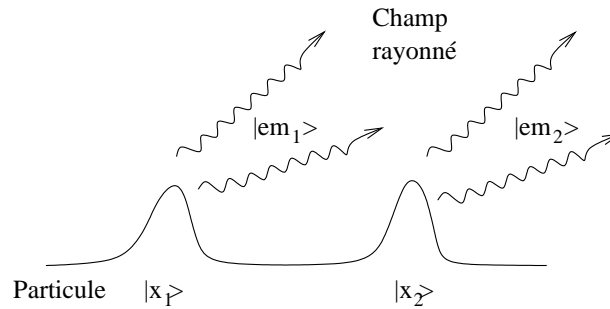


FIG. 3.11 – Schéma montrant l'état  $|etat\ final\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$ .

Cela est relié à une importante problématique qui date depuis les années 1920 et encore actuelle qui est de rechercher la **théorie quantique de la gravitation**. C'est la même situation que précédente, avec le champ de gravitation remplaçant le champ électromagnétique. En effet la théorie d'Einstein de la relativité générale est une théorie classique, qui décrit la dynamique du champ de gravitation classique (plus précisément le champ métrique de l'espace-temps). Dans cette théorie classique, le champ de gravitation influence la matière et inversement la matière influence le champ de gravitation. Mais la théorie quantique apparue dans les mêmes années, décrit la matière comme quantique. Puisque celle-ci influence le champ de gravitation, il faut donc selon cette analyse (peut être trop naïve), une théorie quantique de la gravitation. La recherche d'une telle théorie est toujours d'actualité. Les efforts les plus actifs en ce moments concernent la "M-théorie". Ref : [http://www.damtp.cam.ac.uk/user/gr/public/qg\\_ss.html](http://www.damtp.cam.ac.uk/user/gr/public/qg_ss.html).

### 3.3 Conseils de Lecture

- Sur l'invariance de Jauge : Cohen-Tannoudji [CBF], complément  $H_{III}$ .
- Niveaux de Landau : Cohen-Tannoudji [CBF], complément  $E_{VI}$ .
- Effet Aharanov-Bohm : Sakurai [J.J85], chapitre 2.6.

**Pour approfondir :**

- **L'aspect géométrique de l'électromagnétisme et des théorie de Jauge :**
  - Nakahara [Nak].

### 3.4 Correction des exercices

**Exercice 24 page 122** on a  $\vec{x} = R^{-1}\vec{x}'$  et la valeur de la fonction d'onde n'est pas changée lors de la rotation :  $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$ , donc :

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R^{-1}\vec{x}') \quad (3.12)$$

(situation semblable au cas de la translation, figure (2.1)).

On peut obtenir le même résultat avec la notation d'opérateurs :  $\psi'(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | R | \psi \rangle = \langle R^\dagger \vec{x}' | \psi \rangle = \langle R^{-1} \vec{x}' | \psi \rangle = \psi(R^{-1} \vec{x}')$ , où on a utilisé le fait que l'opérateur rotation est unitaire.

# Chapitre 4

## Particule de spin 1/2

Dans ce chapitre nous montrons comment décrire les degrés de liberté interne d'une particule formés par son spin (moment angulaire intrinsèque).

Jusqu'à présent, l'état quantique d'une particule est décrite par sa fonction d'onde  $|\psi\rangle$ . Celle-ci est vue comme un vecteur de l'espace de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$  (qui est de dimension infinie).

Pour certaines particules (électron, neutron, protons, . . . voir plus loin) l'expérience montre qu'elles possèdent un **moment cinétique intrinsèque**  $\vec{s}$ , appelé **spin**, et qu'il y a seulement *deux états de spin distincts*. "to spin" signifie "tourner sur soi-même". Nous verrons que c'est l'image que l'on peut se faire d'un électron. La direction du spin est la direction de l'axe rotation.

Dans l'expérience de "Stern-Gerlach" un faisceau de particules neutres (comme le neutron) traverse un champ magnétique non homogène. Le champ magnétique interagit avec le moment cinétique  $\vec{s}$  de chaque particule, et par conséquent la trajectoire de chaque particule est défléchie selon la valeur de son moment cinétique intrinsèque  $\vec{s}$ . On observe deux trajectoires distinctes à la sortie du dispositif, correspondant à deux états de spin orientés parallèlement (ou anti-parallèlement) à l'axe  $z$ , que l'on notera respectivement  $|+_z\rangle$ ,  $|-_z\rangle$ .

Le détail sur l'interaction du spin avec le champ magnétique sera présenté dans la section 4.9.

### 4.1 L'espace des états de spin

Dans cette section, on part de deux principes à priori :

1. Tout d'abord le principe suggéré par l'expérience (et le formalisme quantique, autorisant les superpositions d'états) que l'état de spin  $|s\rangle$  de la particule est décrit par un vecteur dans un espace noté  $\mathcal{H}_{spin}$  qui est **de dimension deux**, engendré par les deux états *orthogonaux*  $|+_z\rangle, |-_z\rangle$ . Ces deux états correspondent à des spins hauts et

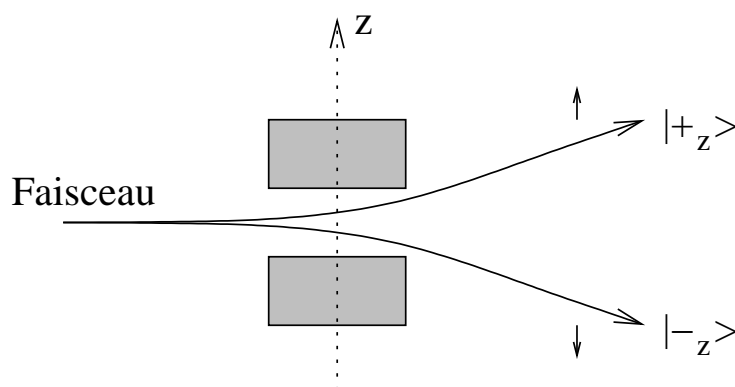


FIG. 4.1 – Dispositif de Stern-Gerlach séparant les états de spin  $|+_z\rangle$  ou  $|-_z\rangle$  de la particule.

bas parallèles à l'axe  $z$ . Autrement dit un état de spin général est de la forme <sup>1</sup>

$$|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

2. Le deuxième principe est qu'*il n'y a pas de direction privilégiée* (dans l'univers). Le problème dans l'écriture de l'état  $|s\rangle$  ci-dessus, est que l'axe  $z$  semble jouer un rôle privilégié. Il nous faut maintenant comprendre comment donner une description d'un état de spin sans faire référence à une direction privilégiée.

### Remarques :

- Une autre question qui se pose est que les états  $|+_z\rangle, |-_z\rangle$  correspondent à une direction du moment cinétique particulière dans l'espace (haut et bas). Est-ce qu'il en est de même pour l'état général  $|s\rangle$ ? A quelle direction  $\vec{s}$  correspond t-il? On répondra à cette question dans la section 4.4.
- La description quantique du spin est plus simple que la description de la fonction d'onde car l'espace de Hilbert est ici de dimension 2 seulement. Par contre, l'interprétation géométrique de cet espace est assez délicate, nous allons donc le faire de façon progressive.
- Remarque très importante : lorsqu'il s'agit du spin 1/2 il est question de deux espaces qui entrent en jeu et qu'il ne faut pas confondre : l'*espace quantique du spin*  $\mathcal{H}_{spin}$  définit plus haut qui est un espace vectoriel complexe de dimension deux, et l'*espace ordinaire*  $\mathbb{R}^3$  qui est un espace réel de dimension 3 avec les variables de position

<sup>1</sup>Pour relier cet état  $|s\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$  à la mesure du spin selon l'axe  $z$ , rappelons que le principe de la mesure stipule que la probabilité d'observer la particule dans le faisceau supérieur sera alors  $P_+ = |\langle +|s\rangle|^2 / \langle s|s\rangle = |a|^2 / (|a|^2 + |b|^2)$  ( et probabilité  $P_- = |\langle -|s\rangle|^2 / \langle s|s\rangle = |b|^2 / (|a|^2 + |b|^2)$  de l'observer dans le faisceau du bas). Après la détection dans le faisceau du haut, par exemple, l'état de spin sera  $|s\rangle = |+\rangle$ .

$(x, y, z)$ .

La première observation est que dans l'espace ordinaire, les états  $|+z\rangle$ ,  $|-z\rangle$  forment un angle de  $180^\circ$  entre eux, alors que dans l'espace de spin  $\mathcal{H}_{spin}$ , ils sont orthogonaux, et forment donc un angle de  $90^\circ$ . Imaginons un état de spin  $|s_\theta\rangle$  intermédiaire, qui dans l'espace ordinaire, est l'état  $|+z\rangle$  tourné de l'angle  $\theta$  autour de l'axe  $y$ . Ainsi  $|s_{\theta=0}\rangle = |+z\rangle$  et  $|s_{\theta=\pi}\rangle = |-z\rangle$ . Par conséquent dans l'espace de spin :

$$|s_\theta\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-z\rangle \quad (4.1)$$

décrit un état de spin quelconque dans le plan  $(x, z)$ . Cela est clair sur la figure 4.2.

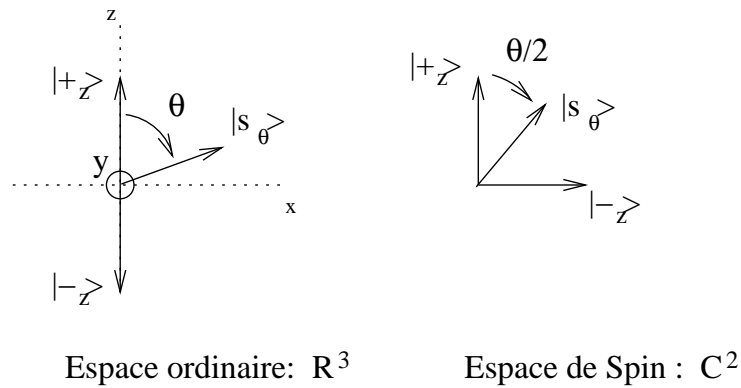


FIG. 4.2 – Pour un spin dans le plan  $(x, z)$ , l'espace ordinaire et l'espace de spin sont directement reliés.

## 4.2 Rotation de $2\pi$ et $4\pi$ d'un spin

L'état  $|s_\theta\rangle$  que nous venons de construire s'obtient par l'action d'une rotation d'un angle  $\theta$  autour de l'axe  $y$ . On note  $\hat{R}_y(\theta)$  l'opérateur unitaire qui effectue cette opération et donc :

$$|s_\theta\rangle = \hat{R}_y(\theta)|+z\rangle$$

On observe sur la figure (4.2), que une rotation de  $(2\pi)$  change le signe du vecteur dans l'espace de spin :

$$\hat{R}_y(2\pi)|+z\rangle = -|+z\rangle$$

Seulement une rotation de  $(4\pi)$  ramène l'état de spin à son état initial :

$$\hat{R}_y(4\pi)|+z\rangle = |+z\rangle$$

Ce signe  $(-)$  est assez surprenant. On peut penser au premier abord qu'il est non détectable car une mesure détecte des probabilités, le module des amplitudes, et non pas les phases.

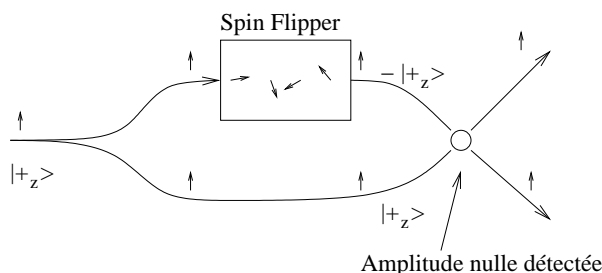


FIG. 4.3 – Le spin-flipper effectue une rotation de  $360^\circ$  à la direction du spin. Par conséquent à la sortie l'état est  $-|+_z\rangle$ , et au lieu d'interférence, l'amplitude est  $|+_z\rangle - |+_z\rangle = 0$ .

Mais on peut imaginer de séparer le faisceau en deux et de détecter les phases par un phénomène d'interférences, comme sur la figure (4.3). Une interprétation géométrique est de dire que l'espace de spin est un **double recouvrement** de l'espace des directions de l'espace ordinaire. Ainsi une rotation de  $2\pi$  ne suffit pas à obtenir l'état initial, il faut  $4\pi$ . Voir figure (4.4). Voir plus loin une discussion plus précise.

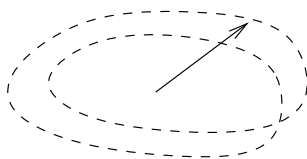


FIG. 4.4 – Schéma du double recouvrement.

## 4.3 Générateurs des rotations et matrices de rotation

### 4.3.1 Rotation autour de l'axe $y$

Les opérateurs de rotation  $\hat{R}_y(\theta)$  autour de l'axe  $y$  forment un groupe à un paramètre  $\theta$  d'après les 3 critères (4.2) :

$$\hat{R}_y(\theta_1)\hat{R}_y(\theta_2) = \hat{R}_y(\theta_1 + \theta_2) \quad : \text{loi de composition} \quad (4.2)$$

$$\hat{R}_y(0) = Id \quad : \text{élément neutre} \quad (4.3)$$

$$\left(\hat{R}_y(\theta)\right)^{-1} = \hat{R}_y(-\theta) \quad : \text{inverse} \quad (4.4)$$

et l'on peut considérer le générateur correspondant à ces rotations que l'on notera  $\hat{S}_y$ , définit comme pour eq(2.6), par :

$$\frac{d|s_\theta\rangle}{d\theta} = \left(\frac{-i\hat{S}_y}{\hbar}\right)|s_\theta\rangle \quad (4.5)$$

$$\hat{R}_y(\theta) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_y\theta}{\hbar}\right) \quad (4.6)$$

**Propriété**

Dans la base  $|\pm_z\rangle$ , l'opérateur  $\hat{S}_y$  est représenté par la matrice :

$$\hat{S}_y \equiv_{(\text{base } |\pm_z\rangle)} \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y,$$

avec  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  : matrice de Pauli

et les valeurs propres de l'opérateur  $\hat{S}_y$  sont  $(\pm\hbar/2)$ .

**preuve :** Dans la base  $|\pm_z\rangle$ , les équations (4.1,4.5) donnent

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\sin\theta/2 \\ \frac{1}{2}\cos\theta/2 \end{pmatrix} = \frac{-i\hat{S}_y}{\hbar} \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{pmatrix}, \quad \forall\theta$$

d'où le résultat recherché pour la matrice de  $\hat{S}_y$ . Ensuite il suffit de diagonaliser cette matrice. Les valeurs propres sont les racines du polynôme caractéristique  $P(\lambda) = \det(\hat{S}_y - \lambda Id) = \lambda^2 - (\hbar/2)^2$ , donc  $\lambda = \pm\hbar/2$  ■

**4.3.2 Rotation autour de l'axe  $z$** 

On recherche maintenant le générateur  $\hat{S}_z$  des rotations autour de l'axe  $z$ .

Comme pour  $\hat{S}_y$ , ses valeurs propres sont  $(\pm\hbar/2)$  (car il n'y a pas de direction privilégiée), et les vecteurs propres sont  $|\pm_z\rangle$  car ils sont situés sur l'axe de rotation qui est fixe. Donc :

$$\hat{S}_z \equiv_{(\text{base } |\pm_z\rangle)} \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

avec  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  : matrice de Pauli

et comme ci-dessus :

$$\hat{R}_z(\theta) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_z\theta}{\hbar}\right)$$

### 4.3.3 Rotation autour de l'axe $x$

Il nous reste à trouver  $\hat{S}_x$ .

**Propriété :**

$$\hat{S}_x \equiv_{(base\ |\pm_z\rangle)} \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x,$$

avec  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  : matrice de Pauli

**preuve :**

Pour trouver  $\hat{S}_x$ , une astuce est d'observer (figure 4.5) que si  $|s_\theta\rangle = \hat{R}_x(\theta)|+_z\rangle$ , alors :

$$|s_\theta\rangle = \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle$$

Or  $\frac{d|s_\theta\rangle}{d\theta} = \left(\frac{-i\hat{S}_x}{\hbar}\right)|s_\theta\rangle$  et  $\frac{d|s_\theta\rangle}{d\theta} = \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{-i\hat{S}_y}{\hbar}\right)\hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle = \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{-i\hat{S}_y}{\hbar}\right)\hat{R}_z\left(+\frac{\pi}{2}\right)|s_\theta\rangle$ .

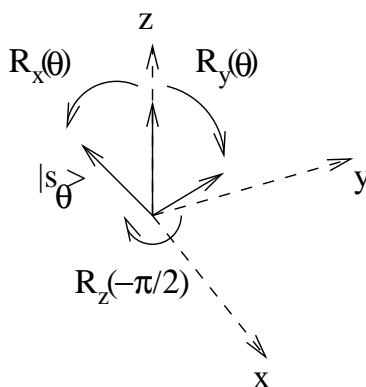


FIG. 4.5 – Cette figure montre que  $|s_\theta\rangle = \hat{R}_x(\theta)|+_z\rangle = \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\hat{R}_y(\theta)|+_z\rangle$ . (Mais attention  $\hat{R}_x(\theta) \neq \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\hat{R}_y(\theta)$ , à vérifier sur l'état  $|+_y\rangle$ ).

L'identification pour tout  $\theta$  donne :

$$\left(\frac{-i\hat{S}_x}{\hbar}\right) = \hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{-i\hat{S}_y}{\hbar}\right)\hat{R}_z\left(+\frac{\pi}{2}\right)$$

Or

$$\hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_z(-\pi/2)}{\hbar}\right) = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

donnant le résultat recherché.

**Remarques :**

- Les vecteurs propres respectifs des opérateurs  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  correspondent à des états de spins respect. parallèles aux axes  $x, y, z$  car ils qui sont invariants par ces rotations.
- Les opérateurs autoadjoints  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  sont interprétés ici comme des générateurs des opérateurs unitaires de rotation  $\hat{R}_x(\theta), \hat{R}_y(\theta), \hat{R}_z(\theta)$ . Comme remarqué page (68), une autre interprétation est que ce sont des observables lors d'une opération de mesure. Par exemple dans l'expérience de Stern-Gerlach ci-dessus, à cause de l'orientation particulière du dispositif, la mesure est associée à l'observable  $\hat{S}_z$ . Il y a donc deux résultats possibles de la mesure que sont les états  $|+_z\rangle$  ou  $|-_z\rangle$ . Voir TD .

**Exercice : expression d'un état de spin  $|s_{\theta,\varphi}\rangle$  général** Un état de spin  $|s_{\theta,\varphi}\rangle$  associé à la direction  $(\theta, \varphi)$  en coordonnées sphériques est obtenu par

$$|s_{\theta,\varphi}\rangle = \hat{R}_z(\varphi) \hat{R}_y(\theta) |+_z\rangle$$

Montrer que :

$$|s_{\theta,\varphi}\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |+_z\rangle + e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) |-_z\rangle$$

**Exercice : l'opérateur  $\vec{S}^2$**  On considère l'opérateur

$$\vec{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

Montrer que dans l'espace  $\mathcal{H}_{spin}$  cet opérateur est multiple de l'identité :

$$\vec{S}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \frac{3}{4} \hat{I}$$

Ce résultat sera obtenu en plus grande généralité en section (7.10) page page 234.

Solution : calculer avec les matrices  $2 \times 2$ , dans la base  $|\pm_z\rangle$ .

**Remarque (\*) :** On peut obtenir le résultat  $\vec{S}^2 \propto Id$  par des arguments de symétrie (c'est le "lemme de Schur", voir plus loin) : (1) l'opérateur  $\vec{S}^2$  est invariant par rotation, et donc si  $\vec{S}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$  est vecteur propre et  $|\psi'\rangle = \hat{R}|\psi\rangle$ , alors  $\vec{S}^2|\psi'\rangle = \vec{S}^2\hat{R}|\psi\rangle = \hat{R}\vec{S}^2|\psi\rangle = \lambda|\psi'\rangle$ . Or tout vecteur de  $\mathcal{H}_{spin}$  s'obtient de cette façon.

**Exercice : états de base des opérateurs  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$**  Appelons  $|+_x\rangle, |-_x\rangle$ , les vecteurs propres de  $\hat{S}_x$  de valeurs propres respectives  $(+\hbar/2, -\hbar/2)$ , et de même pour  $\hat{S}_y, \hat{S}_z$ .

Exprimer ces vecteurs dans la base  $|\pm_z\rangle$ .

## 4.4 Représentation de l'état de spin sur la sphère de Bloch

La figure (4.2) montre la relation entre l'espace ordinaire  $\mathbb{R}^3$  et l'espace de spin lorsque le spin est dans le plan  $(x, z)$ . Il y a une relation générale, pour n'importe qu'elle direction du spin que voici.

Supposons donné un état de spin quelconque :

$$|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin}, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

On définit alors le vecteur  $\vec{s} \in \mathbb{R}^3$  par les valeurs moyennes de l'observable  $\hat{S}$  dans l'état  $|s\rangle$  :

$$\vec{s} = \langle \hat{S} \rangle \quad (4.7)$$

c'est à dire :

$$\vec{s} = \begin{cases} s_x = \frac{\langle s | \hat{S}_x | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \\ s_y = \frac{\langle s | \hat{S}_y | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \\ s_z = \frac{\langle s | \hat{S}_z | s \rangle}{\langle s | s \rangle} \end{cases}$$

**Propriété :** Le vecteur  $\vec{s}$  caractérise l'état quantique  $|s\rangle$  à une constante près (phase près si  $|s\rangle$  est normalisé). Plus précisément, le vecteur  $\vec{s}$  de l'espace ordinaire, en coordonnées sphériques  $\vec{s} = (\theta, \varphi, \|\vec{s}\|)$ , est relié aux composantes  $(a, b)$  de l'état  $|s\rangle$  dans l'espace de Spin par :

$$\begin{aligned} \|\vec{s}\| &= \frac{\hbar}{2} \quad : \text{norme fixée} \\ z = \frac{a}{b} &= \cotg\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi} \in \mathbb{C} : \quad \text{si } b \neq 0 \end{aligned}$$

L'interprétation graphique de cette relation est que  $z = a/b$  est la **projection stéréographique** du vecteur  $\vec{s}$ , voir figure (4.6).

Il y a donc une relation bijective entre la direction du vecteur  $\vec{s}$ , et l'état quantique normalisé  $|s\rangle$  (à une phase près).

**Remarques :** La norme  $\|\vec{s}\| = \frac{\hbar}{2}$  n'est pas surprenante. La direction  $(\theta, \varphi)$  du vecteur  $\vec{s}$ , ne dépend que du quotient  $z = a/b \in \mathbb{C}$ . Cela est attendu, car en général, le résultat des valeurs moyenne ne change pas si on multiplie le vecteur par une constante complexe, donc  $|s'\rangle = (a/b)|+_z\rangle + |-_z\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$  donne le même résultat  $|s\rangle$ .

**preuve :** (TD) On pourrait calculer brutalement les valeurs moyennes  $\langle \hat{S} \rangle$ , mais ce n'est pas nécessaire : on vérifie d'abord dans le cas  $\varphi = 0$ , lorsque  $\vec{s}$  est dans le plan  $(x, z)$ . Cela correspond à la figure (4.2). On obtient alors  $z = \cotg(\theta/2)$  sans calcul, en se référant à la figure (4.7).

Ensuite on obtient le cas général, en effectuant une rotation autour de l'axe  $z$  grâce à l'opérateur  $\hat{R}_z(\varphi)$ . ■

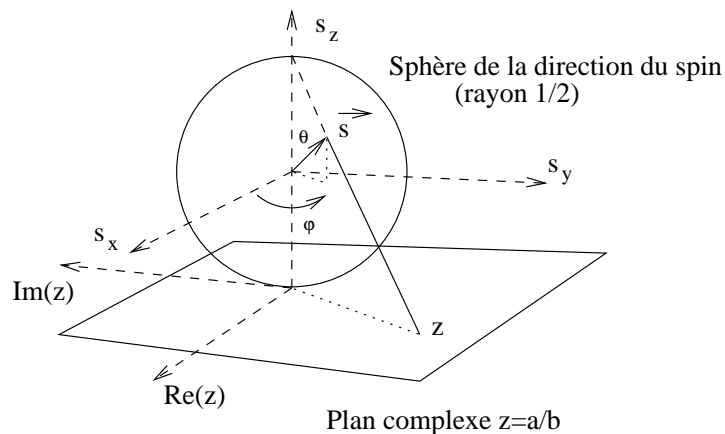


FIG. 4.6 – Projection stéréographique relie le vecteur  $\vec{s} = \langle \hat{S} \rangle$  et les composantes  $(a, b)$  de l'état quantique  $|s\rangle = a|+_z\rangle + b|-_z\rangle$ .

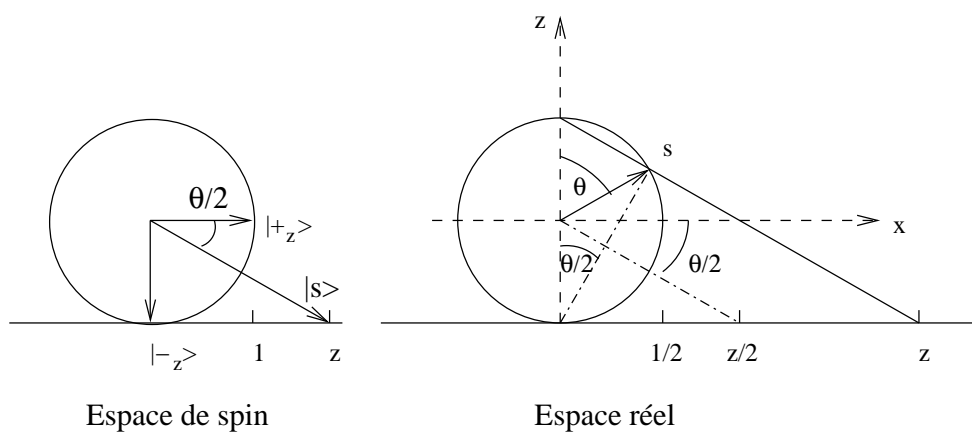


FIG. 4.7 – Figure montrant que  $z = \cotg(\theta/2)$  pour la projection stéréographique.

**L'espace projectif**  $\mathbb{C}P^1 = P(\mathbb{C}^2)$  (\*) L'association d'une sphère (ici sphère des vecteurs  $\vec{s}$ ) à partir d'un espace vectoriel de dimension deux (ici  $\mathcal{H}_{spin}$ ) est générale et ne se limite pas au cas du spin. Voici la construction générale dans le langage de la mécanique quantique.

Soit  $\mathcal{H}$  un espace vectoriel (espace de Hilbert quantique) de dimension  $n$ . En terme de mesure, il est impossible de distinguer le vecteur  $|\psi\rangle$  du vecteur  $|\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle$  pour tout  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Pour cette raison, on appelle **rayon quantique** l'ensemble des vecteurs proportionnels entre eux. Ainsi le rayon quantique de  $|\psi\rangle$ , noté  $[\psi]$ , est :

$$[\psi] = \{|\psi'\rangle, \text{ tels que } \exists \lambda \in \mathbb{C}, |\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle\}.$$

L'ensemble des rayons est appelé l'espace projectif de  $\mathcal{H}$ , et est noté  $P(\mathcal{H})$ .

Par construction, un rayon est une famille à une dimension complexe (obtenu en faisant varier  $\lambda \in \mathbb{C}$ ), et l'ensemble des rayons est donc un espace de dimension complexe  $n - 1$ , donc de dimension réelle  $2(n - 1)$ , aussi noté  $\mathbb{C}P^{(n-1)}$ .

Si  $\mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2$  est un espace à deux états, (comme le spin), le paragraphe précédent a montré que l'espace projectif est une sphère. C'est à dire  $\mathbb{C}P^1 = P(\mathbb{C}^2) = S^2$ . Dans un problème à deux états, il est souvent commode de représenter l'évolution quantique sur cette sphère, aussi appelée **sphère de Riemann** ou sphère de Bloch.

## 4.5 Groupe SU(2) de rotation du spin, et relations de commutation

### 4.5.1 Non commutativité du groupe et relations de commutation

Si on considère deux rotations différentes autour d'axes différents, par exemple  $\hat{R}_x(\alpha)$  et  $\hat{R}_y(\beta)$ , alors en général le résultat de la combinaison de ces deux rotations dépend de l'ordre avec lequel on les fait :

$$\hat{R}_x(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \neq \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_x(\alpha)$$

Cela est évident sur l'exemple de la figure 4.8. On dit que les deux opérateurs ne commutent pas car  $[\hat{R}_x(\alpha), \hat{R}_y(\beta)] = \hat{R}_x(\alpha)\hat{R}_y(\beta) - \hat{R}_y(\beta)\hat{R}_x(\alpha) \neq 0$ .

Nous allons établir maintenant une relation importante qui montre que la non commutativité de ces rotations est liée à la non commutativité de leur générateurs.

Remarquer que  $\hat{R}_y(\beta)\hat{R}_x(\alpha) \neq \hat{R}_x(\alpha)\hat{R}_y(\beta) \Leftrightarrow \hat{R}_y^{-1}(\beta)\hat{R}_x^{-1}(\alpha)\hat{R}_y(\beta)\hat{R}_x(\alpha) \neq I$ . On va donc calculer  $\hat{R}_y^{-1}\hat{R}_x^{-1}\hat{R}_y\hat{R}_x$ . Voir figure 4.9.

On pose pour simplifier :  $A = -i\hat{S}_x\alpha/\hbar$ ,  $B = -i\hat{S}_y\beta/\hbar$ , et supposons que les angles de rotation sont très petits  $\alpha, \beta \ll 1$ .

On a alors

$$\hat{R}_x(\alpha) = \exp\left(-i\hat{S}_x\alpha/\hbar\right) = \exp(A) \simeq 1 + A + \frac{1}{2}A^2 + o(\alpha^2)$$

et de même pour  $\hat{R}_y(\beta)$ .

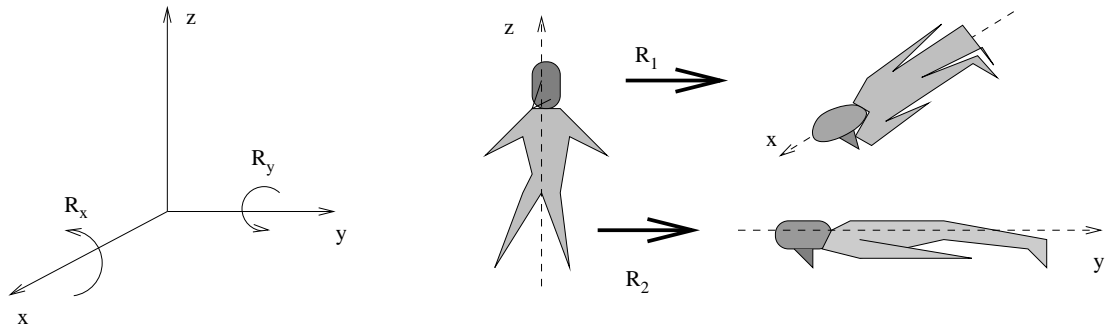


FIG. 4.8 – Cet exemple montre que les deux rotations suivantes ne commutent pas :  $R_1 = R_x(\frac{\pi}{2})R_y(\frac{\pi}{2}) \neq R_2 = R_y(\frac{\pi}{2})R_x(\frac{\pi}{2})$

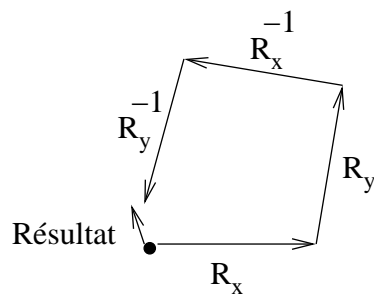


FIG. 4.9 – Non commutativité :  $R_y^{-1}R_x^{-1}R_yR_x \neq I$

Alors

$$\begin{aligned} R_y R_x &= \left(1 + B + \frac{1}{2}B^2\right) \left(1 + A + \frac{1}{2}A^2\right) \\ &= 1 + A + B + BA + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2 + \dots \end{aligned}$$

$$R_y^{-1} R_x^{-1} = 1 - A - B + BA + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2 + \dots$$

donc

$$\begin{aligned} R_y^{-1} R_x^{-1} R_y R_x &= \dots = 1 + BA - AB + \dots = 1 + [B, A] + \dots \\ &= Id - \frac{\alpha\beta}{\hbar^2} [\hat{S}_y, \hat{S}_x] + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta) \end{aligned}$$

Cette dernière relation importante montre une *signification des relations de commutation en mécanique quantique* : si les générateurs commutent, alors les éléments du groupe commutent, et réciproquement. (C'est dans le cadre de l'interprétation des opérateurs auto-adjoints comme générateurs).

Il est donc important de calculer les commutateurs entre les générateurs. On trouve :

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_z \quad (4.8)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x,$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

**preuve** : le calcul se fait avec les matrices par exemple.  $\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv i\hbar \hat{S}_z$ . Comme il n'y a pas d'axe privilégié, le résultat est identique en permutant les axes. ■

Ainsi

$$R_y^{-1}(\beta) R_x^{-1}(\alpha) R_y(\beta) R_x(\alpha) = Id + i \frac{\alpha\beta}{\hbar} \hat{S}_z + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta) = R_z(-\alpha\beta) + o(\alpha^2, \beta^2, \alpha\beta)$$

qui s'interprète en disant que au premier ordre, la suite des opérations (infinitésimales)  $R_y^{-1}(\beta)R_x^{-1}(\alpha)R_y(\beta)R_x(\alpha)$  est équivalent à une rotation infinitésimale d'un angle  $(-\alpha\beta)$  autour de l'axe  $z$ .

Noter que nous avons établi ces résultats pour la rotation d'un spin quantique, mais qu'ils sont valables aussi pour la rotation d'un objet solide en mécanique classique.

### 4.5.2 Rotation autour d'un axe $\vec{u}$ quelconque

Nous avons défini au dessus les opérateurs de rotation du spin et les générateurs autour des axes  $x, y, z$ . Plus généralement, soit  $\vec{u} \in \mathbb{R}$  un vecteur de unitaire (i.e de longueur 1) dans une direction quelconque.

On pose :

$$\hat{S}_{\vec{u}} = \vec{u} \cdot \hat{\vec{S}} = u_x \hat{S}_x + u_y \hat{S}_y + u_z \hat{S}_z \equiv \frac{\hbar}{2} (\vec{u} \cdot \vec{\sigma}) \quad (4.9)$$

et

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right) \quad (4.10)$$

$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$  est l'opérateur de rotation du spin d'un angle  $\alpha$  autour de l'axe  $\vec{u}$ , et  $\hat{S}_{\vec{u}}$  est le générateur de cette rotation.

(Remarquer que l'expression de  $\hat{R}_z(\theta)$  ci-dessus est un cas particulier de cette formule avec  $\vec{u} = (0, 0, 1)$  pointant vers l'axe  $z$ ; et de même pour les opérateurs  $\hat{R}_x(\theta)$  et  $\hat{R}_y(\theta)$ ).

### 4.5.3 Algèbre de Lie des rotations

Pour mieux comprendre ce qui précède, observer que les relations de commutation ci-dessus (4.8), montrent que les trois générateurs  $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$  ne commutent pas, mais leur commutateur est encore un de ces trois opérateurs. Comme défini page 76, cela signifie que ces trois opérateurs forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 3, appelée **algèbre de Lie des rotations**, notée  $\mathcal{R}$ , formée par les combinaisons linéaires de la forme :

$$\hat{S}_{\vec{U}} = U_x \hat{S}_x + U_y \hat{S}_y + U_z \hat{S}_z = \vec{U} \cdot \hat{\vec{S}} \in \mathcal{R}, \quad \vec{U} = (U_x, U_y, U_z) \in \mathbb{R}^3$$

et (4.8) nous assure que  $\frac{1}{i} [\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] \in \mathcal{R}$ .

**Exercice 25** montrer que pour  $\vec{U}, \vec{V} \in \mathbb{R}^3$ ,

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] = \hat{S}_{\vec{U} \wedge \vec{V}}$$

#### 4.5.4 Groupe de Lie des rotations

En posant :

$$\vec{U} = \alpha \vec{u}, \quad \alpha = |\vec{U}|, \quad \vec{u} \text{ unitaire}$$

on peut écrire

$$\hat{R}_{\vec{U}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{S}_{\vec{U}}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{S}_{\vec{u}}\right) = \hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$$

qui est une rotation d'un angle  $\alpha$  autour de l'axe  $\vec{u}$ .

On a mentionné page 94, un résultat général que en prenant l'exponentielle des éléments d'une algèbre de Lie d'opérateurs, on obtient un groupe de Lie. Ainsi, ici, les opérateurs de rotation  $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$  (pour différentes valeurs de  $\vec{u}, \alpha$ ) forment *un groupe* de Lie de dimension 3, noté  $R_{spin}$  (ou encore  $Spin(\mathbb{R}^3)$  dans la littérature) :

$$\begin{aligned} \hat{R}_1 \hat{R}_2 &= \hat{R}_3 && \text{: loi de composition interne} \\ \hat{R}_{\vec{u}}(0) &= Id && \text{: élément neutre} \\ \left(\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)\right)^{-1} &= \hat{R}_{\vec{u}}(-\alpha) && \text{: rotation inverse} \end{aligned}$$

(la première relation signifie la chose non triviale que la composition successive de deux rotation est à nouveau une certaine rotation).

Pour spécifier la rotation  $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$ , il faut trois paramètres : la direction  $(\theta, \varphi)$  de l'axe  $\vec{u}$ , et l'angle de rotation  $\alpha$ , ou encore  $\vec{U} = \alpha \vec{u} \in \mathbb{R}^3$ . Pour cela on dit que c'est un groupe à trois paramètres continus, ou un **groupe de Lie de dimension trois**.

#### 4.5.5 Représentation des opérateurs de rotation dans une base : groupe des matrices SU(2)

Nous allons montrer que le groupe de rotation du spin 1/2 est identique à un groupe de matrices appelé groupe SU(2).

Considérons un opérateur de rotation de spin 1/2, de la forme (4.10). Dans la base  $(|+z\rangle, |-z\rangle)$ , cet opérateur unitaire est représenté par une matrice unitaire  $2 \times 2$  :

$$M_{\vec{u}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \langle +|\hat{R}|+ \rangle & \langle +|\hat{R}|- \rangle \\ \langle -|\hat{R}|+ \rangle & \langle -|\hat{R}|- \rangle \end{pmatrix}$$

C'est une matrice complexe  $2 \times 2$  de déterminant un, et unitaire.

De telles matrices, forment un groupe appelé *le groupe Spécial Unitaire SU(2)* :

$$SU(2) = \{M \in Mat_2(\mathbb{C}) / \det(M) = 1, M^+ = M^{-1}\}$$

(on vérifie facilement que cet ensemble forme un groupe avec la multiplication de matrices).

Inversement, à une matrice  $M \in SU(2)$ , on associe un opérateur de rotation de spin  $\hat{R}$  par la même relation ci-dessus (voir preuve ci-dessus).

Ainsi le groupe des rotation du spin 1/2 exprimé dans une base orthonormée s'identifie au groupe de matrices SU(2).

**Exercice 26 Rotation du spin et groupe  $SU(2)$** 

1. Montrer qu'un générateur des rotations du spin 1/2 (i.e. élément de l'algèbre de Lie  $\mathcal{R}_{spin}$ )  $\hat{S}_{\vec{U}}$ , avec  $\vec{U} \in \mathbb{R}^3$ , s'exprime dans une base o.n. par une matrice hermitienne  $2 \times 2$  de trace nulle. Montrer inversement qu'une matrice hermitienne  $2 \times 2$  de trace nulle détermine un générateur  $\hat{S}_{\vec{U}}$ .
2. Montrer que l'ensemble des matrices hermitienne  $2 \times 2$  de trace nulle forme l'algèbre de Lie  $su(2)$  du groupe  $SU(2)$  défini ci-dessus. Montrer que les matrices de Pauli  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  forment une base de cette algèbre  $su(2)$ .
3. Grâce à l'application exponentielle, déduire que le groupe des rotations du spin 1/2,  $\mathcal{R}_{spin}$ , exprimé dans une base o.n., s'identifie au groupe  $SU(2)$  des matrices.

## 4.6 Espace quantique total d'une particule à 3 dimensions avec spin 1/2

L'espace de Hilbert de la fonction d'onde, décrivant l'état spatial de la particule est :

$$\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

L'espace de Hilbert du spin, décrivant l'état de spin est lui de dimension 2 :

$$\mathcal{H}_{spin} \equiv \mathbb{C}^2$$

Alors l'espace de Hilbert total est le produit tensoriel :

$$\boxed{\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}}$$

### 4.6.1 Remarques

- Pourquoi le produit tensoriel ? tout simplement, car il est possible d'envisager que la particule soit dans un état quantique comme

$$|\psi\rangle = a|x_1\rangle|+_z\rangle + b|x_2\rangle|-_z\rangle \quad (4.11)$$

(avec des amplitudes  $a, b \in \mathbb{C}$ ), qui traduit un état où la position  $x$  est *corrélée* avec l'état de spin. C'est exactement le cas à la sortie de l'appareil de Stern-Gerlach, figure (4.1), où  $|x_1\rangle$  est un état situé dans le faisceau supérieur, et  $|x_2\rangle$  un état situé dans le faisceau inférieur.

- Comme décrit page 122, le produit tensoriel d'espace de Hilbert permet l'existence d'état corrélés qui sont surprenants pour le sens commun. C'est le cas de l'état eq(4.11), où l'état de spin est corrélé avec la position de la particule. Si on observe la particule en  $x_1$ , elle aura le spin  $|+_z\rangle$ . Si on l'observe en  $x_2$ , elle aura le spin  $|-_z\rangle$ . (Voir TD).

### 4.6.2 Une base de $\mathcal{H}_{tot}$ et champ spinoriels

Les états  $|\vec{x}\rangle$ ,  $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ , forment la base (continue) de position de l'espace  $\mathcal{H}_{spatial}$ .

De même les deux états  $|\pm_z\rangle$  forment une base de l'espace de spin  $\mathcal{H}_{spin}$ .

D'après la définition du produit tensoriel, voir (3.4), une base de l'espace  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}$  est formée par  $|\vec{x}, +\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |+_z\rangle$  et  $|\vec{x}, -\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |-_z\rangle$  avec le paramètre continu  $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ . Autrement dit un état général de la particule  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{tot}$  est caractérisé par ses composantes complexes :

$$\begin{aligned}\psi_+(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, + | \psi \rangle \\ \psi_-(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, - | \psi \rangle\end{aligned}$$

qui forme donc une fonction d'onde sur l'espace à deux composantes complexes. Cela s'appelle un champ vectoriel à valeur dans  $\mathbb{C}^2$  ou plus précisément un **champ spinoriel**. C'est l'analogie du champ électrique  $\vec{E}(\vec{x})$  qui lui est une fonction à trois composantes réelles.

Noter que les deux composantes  $\psi_+(\vec{x})$ ,  $\psi_-(\vec{x})$  dépendent du choix de la base  $|\pm_z\rangle$ , et dépendent donc du choix de l'axe  $z$ . Pour éviter de choisir une base particulière, on peut dire que  $|\psi\rangle$  est une fonction d'onde à valeur dans  $\mathcal{H}_{spin}$ .

#### Exercice 27 *action d'une rotation*

Pour une particule avec spin, décrite par la fonction d'onde à deux composantes  $\psi_{\pm}(\vec{x}) = \langle \vec{x}, \pm | \psi, \vec{s} \rangle$ , donner l'expression de la fonction d'onde de la même particule dans un repère  $\vec{x}'$  obtenu par une rotation  $\vec{x}' = R\vec{x}$  ?

## 4.7 Autres degrés de liberté internes

On dit que le spin est un **degré de liberté interne** de la particule, contrairement au **degrés de libertés externes** que sont  $x, y, z$ . L'espace de Hilbert qui le décrit est  $\mathcal{H}_{spin}$ , est un espace autre que celui des fonctions d'ondes spatiales  $\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$ . L'espace total est le produit tensoriel  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}$ .

Cependant *ces deux espaces ne sont pas indépendants* l'un de l'autre, puisque une transformation de l'espace comme une rotation, agit aussi sur l'espace du spin, voir (4.16).

En physique, il y a des espaces de degrés de libertés internes, autres que le spin, qui eux n'ont pas cet "attachement" avec l'espace ordinaire  $\mathbb{R}^3$ .

- Par exemple, pour les champs élémentaires, que sont les quarks, il y a un espace interne dit de **couleurs**  $\mathcal{H}_{coul} \equiv \mathbb{C}^3$  de dimension trois (rouge-vert-bleu). (Attention, les quarks ne sont pas des particules, dans le sens où ils n'existent pas à l'état individuel et libre. On parle plutôt de champs élémentaires, et leur description est dans le cadre de la théorie des champs, classique ou quantique).

Les trois couleurs des quarks, sont dues au fait que la théorie des champs correspondantes, la **Q.C.D.** ("**la Chromo-Dynamique Quantique**" qui décrit la **force nucléaire forte**), est une théorie de Jauge avec le groupe  $SU(3)$  qui signifie qu'elle

possède une symétrie (de Jauge) par rapport aux rotations dans l'espace des couleurs  $\mathcal{H}_{coul} \equiv \mathbb{C}^3$ . L'**interaction électro-faible** (qui décrit à la fois l'électromagnétisme et la force nucléaire faible), est décrite par la théorie de Jauge SU(2), faisant donc intervenir un espace de degré liberté interne  $\mathcal{H}_{faible} \equiv \mathbb{C}^2$ , appelé charge faible. Ces théories de Jauge se manifestent surtout dans les collisions de particules à hautes énergies.

- Autre exemple (mais qui est relié aux quarks), en physique nucléaire, on considère le neutron et le proton comme une manifestation d'une seule particule, appelée le **nucléon**. (Car la force nucléaire ne les distinguent pas, seule la force électromagnétique qui est sensible à la charge électrique, les distingue). Ainsi le proton  $|p\rangle$  et le neutron  $|n\rangle$  ne sont que deux états particuliers de l'espace à deux états du nucléon appelé **espace d'isospin**, noté  $\mathcal{H}_{isospin} \equiv \mathbb{C}^2$ , et ayant pour base  $|p\rangle, |n\rangle$ . Par exemple un nucléon peut être dans l'état interne d'isospin  $|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle + |p\rangle)$  qui est une superposition. Cependant cette notion d'espace d'isospin est en fait équivalente au point de vue plus conventionnel qui distingue le proton et le neutron.

## 4.8 Mesure de spin, application récente : la Cryptographie quantique

Nous présentons une branche de la mécanique quantique, appelée l'**information quantique** et plus précisément ici, la **cryptographie quantique**. Il y a des développements récents, à la fois du côté théorique et expérimentale.

**Références** : [NGWH01], dont est inspirée cette section, et une revue récente de *Pour la Science* [LS02].

L'idée de la cryptographie quantique est d'utiliser un défaut bien connu de la mécanique quantique :

*Chaque mesure perturbe le système*

comme un avantage dans l'échange de messages que l'on veut garder secrets, et d'éviter ainsi l'espionnage.

En effet la cryptographie quantique se sert de l'énoncé équivalent :

*Pas de perturbation  $\implies$  il n'y a pas eu d'espion*

pour être sûr que le message n'a pas été intercepté.

Nous allons voir précisément comment utiliser cela pratiquement. Il y a déjà des dispositifs expérimentaux de cryptographie quantique (notée C.Q.). Et la C.Q. pourrait bien être la première application commerciale de la physique quantique fonctionnant au niveau l'état quantique individuel.

### 4.8.1 Cryptographie classique symétrique à clef secrète

Comme il est d'usage, considérons deux personnages Alice et Bob.

Alice veut envoyer un message à Bob. Pour cela elle écrit son message en base deux (suite de 0 et 1), et dispose aussi d'une clef qui est une suite de 0 et 1, et envoie à Bob le message crypté obtenu par l'opération suivante :

$$\text{message crypté} = \text{message} \oplus \text{clef}$$

où le signe  $\oplus$  est l'addition modulo 2 sans retenue :

$$0 \oplus 0 = 0, \quad 1 \oplus 0 = 1, \quad 0 \oplus 1 = 1, \quad 1 \oplus 1 = 0.$$

Exemple : message = 10100110, clef=00110111, alors message crypté=10010001.

**Exercice** En supposant que Bob possède aussi la clef, quelle formule doit-il utiliser pour décrypter le message ?

**Solution :**

$$\text{message} = \text{message crypté} \oplus \text{clef}$$

Exemple : message crypté = 10010001, clef=00110111, alors message = 10100110.

**Remarque :** cette méthode de cryptographie est la seule prouvée être sans faille. Les inconvénients sont que Alice et Bob doivent être les seuls à connaître la clef secrète, et qu'ils disposent d'une clef secrète aussi longue que le message à se transmettre. Cette méthode s'appelle "*one time pad*" (1926). La difficulté est donc que Alice et Bob partagent une clef secrète. C'est là qu'intervient la cryptographie quantique présentée ci-dessous.

La méthode la plus utilisée (sur internet par exemple) est cependant un encryptage asymétrique à clef publique, de type R.S.A. (1978), basé sur la factorisation de grands nombres premiers. Mais dans ce cas, il n'est pas prouvé qu'il n'existe pas d'algorithme rapide permettant de décrypter le message.

### 4.8.2 Le protocole B.B.84 pour partager une clef secrète

Pour appliquer la méthode dite "*one time pad*" (1926) présentée plus haut, Alice et Bob doivent partager une clef (suite de 0 et 1) connue d'eux seuls.

C'est là que la mécanique quantique intervient. Cette méthode a été mise au point récemment et utilise non pas des spins 1/2, mais les 2 états de polarisation de la lumière : l'échange d'une clef secrète se fait via l'échange de photons dans une fibre optique.

Pour simplifier la présentation, nous remplaçons la polarisation par le spin 1/2 : nous supposons que Alice et Bob échangent des particules ayant deux états possibles de spin 1/2.

Alice et Bob ont chacun de leur côté un appareil de type Stern-Gerlach qui permet à Alice de polariser le spin de la particule dans l'état qu'elle veut, et à Bob de mesurer ce spin par rapport à une direction choisie. Voir figure 4.10.

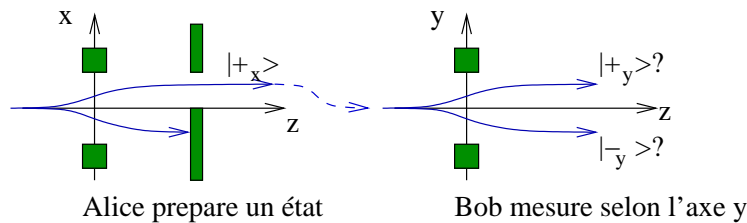


FIG. 4.10 – Alice prépare un état de spin, polarisé selon  $x$  ou  $y$ . Bob ensuite détecte la polarisation avec un appareil orienté selon  $x$  ou  $y$ .

On appelle  $z$  la direction de propagation. Ils utilisent deux directions possibles pour leur appareil :  $x$  ou  $y$ , ce qui correspond à deux bases différentes du spin, notées :

$$\begin{aligned}
 B_x : \quad & |+_x\rangle \equiv 0 \quad , \quad |-_x\rangle \equiv 1 \\
 B_y : \quad & |+_y\rangle \equiv 0 \quad , \quad |-_y\rangle \equiv 1
 \end{aligned}$$

(il est habituel en théorie de l'information quantique d'appeler une base de deux états quantiques par  $|0\rangle, |1\rangle$ , et de l'appeler **quantum bit** ou **qbit**).

Voici la séquence des opérations :

1. Alice envoie des particules individuelles à Bob. Pour chacune d'elle, elle choisit l'état de spin au hasard parmi les quatre ci-dessus.

Pour Alice, cela correspond à une suite de qbits (0 et 1) associée à une suite de Bases, exemple :

0	1	1	0	1	0	0
$B_x$	$B_x$	$B_y$	$B_x$	$B_y$	$B_y$	$B_x$

2. Pour chaque particule reçue, Bob mesure l'état de spin par rapport à une base  $B_x$  ou  $B_y$  qu'il choisit au hasard. Cela lui donne un résultat, une suite de qbits (0 et 1).

Exemple :

0	1	0	0	1	1	0
$B_x$	$B_y$	$B_x$	$B_x$	$B_y$	$B_x$	$B_x$

**Propriété :**

- Si Bob a fait le même choix de base que Alice, alors il détecte le même qbit. (En effet si Alice envoie  $|+_x\rangle$ , et que Bob détecte dans la direction  $x$ , il mesurera à coup sûr  $|+_x\rangle$ ).
  - Pour les qbits où Bob a fait un choix différent de base, il a en moyenne 50% d'erreurs. (En effet si Alice envoie  $|+_x\rangle$ , et que Bob détecte dans la direction  $y$ , on décompose  $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_y\rangle + |-_y\rangle)$ , ce qui donne une probabilité  $P_{|+_y\rangle} = 1/2$  et  $P_{|-_y\rangle} = 1/2$ )
  - Au total, Bob a donc en moyenne 25% d'erreur sur sa suite de qbit.
3. Bob annonce (publiquement) à Alice la suite de base (suite  $B_x, B_y$ ) qu'il a choisit (et pas les résultats).

4. Parmi cette suite, Alice annonce (publiquement) à Bob quelle sous suite correspond au même choix. Exemple ici :

$B_x$			$B_x$	$B_y$		$B_x$
-------	--	--	-------	-------	--	-------

5. Alice et Bob ne gardent chacun que cette sous suite de qbit, ce qui correspond en moyenne à 50% des événements. **Cette suite de 0 et 1 est finalement leur clef secrète.** Exemple ici : (0,0,1,0).

Pour être sûr que cette clef est secrète (i.e. connus d'eux seuls) il faut montrer que une tierce personne nommée Eve ne puisse intercepter leur échange de qbit sans que Bob et Alice ne s'en aperçoive (Eve est le nom habituel donné à l'espion en cryptologie, vient de l'anglais *eavesdropper*="qui écoute aux portes").

Pour cela :

**Théorème de non-clonage :** "Eve ne peut pas faire une copie de qbits sans les perturber"

**preuve :** Supposons la possibilité d'une opération idéale de copie (i.e. sans perturbation) d'un état quantique  $|\psi\rangle$  par Eve dans un registre, symbolisée par :

$$|\psi\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |Eve_0\rangle \longrightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes |Eve_\psi\rangle$$

Appliqué aux états  $|+x\rangle, |-x\rangle$ , cela donne :

$$|+x\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |Eve_0\rangle \longrightarrow |+x\rangle \otimes |+x\rangle \otimes |Eve_+\rangle$$

$$|-x\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |Eve_0\rangle \longrightarrow |-x\rangle \otimes |-x\rangle \otimes |Eve_-\rangle$$

et d'après le principe de superposition, on aurait pour  $|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle + |-x\rangle)$

$$|+y\rangle \otimes |\text{Registre}\rangle \otimes |Eve_0\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle \otimes |+x\rangle \otimes |Eve_+\rangle + |-x\rangle \otimes |-x\rangle \otimes |Eve_-\rangle)$$

qui est différent du résultat qu'il faudrait :  $|+y\rangle \otimes |+y\rangle \otimes |Eve_+\rangle$ . ■

On peut imaginer comme parade que Eve intercepte et mesure l'état de spin, et renvoie à Bob le même état pour faire croire qu'il n'y a pas eu interception. Si elle le fait, elle ne fait pas le même choix de base que Alice dans 50% des cas; par conséquent Alice et Bob ont 25% d'erreur sur leur clef finale. En échangeant entre eux (et publiquement) une fraction seulement de cette clef, ils peuvent se rendre compte de la présence de Eve, et décider de ne pas conserver la clef.

## 4.9 Interaction du spin avec le champ électromagnétique

### 4.9.1 Cas de l'électron

(cf Sakurai [Sak67]p78, Cohen p980)

L'interaction d'un électron de masse  $m$ , de charge  $q = -e$ , de spin  $1/2$ , avec un champ électromagnétique extérieur  $\vec{A}, U$  est décrite dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace} \otimes \mathcal{H}_{spin}$  par le **Hamiltonien de Pauli** :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right) \right)^2 + qU(\hat{\vec{x}}, t) \quad (4.12)$$

où  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  sont les matrices de Pauli agissant dans l'espace du spin  $\mathcal{H}_{spin}$ .

Cet Hamiltonien s'écrit aussi sous la forme plus commode :

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2 - \vec{\mathcal{M}}_e \cdot \vec{B} + qU(\hat{\vec{x}}, t)} \quad (4.13)$$

avec

$$\boxed{\vec{\mathcal{M}}_e = \frac{q}{m} \vec{S}} \quad (4.14)$$

**Preuve** : On utilise la relation (A.5), et  $\hat{\vec{p}} \wedge \vec{A} = -i\hbar \text{rot}(\vec{A}) - \vec{A} \wedge \hat{\vec{p}}$  (à démontrer). ■

### Remarques

- La forme (4.12), découle directement de l'équation de Dirac dans la limite non relativiste. L'équation de Dirac est une équation d'onde qui a une écriture assez "naturelle" et qui décrit la fonction d'onde d'un électron en théorie relativiste. (Il y a cependant des problèmes théoriques avec l'équation de Dirac, qui ne sont résolus que dans le cadre de la théorie quantique des champs).
- Le terme (4.14) est très semblable à l'expression du moment magnétique d'un dipôle magnétique en mécanique classique : considérons une particule classique de charge  $q$  sur une orbite circulaire de rayon  $r$ . Le courant correspondant est  $I = qv/(2\pi r)$ , et la surface du dipôle magnétique créé est  $\vec{S} = \pi r^2 \cdot \vec{u}$  ( $\vec{u}$  est un vecteur normal unitaire). Par ailleurs le moment orbital est  $\vec{L} = m\vec{v} \wedge \vec{r} = mvr\vec{u}$ . Alors le moment magnétique est :

$$\vec{\mathcal{M}}_{class} = I \cdot \vec{S} = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 \cdot \vec{u} = \frac{qv}{2} r \cdot \vec{u} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

qui est comparable à (4.14) mis à part le facteur  $1/2$ . La forme (4.12) a donc l'avantage de donner une origine au manque de ce facteur  $1/2$ , pas évident a priori.

### 4.9.2 Autres particules de spin $1/2$

cf Bransden p.533.

Pour une particule quelconque de spin  $1/2$ , de masse  $m$ , de charge  $q$ , le Hamiltonien est semblable à (4.13) :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2 - \vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B} + qU(\hat{\vec{x}}, t)$$

avec :

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{M}} &= g\mu\frac{\vec{S}}{\hbar} && : \text{moment magnétique} \\ \mu &= \frac{|e|\hbar}{2m} && : \text{magnéton} \\ g &&& : \text{rapport gyromagnétique}\end{aligned}$$

Valeurs expérimentales :

	Électron	Proton	Neutron
g	2,002319314	5,5883	-3,8263

**Remarques :**

- Le Hamiltonien de Pauli (4.13) donne  $g_e = 2$ . La valeur expérimentale un peu différente s'explique à cause d'effets d'influences de l'électron sur le champ électromagnétique que l'on peut calculer dans le cadre de l'électrodynamique quantique. Les valeurs de  $g$  pour le proton et le neutron sont dues à la structure interne des ces particules (structure de quarks et de gluons).
- Le moment magnétique du neutron est anti-parallèle à son spin.
- Pour le neutron ou proton,  $\mu_N = e\hbar/(2m_p)$  s'appelle le **magnéton nucléaire**. Pour l'électron  $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$  s'appelle le **magnéton de Bohr**.

### 4.9.3 Évolution du spin seul, précession de Larmor

Nous discutons ici l'évolution de l'état de spin 1/2 d'une particule, qui pourrait être un noyau nucléaire de spin 1/2, dans un matériau.

La particule est supposée être au repos, ce qui permet d'oublier l'état quantique spatial de celle-ci, et de ne traiter que l'état de spin  $|s(t)\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ . (Pour être plus précis, on peut supposer que le champ  $\vec{B}$  est uniforme, et que l'état spatial de la particule est dans l'état fondamental de  $\hat{H}_{espace} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - q\vec{A}(\hat{x}, t) \right)^2 + qU(\hat{x}, t)$ .)

Ainsi,  $|\psi(t)\rangle = |\psi_{0,espace}\rangle \otimes |s(t)\rangle$ , et on ne s'intéresse que à la dynamique de  $|s(t)\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$  décrite par :

$$\hat{H}_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

L'équation d'évolution de Schrödinger est

$$\frac{d|s(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|s(t)\rangle$$

Nous cherchons à décrire l'évolution du vecteur spatial de spin défini eq(4.7) :

$$\vec{s}(t) = \langle \hat{S} \rangle = \langle s(t) | \hat{S} | s(t) \rangle$$

Nous rappelons que inversement le vecteur  $\vec{s}(t)$  défini l'état  $|s(t)\rangle$  à une phase près. Comme  $\|\vec{s}(t)\| = \frac{\hbar}{2}$ , cette évolution défini des trajectoires sur la sphère de Bloch.

**Propriété**

$\vec{s}(t)$  évolue d'après les "équations de Bloch" :

$$\frac{d\vec{s}(t)}{dt} = \frac{dH_{spin}}{d\vec{s}} \wedge \vec{s} = \left( \frac{g\mu}{\hbar} \vec{B} \right) \wedge \vec{s} \tag{4.15}$$

où  $H_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{B}$  est le Hamiltonien (Classique).

Les trajectoires sont donc des cercles autour du champ  $\vec{B}$ , à la fréquence

$$\omega = \frac{g\mu}{\hbar} |\vec{B}|$$

Voir figure 4.11.

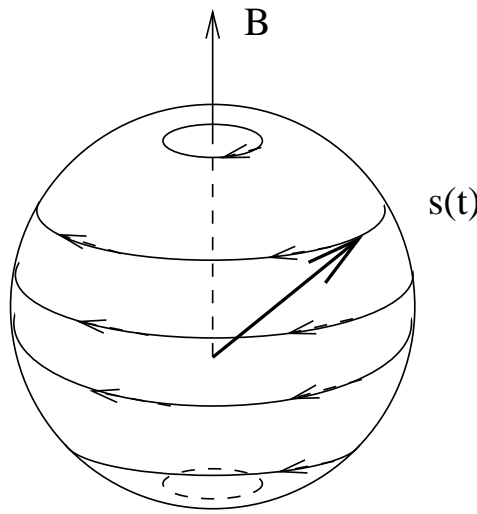


FIG. 4.11 – **Précession de Larmor** du spin : rotation du vecteur  $\vec{s}(t)$  autour du champ magnétique  $\vec{B}$ .

Le rapport de fréquence de précession du spin d'un proton et d'un électron est

$$\frac{\omega_p}{\omega_e} = \frac{g_p \mu_N}{g_e \mu_B} \simeq 5000$$

**preuve : (TD)**

Argument rapide : lors de l'évolution, l'énergie est constante, donc  $\vec{s} \cdot \vec{B}$  est constant, ce qui oblige le spin  $\vec{s}$  à tourner autour de  $\vec{B}$ .

Preuve rapide, en coordonnées : on peut supposer que  $\vec{B} = B \vec{e}_z$ . Alors  $\hat{H}_{spin} = -\frac{g\mu B}{\hbar} \hat{S}_z$ . Il est utile de travailler dans la base  $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$  : si  $|s(0)\rangle = a(0)|+_z\rangle + b(0)|-_z\rangle$ , alors  $|s(t)\rangle = \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right) |s(0)\rangle = a(t)|+_z\rangle + b(t)|-_z\rangle$ , avec  $a(t) = a(0)e^{-iEt/\hbar}$ ,  $b(t) = b(0)e^{+iEt/\hbar}$ , et  $E = -\frac{g\mu B}{2}$ . Alors

$$s_z(t) = \frac{\langle s(t) | \hat{S}_z | s(t) \rangle}{\langle s(t) | s(t) \rangle} = \frac{1}{\langle s(t) | s(t) \rangle} \left( \frac{\hbar}{2} |a(t)|^2 + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |b(t)|^2 \right) = s_z(0)$$

et

$$s_x(t) + is_y(t) = \frac{\langle s(t) | \hat{S}_x + i\hat{S}_y | s(t) \rangle}{\langle s(t) | s(t) \rangle} = \frac{\hbar}{\langle s(0) | s(0) \rangle} (\bar{a}(t)b(t)) = e^{i2Et/\hbar} (s_x(0) + is_y(0))$$

montrant que le vecteur  $\vec{s}(t)$  tourne autour de l'axe  $z$  à la fréquence  $\omega = 2E/\hbar = -\frac{g\mu B}{\hbar}$ .

Méthode plus géométrique : @@

### Remarques :

- L'énergie de la trajectoire classique du spin est  $E_{spin} = -\frac{g\mu}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{B}$ , qui est extremum pour  $\vec{s}$  et  $\vec{B}$  parallèles. On vérifie en particulier que dans ces derniers cas, ce sont deux points fixes de la dynamique de  $\vec{s}(t)$ , correspondant aux deux états propres  $\hat{H}_{spin}$ .
- Le Hamiltonien  $\hat{H}_{spin}$  a justement l'expression du générateur des rotations  $\hat{S}_{\vec{u}}$  (4.9) autour de l'axe  $\vec{u}$  qui est ici l'axe  $\vec{B}$ . De cette façon on obtient directement que le mouvement est une rotation, et on obtient aussi la vitesse angulaire.
- On a des coordonnées canoniques  $(q, p)$  sur la sphère montrant que la sphère  $S^2$  est un espace de phase classique pour la dynamique du vecteur classique  $\vec{s}(t)$  ( $\theta, \varphi$  sont les coordonnées sphériques) :

$$q = \cos \theta$$

$$p = s \cdot \varphi$$

Alors l'équation de Bloch (4.15) s'écrit sous la forme Hamiltonienne :

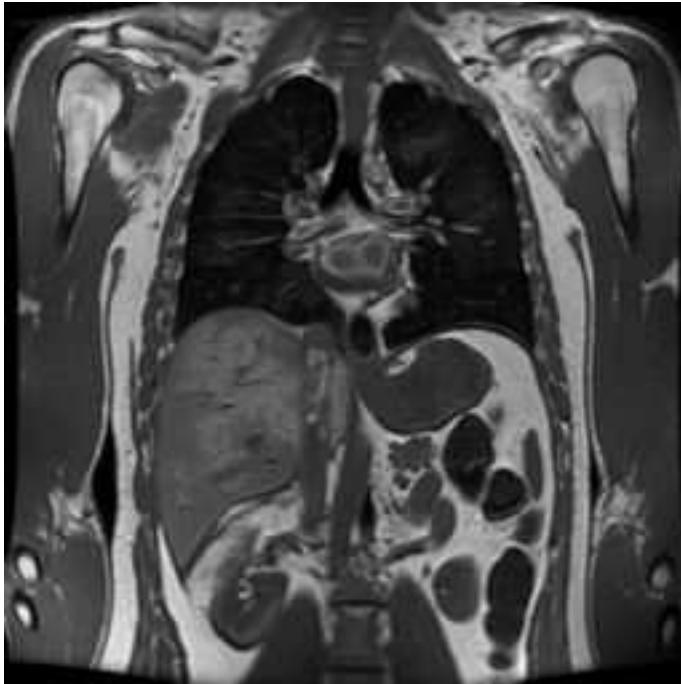
$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H_{spin}}{\partial p} \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H_{spin}}{\partial q} \end{aligned}$$

preuve : @@

@@TD : Décrire la trajectoire du neutron de spin 1/2 dans champ magnétique in-homogène. Exp. de Stern-Gerlach

#### 4.9.4 Résonance Magnétique Nucléaire (R.M.N.) et Imagerie Magnétique Résonante (M.R.I.)

L'interaction du spin des particules avec un champ magnétique décrite ci-dessus, est très utilisée pour faire de **l'imagerie** dans beaucoup de domaines (physique des matériaux, biologie, médecine,...). Ces techniques d'imagerie se sont très développées ces dernières années et sont en particulier un outil formidable en médecine pour l'étude des tissus vivants, et a révolutionné le domaine (voir par exemple une carte précise interactive du cerveau <http://www.med.harvard.edu/AANLIB/cases/caseNA/pb9.htm>).



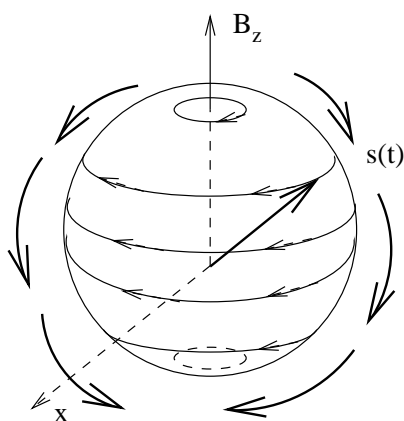
Ces techniques sont basées sur l'interaction d'un champ magnétique appliqué "sonde" avec les spins des noyaux nucléaires du milieu étudié.

Voici la technique utilisée, décrite de façon très simplifiée :

1. L'échantillon est placé dans un champ magnétique constant  $\vec{B}_0$  parallèle à l'axe  $z$ .  $B_0 \simeq 2 \rightarrow 10T$ . Les états d'énergie de chaque spin (pour simplifier supposé être  $1/2$ , et considéré comme isolé) est donc  $E_{\pm} = \pm \hbar\omega$ . A température ambiante,  $kT/\hbar\omega \simeq 10^5$ , donc d'après la loi de Boltzmann, à l'équilibre, il y a une différence de population très faible entre les deux états :  $N_+/N_- = e^{-\Delta E/kT} \simeq 1 - \frac{\Delta E}{kT} = 1 - 10^{-5}$ . C'est cependant ces petites différences qui feront un signal observable.
2. A un moment donné, et sur une courte durée (pulse de quelques  $\mu s.$ ), le champ magnétique appliqué est de la forme :

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 \cos(\omega_1 t) \vec{e}_x$$

où  $B_0$  est le même, et  $B_1 \ll B_0$  est faible, mais oscille à une fréquence  $\omega_1$  bien choisie. Si la fréquence  $\omega_1$  est suffisamment proche de la fréquence  $\omega$ , il est montré en TD qu'il y a un phénomène de **résonance** : un spin  $1/2$  peut basculer vers l'état  $-1/2$ , si la durée du pulse est aussi bien ajustée (et inversement). (voir figure).



Ce pulse a donc pour effet d'inverser les populations  $N_+$ ,  $N_-$ . Il faudra ensuite un certain temps, appelé temps de relaxation  $T_2 (\simeq 1s)$ , pour que les populations retrouvent leur valeurs d'équilibre selon  $z$ . Durant tout ce temps, les spins ( $+1/2$  ou  $-1/2$ ) qui sont ainsi rentrés en résonance ont **émit un champ magnétique induit** qui est détecté collectivement. Le signal temporel ainsi détecté, appelé Free Induction Decay (FID), constitue l'information de base sur l'échantillon.

3. **Ce signal recueilli dépend de plusieurs paramètres qui caractérisent le noyau nucléaire, et permettent ainsi de l'identifier :**

- (a) Il y a un signal, si il y a résonance. Il faut  $\omega_1 \simeq \omega$ . Or  $\omega$  dépend de  $g$ ,  $B$ , qui dépendent du noyau. Par exemple  $g = 2.016$  pour un spin  $1/2$  de  $Fe^{3+}$  dans le composé  $MgO$ . La valeur de  $B = B_0(1 - s)$  ressentie par le noyau est la valeur  $B_0$  modifiée légèrement par l'environnement électronique du noyau (les électrons créent un champ magnétique induit, appelé diamagnétique).  $s \simeq 10^{-6}$ . Cet effet s'appelle le **déplacement chimique**.
- (b) Il y a une faible interaction entre les spins de noyaux nucléaires voisins, qui dépend de la **configuration de la molécule** dans laquelle se trouve le noyau. Ces interaction, se traduisent par des décalages de fréquences  $\omega$ , ou des multiplets dans le cas de noyau indentiques comme dans  $CH_4$ .
- (c) **Le temps de relaxation  $T_2$  dépend beaucoup du matériau**. C'est essentiellement ce signal qui est utilisé en imagerie.
- (d) L'intensité du signal est aussi proportionnelle à la concentration des noyaux identifiés.

4. Afin de faire de l'imagerie, il faut une bonne résolution du signal en espace et en temps. Cela est possible en utilisant un champ  $B_0(\vec{x})$  qui est en fait non homogène, et légèrement variable en temps (idées de P. Lanterbur's 1971 et P. Mansfield 1973, voir [www.beyonddiscovery.org](http://www.beyonddiscovery.org)) . Ainsi un signal de résonance détecté, pourra être associé à une région précise de l'espace. Cela permet des **résolution spatiales  $1mm \times 1mm$  et temporelles  $40ms$** .

## 4.10 Conseils de Lecture

- Cohen-Tannoudji [CBF], chapitre IV.
- Feynman [Fey63], chapitres 6,11.

## 4.11 Correction des exercices

**Exercice 25 page 153** le résultat (4.8) montre que cette relation est vraie pour les trois vecteurs de base  $e_i$  de  $\mathbb{R}^3$ , ce qui peut s'écrire  $[\hat{S}_{e_i}, \hat{S}_{e_j}] = i\hbar \hat{S}_{e_i \wedge e_j} = i\hbar e_i \wedge e_j \cdot \hat{S}$ . Alors  $[\hat{S}_{\vec{U}}, \hat{S}_{\vec{V}}] = \sum_{i,j} [U_i \hat{S}_{e_i}, U_j \hat{S}_{e_j}] = \sum_{i,j} U_i U_j [\hat{S}_{e_i}, \hat{S}_{e_j}] = i\hbar \sum_{i,j} U_i U_j e_i \wedge e_j \cdot \hat{S} = i\hbar (\vec{U} \wedge \vec{V}) \cdot \hat{S}$ .

### Exercice 26 page 155

1. On a vu en cours, que les générateurs  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  s'expriment respectivement dans la base o.n.  $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$  par les matrices de Pauli  $(\frac{\hbar}{2}\sigma_x, \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \frac{\hbar}{2}\sigma_z)$ ; ce sont des matrices hermitienne  $2 \times 2$  de trace nulle. Par conséquent, l'opérateur  $\hat{S}_{\vec{U}} = U_x \hat{S}_x + U_y \hat{S}_y + U_z \hat{S}_z = \vec{U} \cdot \hat{S} \in \mathcal{R}$ ,  $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z) \in \mathbb{R}^3$  (générateur des rotations du spin 1/2) s'exprime par la matrice  $\frac{\hbar}{2}\sigma_{\vec{U}}$  avec

$$\sigma_{\vec{U}} = U_x \sigma_x + U_y \sigma_y + U_z \sigma_z = \vec{U} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} U_z & U_x - iU_y \\ U_x + iU_y & -U_z \end{pmatrix}$$

2. Soit  $M \in SU(2)$ . On a (a) :  $M^+ = M^{-1}$  et (b) :  $\det(M) = 1$ . Écrivons  $M = \exp(-i\lambda G)$ , avec  $\lambda \in \mathbb{R}$ , et  $G$  matrice  $2 \times 2$  qui est un "générateur" ,i.e. élément de l'algèbre de Lie  $su(2)$ . Pour  $\lambda \rightarrow 0$ , la relation (a) donne  $(1 + i\lambda G^+) = (1 + i\lambda G)$ , soit  $G = G^+$ . La relation (b) donne  $1 = \det(M) = \exp(-i\lambda \text{Trace}(G))$ , donc  $\text{Trace}(G) = 0$ . (La relation matricielle très générale  $\det(M) = \exp(-i\lambda \text{Trace}(G))$ , se démontre en écrivant  $G$  dans une base propre, où elle est diagonale). Ainsi l'algèbre de Lie  $su(2)$  du groupe  $SU(2)$  est formé par les matrices hermitienne  $2 \times 2$  de trace nulle forme. Comme expliqué en (1),  $G$  est de la forme  $G = \begin{pmatrix} u_z & u_x - iu_y \\ u_x + iu_y & -u_z \end{pmatrix} = \vec{u} \cdot \vec{\sigma}$ , et donc les matrices de Pauli forment une base de cette algèbre.
3. Soit  $\varphi : \hat{O} \rightarrow M_{\hat{O}}$  l'application qui à un opérateur de  $\mathcal{H}_{spin}$  associe la matrice  $2 \times 2$ , qui est son expression dans la base  $(|+_z\rangle, |-_z\rangle)$ . On a vu que  $\varphi(\hat{S}_{\vec{U}}) = \frac{\hbar}{2}\sigma_{\vec{U}}$  et que  $\varphi : \mathcal{R}_{spin} \rightarrow su(2)$  est un isomorphisme d'algèbres de Lie. Pour  $\hat{R} \in R_{spin}$ , on a  $\varphi(\hat{R}) = \varphi\left(\exp\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right)\right) = \exp\left(\varphi\left(\frac{-i\hat{S}_{\vec{u}}\alpha}{\hbar}\right)\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\sigma_{\vec{U}}\alpha\right)$  qui montre que  $\varphi : R_{spin} \rightarrow SU(2)$  est un isomorphisme de groupes.

**Exercice 27 page 156** Voir eq(4.16). Cette fois ci l'opérateur de rotation agit à la fois sur l'espace ordinaire et sur le spin :  $\psi'_{\pm}(\vec{x}') = \langle \vec{x}', \pm | \hat{R} | \psi, \vec{s} \rangle = \langle R^+ \vec{x}', R^+ \pm | \psi, \vec{s} \rangle = \langle R^{-1} \vec{x}', R^{-1} \pm | \psi, \vec{s} \rangle$ , c'est à dire :

$$\begin{pmatrix} \psi'_+(\vec{x}') \\ \psi'_-(\vec{x}') \end{pmatrix} = \hat{R}_{spin}^{-1} \begin{pmatrix} \psi_+(R_{espace}^{-1} \vec{x}') \\ \psi_-(R_{espace}^{-1} \vec{x}') \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

# Chapitre 5

## Plusieurs particules

Jusqu'à présent nous avons présenté comment décrire la dynamique d'une seule particule avec spin ou sans spin dans le cadre de la mécanique quantique.

Bien entendu, toute la complexité de la nature et de la physique vient de ce qu'elle est composée d'un grand nombre de particules qui interagissent entre elles.

Dans ce chapitre nous présentons comment décrire un système quantique constitué de plusieurs particules. Tout d'abord nous présentons le cas de particules différentes, dites **discernables**, puis le cas de particules identiques qui est différent (par exemple un gaz d'électrons ou de photons d'hydrogène,...).

### 5.1 Plusieurs particules discernables

Nous allons montrer et commenter le fait que **l'espace quantique total est le produit tensoriel** des espaces quantique de chaque particule considérée individuellement.

#### 5.1.1 Pour deux particules

Prenons l'exemple d'un système comprenant deux particules différentes, comme par exemple l'atome d'hydrogène constitué d'un proton et d'un électron.

Ce sont des particules avec spin  $1/2$ , et nous avons défini l'espace de Hilbert individuel de chacune des particules :  $\mathcal{H}_{proton}$ ,  $\mathcal{H}_{electron}$  qui permet de décrire l'état spatial de leur fonction d'onde et leur état de spin. Or dans l'atome d'hydrogène, ces deux particules interagissent, il faut donc considérer et décrire le système total.

Quel peut être un état quantique du système total? Si  $|p_i\rangle, i = 1, \dots$  est une base de  $\mathcal{H}_{proton}$  et  $|e_j\rangle, j = 1, \dots$  une base de  $\mathcal{H}_{electron}$ , il est tout à fait possible d'imaginer un état total de la forme  $|e_i p_j\rangle$ . Mais *d'après le principe de superposition*, il peut aussi y avoir des combinaisons linéaires de ces états  $|e_i p_j\rangle$ . Or ces états sont orthogonaux entre eux, il forment donc une base de  $\mathcal{H}_{total}$ . C'est justement la définition de l'espace produit tensoriel, voir eq.(3.4) page 121. Ainsi :

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_{proton} \otimes \mathcal{H}_{electron}$$

et une base de  $\mathcal{H}_{total}$  est  $|e_i p_j \rangle = |e_i \rangle \otimes |p_j \rangle$ , avec  $i = 1, \dots, \quad j = 1, \dots$

Cela peut paraître un peu abstrait, et en effet cela dépasse le bon sens parfois : du fait du produit, cet espace  $\mathcal{H}_{total}$  est “gigantesque” et contient nous allons le voir des états quantiques qui défient le bon sens. Le principe de superposition est à l’origine de ce résultat (qu’il ne faut croire, que si l’expérience le confirme).

**En terme de fonction d’onde :** Si on oublie le spin des particules, une fonction d’onde du proton est de la forme  $\psi_p(x_p, y_p, z_p)$ , une fonction d’onde de l’électron est de la forme  $\psi_e(x_e, y_e, z_e)$  (ce sont des fonctions à trois variables), alors qu’une fonction d’onde du système global est de la forme  $\phi(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e)$ , *c’est une fonction à six variables*. Nous avons déjà discuté, les corrélations qui peuvent apparaître entre ces variables, cf. figure (3.2) page 122. (En tant que fonction à six variables,  $|\phi \rangle \in L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$  comme expliqué page 121).

### 5.1.2 Opérateurs de $\mathcal{H}_{total}$

Les opérateurs positions, impulsion, spin et autres, sont définis dans les chapitres précédents pour un état quantique à une particule. Voici comment ils opèrent dans l’espace  $\mathcal{H}_{tot}$ .

Par exemple si on note  $\hat{x}_p$  l’opérateur position  $x$  du proton, il agit de la façon suivante sur la fonction d’onde totale :

$$(\hat{x}_p \phi)(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e) = x_p \phi(x_p, y_p, z_p, x_e, y_e, z_e)$$

où en terme de notation vectorielle, l’opérateur associé au proton n’agit que sur les vecteurs du proton dans les termes factorisés :

$$\hat{x}_p(|e \rangle \otimes |p \rangle) = |e \rangle \otimes (\hat{x}_p |p \rangle) \quad (5.1)$$

et agit comme l’opérateur identité sur l’espace de l’électron. C’est à dire

$$(\hat{x}_p)_{\mathcal{H}_{tot}} = \hat{I}_e \otimes (\hat{x}_p)_{\mathcal{H}_p}$$

### 5.1.3 Pour $N$ particules

La généralisation est simple :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

mais l’espace résultant est énorme ! (sa dimension est le produit des dimensions).

## 5.2 Non localité de la mécanique quantique, le paradoxe E.P.R.

référence : Bransden p673 [BC89], Ballentine [L.E90] p.437.

Pour un texte court, lire : <http://www.physique.usherb.ca/attracte/08-1999/epr.html>

### 5.2.1 États enchevêtrés : états surprenants de l'espace total

Le principe de superposition est à l'origine de la complexité de la mécanique quantique.

Nous avons déjà vu que pour une particule, alors que son état classique est de la forme  $(\vec{x}, \vec{p})$ , avec position et vitesse précises, la mécanique quantique permet une superposition de tels états comme :  $|\vec{x}, \vec{p}\rangle + |\vec{x}', \vec{p}'\rangle$ , une fonction d'onde qui serait la somme de deux paquets d'ondes gaussiens différents.

Pour deux particules, il peut y avoir des états de la forme

$$|\phi\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle$$

où  $|i\rangle$  est une fonction d'onde de la particule  $i = 1, 2$ . Un état  $|\phi\rangle$  qui peut s'écrire sous cette forme est dit **factorisable** ou **séparable**. Il n'est pas trop surprenant physiquement.

Mais la mécanique quantique permet à priori des superpositions de tels états. Par exemple :

$$|\phi\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle + |1'\rangle \otimes |2'\rangle \quad (5.2)$$

qui est une superposition de deux états factorisés. C'est un état non factorisable, dit **état enchevêtré**.

De tels états sont observés expérimentalement. Les manifestations physiques de ces états défient le bon sens. On décrit ci-dessous une expérience à l'issue de laquelle deux particules sont dans un état enchevêtré, et l'on discute les conséquences mesurables.

### 5.2.2 Description quantique orthodoxe

Dans cette expérience, une paire de deux particules de spin 1/2 est créée en un lieu et instant précis. Nous appelons cet événement  $E_1$ . Nous supposons que l'état quantique qui décrit le spin des deux particules est :

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle_1 \otimes |-_z\rangle_2 - |-_z\rangle_1 \otimes |+_z\rangle_2) \quad (5.3)$$

l'indice 1 ou 2 se réfère au numéro de la particule. L'état  $|\phi\rangle$  est un état enchevêtré.

Cet état correspond à *un spin total nul*, appelé état singlet de spin, voir section 7.5.1. En effet l'observable de spin total est  $\vec{S}_{tot} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , et il est aisé de calculer que  $\langle \vec{S}_{tot} \rangle = 0$ .

Il y a plusieurs façons de créer un tel état, voir par exemple : <http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/french/rydberg/resonant/eprpair.html>. Ce peut être par la désintégration d'un pion  $\pi_0$  qui a un spin nul, en électron + positron :

$$\pi_0 \rightarrow e^- + e^+$$

Les particules 1 et 2 partent dans des directions opposées, vers des détecteurs symbolisés par les physiciens  $P_1$  et  $P_2$ . Voir figure 5.1.

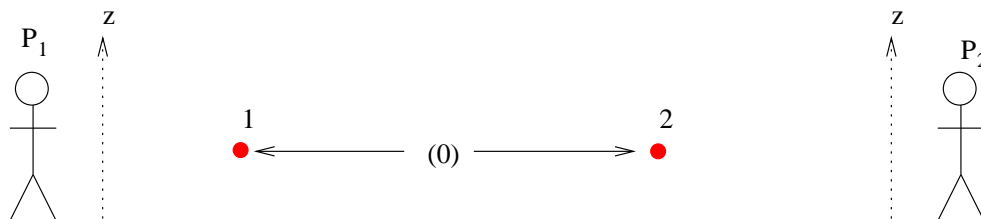


FIG. 5.1 – Les deux particules 1 et 2 sont dans un état enchevêtré, et partent vers deux détecteurs  $P_1, P_2$ .

A l'aide d'un appareil du type Stern-Gerlach, le physicien  $P_1$  effectue une mesure de l'observable :

$$\hat{A} = \left(\frac{2}{\hbar}\right) \hat{S}_{1,z}$$

(composante du spin de la particule 1 selon l'axe  $z$ ). C'est l'évènement  $E_2$ . Les deux valeurs propres de cette observable sont  $\pm 1$ . Par conséquent d'après le postulat de la mesure, voir page 51, à l'issue d'une mesure, le physicien  $P_1$  observera le résultat  $A = +1$  ou  $A = -1$ , avec les probabilités respectives

$$P_{A=+1} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} |\langle +_{1,z} | \phi \rangle|^2 = \frac{1}{2},$$

$$P_{A=-1} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} |\langle -_{1,z} | \phi \rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

et si il observe  $A = +1$  (respect.  $A = -1$ ), alors juste après la mesure, l'état quantique des deux particule est  $|+_{z} \rangle_1 \otimes |-_{z} \rangle_2$ , (respectivement  $|-_{z} \rangle_1 \otimes |+_{z} \rangle_2$ ). On remarque donc que cette mesure du physicien  $P_1$  modifie l'état quantique du système total et en particulier celui de la particule 2.

Si *juste après cette première mesure*, le physicien  $P_2$  effectue à son tour une mesure de l'observable

$$\hat{B} = \left(\frac{2}{\hbar}\right) \hat{S}_{2,z}$$

(composante du spin de la particule 2 selon l'axe  $z$ ), c'est l'évènement  $E_3$ , et alors deux cas se présentent selon la valeur de  $A$  précédente :

## 5.2. NON LOCALITÉ DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE, LE PARADOXE E.P.R.173

1. si  $A = +1$ , l'état quantique réduit étant  $|\phi\rangle = |+_z\rangle_1 \otimes |-_z\rangle_2$ , le physicien  $P_2$  mesure  $B = -1$  avec la probabilité  $P_{B=-1} = +1$ .
2. si  $A = -1$ , l'état quantique réduit étant  $|\phi\rangle = |-_z\rangle_1 \otimes |+_z\rangle_2$ , le physicien  $P_2$  mesure  $B = +1$  avec probabilité 1.

Cette certitude totale traduit une **corrélacion parfaite** entre les états de spin des deux particules. Remarquez que si le physicien  $P_2$  avait effectué sa mesure le premier l'analyse aurait été analogue.

En résumé, d'après cette analyse de la situation par la mécanique quantique (et postulat de la mesure), l'état  $|\phi\rangle$  est enchevêtré jusqu'à la première mesure, et subitement, dès la première détection, il est réduit instantanément dans un produit factorisé  $|+_z\rangle_1 \otimes |-_z\rangle_2$ , ou  $|-_z\rangle_1 \otimes |+_z\rangle_2$  respectant la corrélation des deux spins opposés.

Cela est en parfait accord avec les expériences, et cette réduction qui est une sorte *d'action à distance "instantanée"*, est même **plus rapide que la vitesse de la lumière** (qui est la vitesse limite du transport d'énergie et d'information d'après la théorie de la relativité), car elle se passe même si les deux mesures sont deux événements  $E_2, E_3$  sans relation de causalité, c'est à dire espacés par un quadri-vecteur de type espace. Voir figure 5.2.

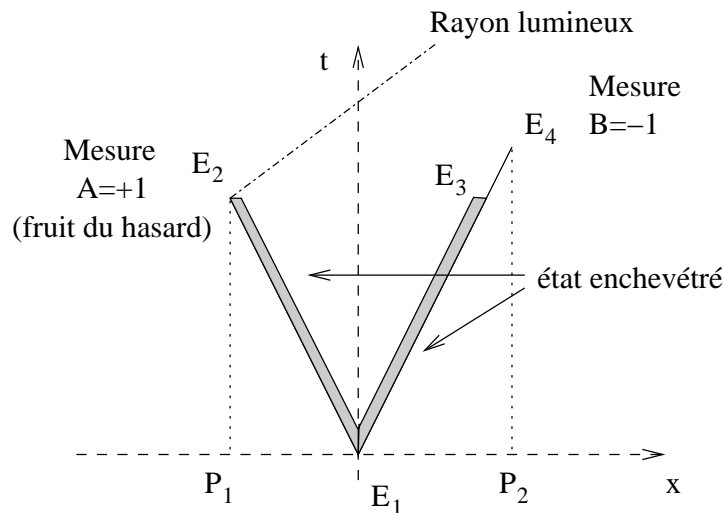


FIG. 5.2 – Schéma dans l'espace temps des événements.  $E_1$  est la création de l'état enchevêtré  $|\phi\rangle$  eq.(171) représenté par la ligne grisée. Les particules 1 et 2 se séparent et restent enchevêtrées, jusqu'à ce que le spin de la particule 1 soit mesuré. C'est l'événement  $E_2$ . Dans cet exemple le physicien  $P_1$  mesure  $A = +1$ . Au même instant (dans le référentiel  $x, t$  du laboratoire ?), l'état quantique  $|\phi\rangle$  est réduit, et la particule 2 se retrouve dans l'état  $|-_z\rangle$ . C'est l'événement  $E_3$ . Cet état est ensuite mesuré par le physicien  $P_2$ , qui observe  $B = -1$  (Événement  $E_4$ ). La ligne tiret-pointe est le cône de lumière qui représente le trajet le plus rapide (vitesse de la lumière) informant du résultat  $A = +1$ . Sur ce schéma il ne parvient pas à temps pour expliquer le résultat  $B = -1$ .

**Remarque :** Cette action instantanée à distance “plus rapide que la lumière”, **ne permet pas de transmettre de l’information**, et ne contredit pas le principe de la relativité. En effet,  $P_1$  ne choisit pas si le résultat est  $A = +1$  ou  $A = -1$ ; il ne peut donc pas transmettre de message à  $P_2$  de cette manière.

Cependant il y a une difficulté très visible sur la figure 5.2 : où se situe précisément l’évènement de réduction ( $E_3$ ) ? Il peut être simultané à  $E_1$ , mais la notion de simultanéité dépend du référentiel en relativité. Quel est le référentiel privilégié ici ? La question se pose, bien qu’elle n’a pas d’impact sur le résultat observé.

**Résumé** Dans ce paragraphe, nous avons montré que par suite logique du principe de la superposition, la mécanique quantique entraîne des **interactions non locales** : le résultat d’une mesure “ici” dépend de façon instantanée du résultat d’une mesure qui se passe “là-bas”.

Hubert Reeves dans “Patience dans l’azur” écrit : “Je reprends l’énoncé avec une comparaison pour le lecteur moins familier avec la physique des atomes. A deux messagers, on a donné la consigne suivante : ils devront répondre à une question par oui ou par non. Si le premier répond oui, le second devra répondre non, et vice-versa. Les choses se passent telles que prévues. Il serait raisonnable de supposer qu’ils se sont donné le mot au départ et qu’à chaque instant du trajet chacun savait ce que l’autre allait répondre. Pourtant on montre que tel n’est pas le cas. Aucun des deux n’a choisi avant l’arrivée quelle réponse il allait donner. Comment expliquer que le second connaisse la bonne réponse ?”

### 5.2.3 Objection de Einstein-Podolsky-Rosen (E.P.R.) sur la non localité (1935)

En 1935, l’objection de ces trois physiciens fut que même si elle ne permet pas de transmettre de l’information, cette action à distance est inacceptable ; ils étaient partisans d’une **théorie physique locale**.

Ces physiciens suggérèrent que les mêmes résultats expérimentaux peuvent s’interpréter autrement, par une théorie qui serait locale : **dès le départ l’état de spin des deux particules serait décidé**, c’est à dire que l’une ou l’autre des deux situations est déjà engagée :  $|+_z \rangle_1 \otimes |-_z \rangle_2$  ou  $|-_z \rangle_1 \otimes |+_z \rangle_2$  chacune se produisant en moyenne 1 fois sur 2. Le choix de l’une ou l’autre situation est le fruit du hasard, ou résulte d’un mécanisme microscopique déterministe mais inconnu. Il y aurait donc des **variables dynamiques cachées**.

**Ces physiciens ont donc ouvert un débat :** Quelle interprétation est correcte, la mécanique quantique avec le postulat de la mesure qui est non local, ou une théorie locale à variables cachées ?

Ces deux interprétations seraient-elles équivalentes (compatibles) ?

### 5.2.4 Théories locales à variable cachées et inégalités de Bell (1964)

En 1964, J. Bell montre que les deux interprétations précédentes ne sont pas équivalentes et que des expériences pourraient trancher le débat [Bel64]. Les “inégalités de Bell” sont des relations vérifiées par toute théorie locale à variable cachée, et dans certains cas non respectées par le modèle de la mécanique quantique.

Nous établissons une telle inégalité pour l'expérience décrite dans ce chapitre.

Pour se mettre dans un cas où l'inégalité de Bell est transgressée par la mécanique quantique, supposons que les physiciens  $P_1$  et  $P_2$  mesurent respectivement la composante du spin de la particule 1 (et 2) selon l'axe  $\vec{a}$  (et  $\vec{b}$ ). Voir figure 5.3.

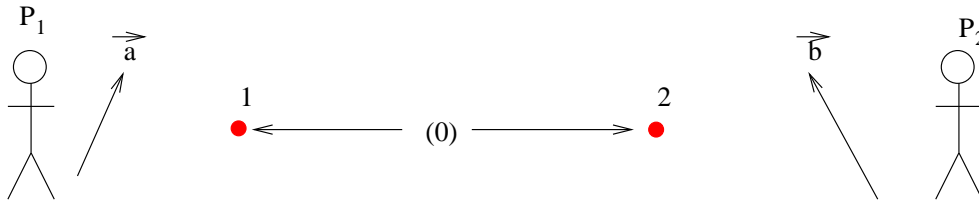


FIG. 5.3 – Mesure de  $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) = \hat{A}(\vec{a}) \hat{B}(\vec{b})$ .

On note  $\hat{A}(\vec{a}) = (\frac{2}{\hbar}) \hat{S}_{1,\vec{a}}$  et  $\hat{B}(\vec{b}) = (\frac{2}{\hbar}) \hat{S}_{2,\vec{b}}$  les observables correspondantes.

Le résultat de leur mesure est  $A(\vec{a}) = \pm 1$  et  $B(\vec{b}) = \pm 1$ .

Considérons l'observable :

$$\hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) = \hat{A}(\vec{a}) \hat{B}(\vec{b})$$

La valeur moyenne de cette observable s'obtient expérimentalement en faisant un grand nombre d'expériences successives.

**Théorie locale à variable cachée** Supposons que une théorie locale à variable cachée soit valide. On note  $\lambda$  “la variable cachée” dont on ne saurait prévoir le comportement, et  $p(\lambda) d\lambda$  la probabilité pour que lors d'une expérience, une valeur de l'intervalle  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$  soit réalisée.

Le résultat de la mesure de  $P_1$  est une certaine fonction de  $\lambda$  :

$$A(\lambda, \vec{a}) = \pm 1$$

de même pour le résultat de  $P_2$  :

$$B(\lambda, \vec{b}) = \mp 1 = -A(\lambda, \vec{b})$$

Noter que  $A(\lambda, \vec{a})$  ne dépend pas de  $\vec{b}$  d'après l'hypothèse de localité. En effet le choix de la valeur de  $\vec{b}$  se fait localement juste avant la mesure de  $B$  et n'influe donc pas le résultat de  $A$ . (La relation  $B(\lambda, \vec{b}) = -A(\lambda, \vec{b})$  vient de ce que les deux résultats sont toujours corrélés).

D'après ce modèle, la valeur moyenne de "l'observable  $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})$ " est :

$$E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda p(\lambda) A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{b})$$

**Propriété** On a l'inégalité de Bell :

$$\boxed{\left| E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) \right| < 1 + E_{loc}(\vec{b}, \vec{c})}$$

**preuve :**

$$\begin{aligned} E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) &= \int d\lambda p(\lambda) \left( A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{b}) - A(\lambda, \vec{a}) B(\lambda, \vec{c}) \right) \\ &= - \int d\lambda p(\lambda) \left( A(\lambda, \vec{a}) A(\lambda, \vec{b}) \right) \left( 1 + A(\lambda, \vec{b}) B(\lambda, \vec{c}) \right) \end{aligned}$$

donc  $\left| E_{loc}(\vec{a}, \vec{b}) - E_{loc}(\vec{a}, \vec{c}) \right| \leq \int d\lambda p(\lambda) \left| 1 + A(\lambda, \vec{b}) B(\lambda, \vec{c}) \right| = 1 + E_{loc}(\vec{b}, \vec{c})$ , car  $A = B = \pm 1$  ■.

## 5.2.5 Violation de l'inégalité par la mécanique quantique (1976)

### 5.2.5.1 Modèle quantique

en mécanique quantique la valeur moyenne de l'observable  $\hat{E}(\vec{a}, \vec{b})$  sur l'état  $|\phi\rangle$  est :

$$\begin{aligned} E_Q(\vec{a}, \vec{b}) &= \left\langle \hat{E}(\vec{a}, \vec{b}) \right\rangle = -\cos(\theta) \\ \theta &= \left( \widehat{\vec{a}, \vec{b}} \right) \end{aligned}$$

**preuve :** voir TD.

**Remarque :** comme attendu pour  $\vec{a} = \vec{b}$ , les deux théories sont en accord :

$$E_Q(\vec{a}, \vec{a}) = E_{loc}(\vec{a}, \vec{a}) = -1.$$

Considérons des directions  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  coplanaires telles que  $(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\pi}{3}$ ,  $(\vec{b}, \vec{c}) = \frac{\pi}{3}$ . Alors

$$\left| E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c}) \right| = \left| -\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right| = \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| = 1$$

$$1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c}) = 1 - \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \frac{1}{2}$$

**Il y a donc violation de l'inégalité de Bell ci-dessus.**

**Exercice :**

Fixer  $(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\pi}{2}$ , et poser  $(\vec{b}, \vec{c}) = \alpha$ , avec  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  coplanaires. Calculer et tracer  $|E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c})|$  et  $1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c})$  en fonction de  $\alpha$ .

**Solution :**  $|E_Q(\vec{a}, \vec{b}) - E_Q(\vec{a}, \vec{c})| = |\sin(\alpha)|$  et  $1 + E_Q(\vec{a}, \vec{c}) = 1 - \cos(\alpha)$ . Voir figure 5.4.

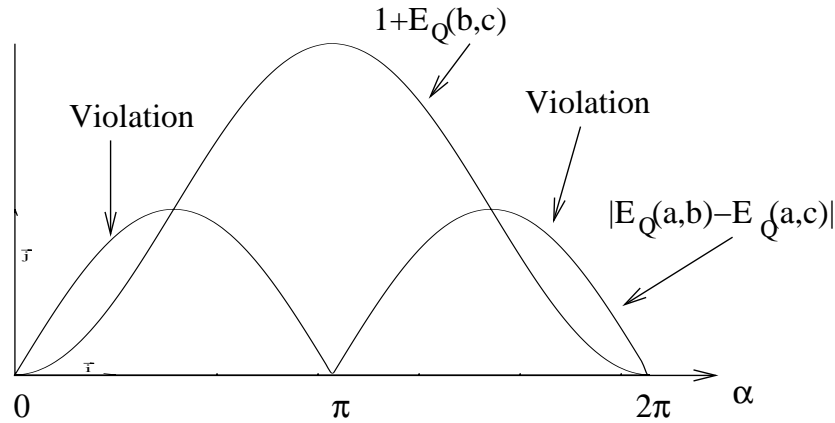


FIG. 5.4 – Violation d’une inégalité de Bell par la mécanique quantique.

### 5.2.5.2 Non localité de la mécanique quantique, confirmation expérimentale

En 1976, les expériences de Alain Aspect utilisant des photons polarisés, (au lieu de particules avec spin  $1/2$ ) montrent la violation d’inégalités de Bell, et sont donc en faveur de la mécanique quantique [Asp76, ADR82]. Ainsi *l’interprétation par une théorie locale à variable cachée n’est pas possible*.

Les résultats de l’expérience sont en parfait accord avec la mécanique quantique.

Des expériences plus récentes ont été faites où la distance entre les deux mesures est de l’ordre de 10 km. Elles sont toujours en parfait accord avec la mécanique quantique.

Une expérience peut être faite en T.P. à l’université, voir [DMWM].

## 5.3 Plusieurs particules identiques

Dans le cas de plusieurs particules *identiques*, une différence importante apparaît par rapport au cas de plusieurs particules *discernables* décrit dans la section 5.1.

### 5.3.1 Deux particules identiques

#### 5.3.1.1 Particules de spins demi-entier, les Fermions

Si deux électrons sont respectivement dans les états  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ , on pourrait penser que l'ensemble est décrit par le vecteur  $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  de  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ .

Déjà on peut remarquer que expérimentalement, il serait impossible de distinguer l'état  $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  de l'état  $|\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle$ , ou de toute combinaison linéaire de ces états, puisque l'échange des deux électrons passerait inaperçue.

L'expérience montre que dans la nature, chaque paire d'électrons est dans un état de la forme dite **antisymétrique**, et notée :

$$\boxed{|\psi_1\rangle \wedge |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle)} \quad (5.4)$$

ou toute combinaison linéaire (i.e. superposition) de tels états antisymétrique.

Les autres combinaisons sont donc interdites.

Le symbole “ $\wedge$ ” s'appelle le **produit extérieur**. L'espace des états quantique décrivant deux électrons contient donc les vecteurs de la forme (5.4). C'est un espace vectoriel, qui est le produit extérieur des espaces à un électron (ou l'anti-symétrisé), et noté

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_e \wedge \mathcal{H}_e = \hat{\mathcal{A}}(\mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_e)$$

#### Remarques :

- le facteur  $1/\sqrt{2}$  est pour la normalisation dans le cas où  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  sont orthogonaux et normalisés. En effet

$$\| |\psi_1\rangle \wedge |\psi_2\rangle \|^2 = \frac{1}{2} (2 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle) = 1$$

- On a

$$(|\psi_1\rangle \wedge |\psi_2\rangle) = -(|\psi_2\rangle \wedge |\psi_1\rangle)$$

- Conséquence de l'anti-symétrie : **deux électrons ne peuvent être dans le même état quantique**. En effet

$$|\psi\rangle \wedge |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle - |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle) = 0$$

est le vecteur nul et ne peut donc pas décrire un état physique. C'est le **principe d'exclusion de Pauli** formulé en 1925 pour expliquer la structure des atome.

- Cette anti-symétrie se reflète au niveau de la fonction d'onde des deux particules.

Si les deux particules ont le même état de spin, disons  $|+\rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ , et dans des états spatial différents,  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \in \mathcal{H}_{spatial}$  posons :

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |\varphi_1\rangle \otimes |+\rangle \\ |\psi_2\rangle &= |\varphi_2\rangle \otimes |+\rangle \end{aligned}$$

alors

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle = (|\varphi_1 \rangle \wedge |\varphi_2 \rangle) \otimes (|+ \rangle_1 \otimes |+ \rangle_2)$$

Noter donc que la partie spatiale est antisymétrique, alors que la partie spin est symétrique.

La fonction d'onde (spinorielle) est défini par :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= (\langle x_1 | \otimes \langle x_2 |) (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle x_1 | \varphi_1 \rangle \otimes \langle x_2 | \varphi_2 \rangle - \langle x_1 | \varphi_2 \rangle \otimes \langle x_2 | \varphi_1 \rangle) \otimes (|+ \rangle_1 \otimes |+ \rangle_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(\vec{x}_1) \varphi_2(\vec{x}_2) - \varphi_2(\vec{x}_1) \varphi_1(\vec{x}_2)) \otimes (|+ \rangle_1 \otimes |+ \rangle_2) \end{aligned}$$

qui vérifie donc :

$$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = -\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

- Si au contraire les deux particules ont des états de spin différents, elles peuvent être dans le même état spatial. Prenons l'exemple des deux électrons de l'atome d'hélium, qui sont dans l'orbitale spatiale  $|S \rangle \in \mathcal{H}_{spatial}$ , et ont des états de spins différents, disons  $|+ \rangle, |- \rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ . Alors  $|\psi_1 \rangle = |S \rangle \otimes |+ \rangle, |\psi_2 \rangle = |S \rangle \otimes |- \rangle$ , et

$$\begin{aligned} |\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle &= (|S \rangle_1 \otimes |S \rangle_2) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+ \rangle_1 \otimes |- \rangle_2 - |- \rangle_1 \otimes |+ \rangle_2) \\ &= (|S \rangle_1 \otimes |S \rangle_2) \otimes (|+ \rangle \wedge |- \rangle) \end{aligned}$$

Cette fois ci, la partie spatiale est symétrique, alors que la partie spin est antisymétrique.

- En particulier, deux particules ayant le même état de spin, ne peuvent être au même endroit  $\vec{x}$ , car d'après ci-dessus,

$$\psi(\vec{x}, \vec{x}) = -\psi(\vec{x}, \vec{x}) \quad \text{donc} \quad \psi(\vec{x}, \vec{x}) = 0$$

Ce principe d'exclusion agit donc comme une répulsion, bien qu'il ne s'agisse pas d'une force à proprement parler (il n'y a pas de particule qui transmet la force, comme le photon transmet la force électromagnétique).

- Cette propriété a aussi des conséquences observables très claires en physique du solide et physique moléculaire. Elle explique :
  - les règles de remplissage des niveaux d'énergie électronique des atomes ou molécules.
  - le remplissage des états électroniques dans les solides cristallins. Ce remplissage est à l'origine des propriétés isolantes ou conductrices de ces matériaux.
  - la taille, et les propriétés des étoiles "naines blanches", où les électrons sont soumis à cette "répulsion".

- Cette situation n’est pas réservée aux électrons. Les particules qui sont observées seulement sous la forme antisymétrique sont appelées des **Fermions**.

*L’expérience montre que toutes les particules de spin 1/2, (ou demi entier : 3/2, 5/2, 7/2, ...) sont des Fermions.*

Ainsi toutes les particules élémentaires de la matière (quarks, électrons, neutrinos, leptons, et antimatière ...) sont des Fermions. C’est aussi le cas des neutrons, protons, des noyaux nucléaires, des atomes et molécules de spin demi-entier comme le noyau d’hélium 3, ou l’atome d’hélium 3.

Cette correspondance appelée **spin-statistique** se justifie en théorie quantique relativiste. Mais il manque actuellement une explication simple de cette correspondance.

- Le principe d’exclusion de Pauli pour les neutrons et protons explique la structure des noyaux nucléaires. Elle explique aussi la taille et certaines propriétés des étoiles à neutrons.

### 5.3.1.2 Particules de spins entier, les Bosons

Considérons le cas de deux pions  $\pi_0$  (qui sont des particules sans spin, ou de spin 0). L’expérience montre que dans la nature, chaque paire de pions est dans un état de la forme dite **symétrique**, et notée :

$$\boxed{|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle + |\psi_2 \rangle \otimes |\psi_1 \rangle)} \quad (5.5)$$

ou dans toute combinaison linéaire (i.e. superposition) de tels états symétriques. Les autres combinaisons sont donc interdites. L’espace total est noté :

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_{\pi_0} \vee \mathcal{H}_{\pi_0} = \hat{S}(\mathcal{H}_{\pi_0} \otimes \mathcal{H}_{\pi_0})$$

#### Remarques

- Si les deux particules ont le même état de spin, disons  $|+ \rangle \in \mathcal{H}_{spin}$ , la fonction d’onde des deux particules est symétrique :

$$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

Il n’y a pas de propriété d’exclusion comme dans le cas des fermions. Au contraire, il est “favorable” que deux particules soient dans le même état, ou au même endroit  $\vec{x}$ . Cela amène au phénomène de **condensation de Bose** à basse température (voir Cours de physique. Statistique à ce sujet, [DGLR89]).

- Cette situation n’est pas réservée aux pions.

Les particules qui sont observées seulement sous la forme symétrique sont appelées des **Bosons**.

*L’expérience montre que toutes les particules de spin 0, (ou entier : 1, 2, 3, ...) sont des Bosons.*

C’est le cas du photon, des gluons, et autres particules de Jauge ..., des particules

composées, comme les mésons  $K, \pi$ , les atomes et molécules de spin entier comme  $He_4$ .

Cette correspondance appelée **spin-statistique** se justifie en théorie quantique relativiste.

- Un **faisceau laser** contient un grand nombre de photons ( $n \simeq 10^{20}$ ) qui ont tous (idéalement) dans le même état quantique, correspondant à un mode d'onde électromagnétique précis. Cela est possible car le photon est un boson.

### 5.3.2 Plusieurs particules identiques

Nous présentons le formalisme pour décrire l'état quantique de  $N$  fermions ou  $N$  bosons. Notons  $\pi$  un opérateur qui permute les  $N$  états. Par exemple pour  $N = 3$  :

$$\pi(|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes |\psi_3 \rangle) = (|\psi_2 \rangle \otimes |\psi_1 \rangle \otimes |\psi_3 \rangle)$$

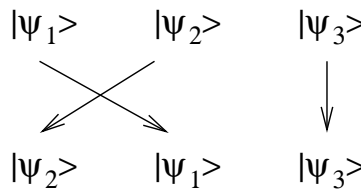


FIG. 5.5 – Une permutation  $\pi$  de trois états, de signature  $\sigma(\pi) = (-1)$ .

Il y a  $N!$  façons de permuer  $N$  états. Les opérateurs  $\pi$  correspondants forment le **groupe symétrique**  $S_N$  (voir [Bac]).

La **signature d'une permutation** notée  $\sigma(\pi)$ , vaut  $(+1)$  ou  $(-1)$  selon que le nombre de croisements est pair ou impair dans le diagramme de correspondance (figure 5.5).

**Cas des bosons** Un état de  $N$  **bosons** est forcément une combinaison linéaire (i.e. superposition) de toutes les permutations possibles, de la forme :

$$|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \sum_{\pi \in S_N} \pi (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle) \right)$$

Par exemple pour  $N = 2$ , on retrouve (5.5), et pour  $N = 3$ , cela donne :

$$\frac{1}{\sqrt{6}} (|\psi_1 \psi_2 \psi_3 \rangle + |\psi_1 \psi_3 \psi_2 \rangle + |\psi_3 \psi_2 \psi_1 \rangle + |\psi_2 \psi_1 \psi_3 \rangle + |\psi_3 \psi_1 \psi_2 \rangle + |\psi_2 \psi_3 \psi_1 \rangle)$$

On note aussi l'opérateur **symétriseur** :

$$\hat{\mathcal{S}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} \pi$$

ainsi :

$$|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle = \hat{\mathcal{S}} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle)$$

**Cas des fermions** Un état de  $N$  **fermions** est une combinaison linéaire de toutes les permutations possibles affectée de leur signature, de la forme :

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \sum_{\pi \in S_N} \sigma(\pi) \pi (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle) \right)$$

Par exemple pour  $N = 3$ , on retrouve (5.4), et pour  $N = 3$ , cela donne :

$$\begin{aligned} & |\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge |\psi_3 \rangle = \\ & \frac{1}{\sqrt{6}} (|\psi_1 \psi_2 \psi_3 \rangle - |\psi_1 \psi_3 \psi_2 \rangle - |\psi_3 \psi_2 \psi_1 \rangle - |\psi_2 \psi_1 \psi_3 \rangle + |\psi_3 \psi_1 \psi_2 \rangle + |\psi_2 \psi_3 \psi_1 \rangle) \end{aligned}$$

On note aussi l'opérateur **anti-symétriseur** :

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} \sigma(\pi) \pi$$

ainsi :

$$|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle = \hat{\mathcal{A}} (|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N \rangle)$$

**Propriété** Si  $\pi$  est un opérateur de permutation, alors pour un état de  $N$  bosons :

$$\pi (|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle) = + (|\psi_1 \rangle \vee |\psi_2 \rangle \vee \dots \vee |\psi_N \rangle)$$

et pour un état de  $N$  fermions :

$$\pi (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle) = \sigma(\pi) (|\psi_1 \rangle \wedge |\psi_2 \rangle \wedge \dots \wedge |\psi_N \rangle)$$

en particulier pour une **transposition**, qui est une permutation échangeant seulement deux particules,  $\sigma(\pi) = -1$ .

En d'autres termes : les états à  $N$  bosons sont des vecteurs propres des opérateurs de transpositions, avec la valeur propre (+1). Et les états à  $N$  fermions, sont des vecteurs propres des opérateurs de transpositions, avec la valeur propre (-1).

**Preuve :** (Cohen p1379)

montrons que  $\pi\hat{S} = \hat{S}$  et  $\pi\hat{A} = -\hat{A}$  :

$$\pi\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi' \in S_N} \pi \pi' = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi'' = \pi \pi' \in S_N} \pi'' = \hat{S}$$

où on a effectué le changement de variable  $\pi'' = \pi \pi'$ , et utilisé le fait que  $\pi(S_N) = S_N$ . De même :

$$\pi\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi' \in S_N} \sigma(\pi') \pi \pi' = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi'' \in S_N} \sigma(\pi^{-1} \pi'') \pi'' = \sigma(\pi) \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi'' \in S_N} \sigma(\pi'') \pi'' \hat{S}$$

où on a utilisé le fait que  $\sigma(\pi^{-1} \pi'') = \sigma(\pi^{-1}) \sigma(\pi'')$  (morphisme de groupes) et  $\sigma(\pi^{-1}) = \sigma(\pi)$ . ■

**Exercice** Considérons un électron (fermion) qui peut être dans  $N$  état distincts,  $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle$ . L'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_1$  correspondant est donc de dimension  $N$ .

1. D'abord dans le cas simple  $N = 3$ , supposons qu'il y a un deuxième électron. Donner alors une base de l'espace à deux électrons  $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \wedge \mathcal{H}_1$ , et déduire sa dimension.
2. Donner une base de  $\mathcal{H}_2$  et sa dimension, pour  $N$  quelconque.
3. Généraliser, pour  $M$  électrons, donner une base de  $\mathcal{H}_M$  et sa dimension, pour  $N$  et  $M$  quelconques.
4. Même question pour des bosons.

## 5.4 Aperçu sur les particules élémentaires et forces élémentaires (\*)

Nous donnons cet aperçu très succinct, mais incontournable, car la mécanique quantique s'applique avant tout aux particules élémentaires et à ses composés.

La théorie actuelle en accord avec les expériences (le "modèle standard") date des années 1970-80.

Référence : [http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/TutorialWelcome\\_fr.html](http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/TutorialWelcome_fr.html),  
<http://www-pdg.lbl.gov>.

### 5.4.1 Liste des particules élémentaires

#### 5.4.1.1 La matière

##### 6 quarks

			charge électrique (en $e$ )
"up" u	"charm" c	"Top" t	+2/3
"down" d	"Strange" s	"Beauty or Bottom" b	-1/3

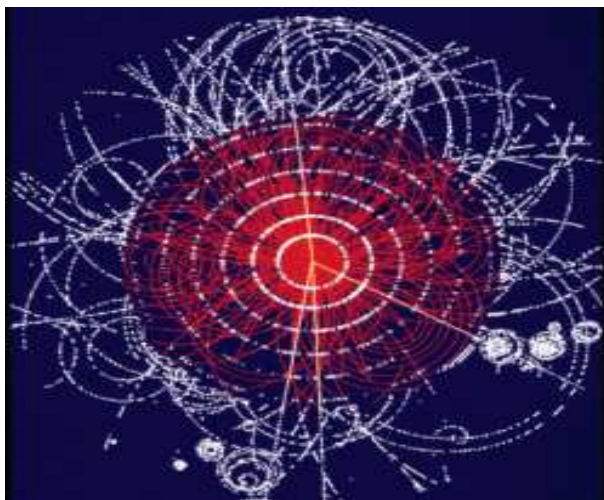


FIG. 5.6 – Trajectoires de particules après une collision au CERN.

ces quarks n'existent que par groupes de deux ( $q\bar{q}$ ) ou trois ( $qqq$ ), où  $q$  dénote un quark, et  $\bar{q}$  dénote un anti-quark. Ce phénomène s'appelle **le confinement** ; c'est un fait expérimental pas entièrement compris au niveau théorique.

**6 Leptons** On indique la masse en  $MeV/c^2$ .

			charge électrique (en $e$ )
électron : $e$ (0.5)	Muon : $\mu$ (105)	Tau : $\tau$ (1777)	+1
Neutrino électronique $\nu_e$	Neutrino Muonique $\nu_\mu$	Neutrino Tau $\nu_\tau$	0

#### 5.4.1.2 L'antimatière

Chaque particule a sa particule "image" d'anti-matière. Il y a donc 6 antiquarks, et 6 anti-leptons, de **même masse** que leur image, de **charge électrique opposée**, notés avec une barre. Exemple :  $e^+ = \bar{e}^-$  est l'anti-électron, aussi appelé le positron.

Remarque : une particule de matière rencontrant une particule d'anti-matière peut s'annihiler et donner de l'énergie sous forme de rayonnement :

$$matiere + antimatiere \rightarrow energie$$

Ce processus a été très important au début de l'univers. Après une importante phase d'annihilation mutuelle, il est resté de la matière car elle était en excédent de 1%.

### 5.4.1.3 Les bosons de Jauge

Ce sont des particules qui transmettent les forces élémentaires.

- Le **photon**  $\gamma$ , de masse  $m = 0$ , transmet la force électromagnétique entre les particules ayant une charge électrique.
- 8 **gluons**  $g$ , de masse  $m = 0$ , transmettent la force nucléaire forte entre les quarks.
- Les **bosons W et Z** :  $W_0, W_+, W_-$  de masse  $m = 80 \text{ GeV}/c^2$ , et  $Z_0$  de masse  $m = 91 \text{ GeV}/c^2$ , transmettent la force nucléaire faible entre les particules de matière et d'anti-matière. (quarks et leptons).

#### Remarques :

- Les neutrinos ne sont sensibles que à la force nucléaire faible, et n'interagissent donc que très peu. Ils peuvent traverser la Terre facilement. Il y en a 200 par  $m^3$ , provenant d'un reste "fossile" du Big Bang.
- L'interaction gravitationnelle est aussi une force élémentaire, mais on ne sait pas si la théorie quantique s'applique pour elle. Autrement dit, on ne sait pas si il y a une particule de Jauge associée que l'on appellerait le **graviton**.

### 5.4.1.4 Particules élémentaires stables

Il y a donc peu de particules élémentaires. Surtout que la plupart cités ci-dessus sont instables : elles ont une durée de vie très courte. Elles apparaissent lors de collisions énergétiques, et se désintègrent très rapidement. Les particules élémentaires stables sont

$$e^-, \text{neutrinos}, \gamma$$

les quarks  $q$  et les gluons  $g$  n'existent pas à l'état individuel.

## 5.4.2 Les particules composées

La richesse et la diversité de la nature vient que ces particules élémentaires s'assemblent pour former des "particules composées" très variées.

### 5.4.2.1 Les mésons :

les mésons sont composés de deux quarks  $q\bar{q}$  avec des gluons qui les lient. Par exemple le méson  $Pi_0$  est une superposition quantique :

$$\pi_0 \equiv (|d\bar{d}\rangle - |u\bar{u}\rangle)$$

de masse  $m = 140 \text{ MeV}/c^2$ , de charge 0.

### 5.4.2.2 Les baryons :

Les baryons sont composés de trois quarks  $qqq$  avec des gluons qui les lient. Par exemple :

$$\begin{aligned} \text{Proton } p : & \quad (uud) \quad \text{masse} = 939 \text{ MeV}/c^2, \quad \text{charge} + 1 \\ \text{Neutron } n : & \quad (udd) \quad \text{masse} = 940 \text{ MeV}/c^2, \quad \text{charge} 0 \end{aligned}$$

### 5.4.2.3 Noyau nucléaire

Un noyau nucléaire est composé de protons et neutrons. Par exemple

$$\text{Helium}_4 : \quad (ppnn)$$

Il faut une proportion de neutron et protons adéquate pour former un noyau.

### 5.4.2.4 Composés plus élaborés : atomes, molécules, matériaux,...

Ensuite, les noyaux s'entourent d'électrons pour former des atomes, les atomes s'assemblent pour former des molécules, des matériaux, des fluides...

### 5.4.2.5 Particules composées stables

Les particules composées stables sont : le proton  $p$ , les noyaux nucléaires légers ( $He, C, O, \dots$ ) les atomes, les matériaux,...

Remarque :

- le neutron isolé est instable, avec une durée de vie de 15mn.
- L'antimatière serait stable sans l'environnement de la matière. On a fabriqué des atomes d'anti-H.
- En 2007, le LHC au CERN, va faire des collisions  $p + \bar{p}$  à hautes énergies. On espère de nouvelles découvertes.

# Chapitre 6

## Méthodes d'approximation ; résolution approchée

Ce chapitre entame une deuxième partie du cours où l'on présente des méthodes spécifiques pour résoudre des problèmes de mécanique quantique. Dans le chapitre "méthodes d'approximation", on présente différentes techniques standard d'approximation.

Dans le chapitre "Symétries", il s'agit d'exploiter les symétries du problème.

### Sur l'intérêt des méthodes d'approximation :

- Certaines sont parfois indispensables, sans cela le problème serait insoluble.
- Certaines permettent de comprendre aussi le phénomène en termes simples, ou de mettre en évidence l'essentiel d'un phénomène.

On s'efforcera de bien préciser les conditions de validité de chaque méthode.

## 6.1 Théorie des perturbations stationnaires

Pour un problème stationnaire ou non stationnaire, l'idée est de séparer le Hamiltonien en deux parties :  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$ , telles que l'on sait résoudre le problème pour  $\hat{H}_0$ , et que  $\lambda\hat{H}_1$  est considéré comme une petite correction (limite  $\lambda \rightarrow 0$ ). On appelle l'opérateur  $\hat{H}_1$  **la perturbation**. Ainsi on exprime les solutions du problème par un développement limité en  $\lambda$ .

Dans la théorie des perturbations stationnaires, le problème est de trouver les vecteurs propres et valeurs propres d'un Hamiltonien :

$$\hat{H}|\psi_n \rangle = E_n|\psi_n \rangle \quad (6.1)$$

sachant que

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$$

où  $\hat{H}_0$  est un opérateur dont on connaît le spectre, supposé discret et normalisé, et noté :

$$\boxed{\hat{H}_0|n \rangle = \varepsilon_n|n \rangle, \quad n \in \mathbb{Z}}$$

et  $\hat{H}_1$  est un autre opérateur appelé **perturbation**.

Les valeurs propres sont classées par ordre croissant :

$$\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots$$

**Remarque sur les dégénérescences** Il se peut que plusieurs valeurs propres consécutives soient égales, disons  $N$  valeurs propres consécutives sont égales à  $\varepsilon$ . Dans ce cas on dit que la valeur propre  $\varepsilon$  est **dégénérée** de **multiplicité**  $N$ .

Cette situation peut paraître exceptionnelle. Elle apparaît cependant assez souvent due à des symétries (i.e. invariance par un groupe non commutatif). C'est le cas bien connu du spectre de l'atome d'hydrogène, où la symétrie est l'invariance par le groupe de rotation, voir chapitre 7.

Mais une dégénérescence dans le spectre peut aussi apparaître sans raison de symétrie. On peut en trouver en modifiant convenablement des paramètres externes à  $\hat{H}_0$ .

### 6.1.1 Cas de niveaux non dégénérés

(Méthode dite de Rayleigh-Shrödinger)

On s'intéresse à une valeur propre  $\varepsilon_n$  particulière de  $\hat{H}_0$  ( $n$  est fixé), que l'on suppose *non dégénérée*, c'est à dire de multiplicité un. On dit aussi **valeur propre isolée**.

Pour  $\lambda \neq 0$ , cette valeur propre et le vecteur propre correspondant sont modifiés, et l'on écrit :

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &= \varepsilon_n + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \\ |\psi_n(\lambda)\rangle &= |n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

où  $E^{(i)}, |\psi^{(i)}\rangle$ ,  $i = 1, 2, \dots$  sont les corrections inconnues recherchées. Voir figure 6.1.

On a déjà remarqué que le vecteur propre est défini à une constante près. On peut fixer ce choix en imposant :

$$\langle n | \psi_n \rangle = 1$$

Ce choix entraîne que  $1 = \langle n | \psi_n \rangle = \langle n | n \rangle + \lambda \langle n | \psi^{(1)} \rangle + \dots = 1 + \lambda \langle n | \psi^{(1)} \rangle + \dots$ ,  $\forall \lambda$ , donc :

$$\langle n | \psi^{(i)} \rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots$$

Il suffit maintenant de récrire eq.(6.1) :

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) (|n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \dots) = (\varepsilon_n + \lambda E^{(1)} + \dots) (|n\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \dots)$$

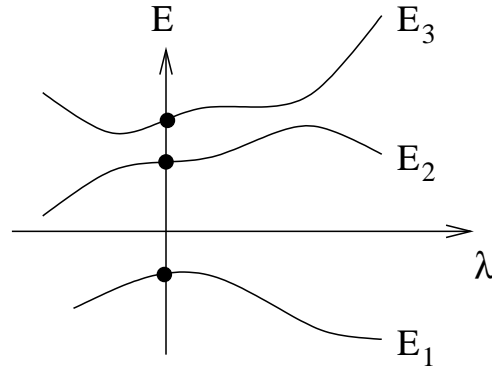


FIG. 6.1 – Schéma des valeurs propres non dégénérées  $E_n(\lambda)$ . La théorie des perturbations exprime le développement limité de  $E_n(\lambda)$  en  $\lambda \simeq 0$ .

de développer et d'identifier les coefficients de  $\lambda^i$ . Cela donne :

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad \hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \\ \lambda^1 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |n\rangle = \varepsilon_n |\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)} |n\rangle \\ \lambda^2 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(2)}\rangle + \hat{H}_1 |\psi^{(1)}\rangle = \varepsilon_n |\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)} |n\rangle \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Ensuite, on projette les équations sur les vecteurs non perturbés  $|n'\rangle$ , donnant :

Pour  $\lambda^1$  :

$$\varepsilon_{n'} \langle n' | \psi^{(1)} \rangle + \langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle = \varepsilon_n \langle n' | \psi^{(1)} \rangle + E^{(1)} \langle n' | n \rangle$$

en particulier pour  $n' = n$  :

$$E^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle \quad : \text{ correction 1er ordre à l'énergie}$$

et pour  $n' \neq n$  :

$$\langle n' | \psi^{(1)} \rangle = \frac{\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}, \quad n' \neq n \quad : \text{ correction 1er ordre au vecteur propre}$$

Rappel : la composante  $\langle n | \psi^{(1)} \rangle = 0$  est nulle. Le vecteur  $|\psi^{(1)}\rangle$  s'exprime donc par ses composantes :

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} |n'\rangle \langle n' | \psi^{(1)} \rangle$$

Pour  $\lambda^2$ , on projette sur  $|n\rangle$  :

$$\varepsilon_n \langle n | \psi^{(2)} \rangle + \langle n | \hat{H}_1 | \psi^{(1)} \rangle = \varepsilon_n \langle n | \psi^{(2)} \rangle + E^{(1)} \langle n | \psi^{(1)} \rangle + E^{(2)}$$

donc  $E^{(2)} = \langle n | \hat{H}_1 | \psi^{(1)} \rangle = \sum_{n' \neq n} \langle n | \hat{H}_1 | n' \rangle \langle n' | \psi^{(1)} \rangle$  soit :

$$E^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} \quad : \text{ correction 2eme ordre a l' energie} \quad (6.2)$$

### Remarques

- Pour le *niveau fondamental*  $\varepsilon_0$  alors  $(\varepsilon_0 - \varepsilon_{n'}) < 0$  donc  $E^{(2)} \leq 0$ . Par conséquent  $E_0(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)}$  est une fonction concave. Voir figure 6.2.

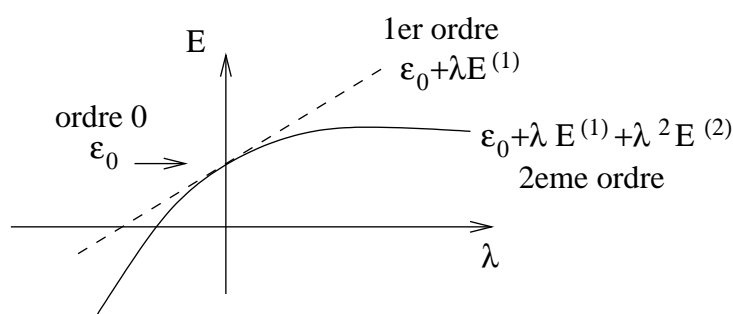


FIG. 6.2 – Pour le niveau fondamental,  $E_0(\lambda)$  est une fonction concave.

- (\*) On peut calculer les termes à tout ordre. Mais cela devient compliqué. Il y a d'autres façon d'écrire le développement, plus maniables, cf méthode de Brillouin-Wigner, cf Ballentine [L.E90] p.268. On peut aussi utiliser des représentations graphiques des termes développés, appelé diagramme de Feynman (très utiles en théorie quantique des champs).

### 6.1.2 Exemple : vibration anharmonique d'un atome

références : Cohen [CBF] Complément  $A_{XI}$  p.1100, Bransden [BC89] p.363.

Supposons qu'un atome de masse  $m$  vibre à une dimension  $x$  autour de sa position d'équilibre. Il se trouve donc dans un puits de potentiel  $V(x)$ , illustré sur la figure (2.5) page 74.

Nous avons effectué l'approximation linéaire (ou Harmonique) en ne gardant que la partie quadratique du potentiel,  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ . Nous allons traiter ici le terme suivant correctif de eq.(2.5), par la théorie des perturbations.

Pour simplifier l'exposé, nous allons supposer que le terme suivant en  $x^3$  est nul, et ne traiter que le terme en  $x^4$ .

La dynamique de la particule est donc décrite par le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4 \quad (6.3)$$

Pour appliquer la théorie des perturbations ci-dessus, on pose

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

dont on connaît déjà le spectre, c'est l'oscillateur Harmonique.

Le terme de perturbation est

$$\lambda\hat{H}_1 = \lambda\hat{x}^4$$

à condition que  $\lambda \simeq 0$ .

Noter que si  $\lambda < 0$ , le potentiel n'est pas confinant, et le spectre est alors non discret. La théorie précédente ne s'applique que pour  $\lambda \geq 0$ .

On s'intéresse au niveau fondamental  $E_0$  qui est non dégénéré.

Rappels sur l'oscillateur Harmonique : on a  $\hat{H}_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$  avec

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\sigma = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

On déduit que la correction au premier ordre est

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle 0|\hat{H}_1|0\rangle = \int dx \langle 0|\hat{x}^4|x\rangle \langle x|0\rangle \\ &= \int dx x^4 |\langle x|0\rangle|^2 = \frac{3}{4}\sigma^4 \end{aligned}$$

(c'est une intégrale Gaussienne, cf ??).

et au deuxième ordre :

$$E^{(2)} = \sum_{n' \neq 0} \frac{|\langle n'|\hat{H}_1|0\rangle|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{n'}} = \dots = -\frac{21}{8} \frac{\sigma^8}{\hbar\omega}$$

(Le calcul plus compliqué, se fait grâce à l'algèbre des opérateurs  $a, a^+$ ).

Et l'on a au final

$$E_0 = \varepsilon_0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

Voir figure 6.3, où ce résultat est comparé à un résultat exact obtenu de façon numérique.

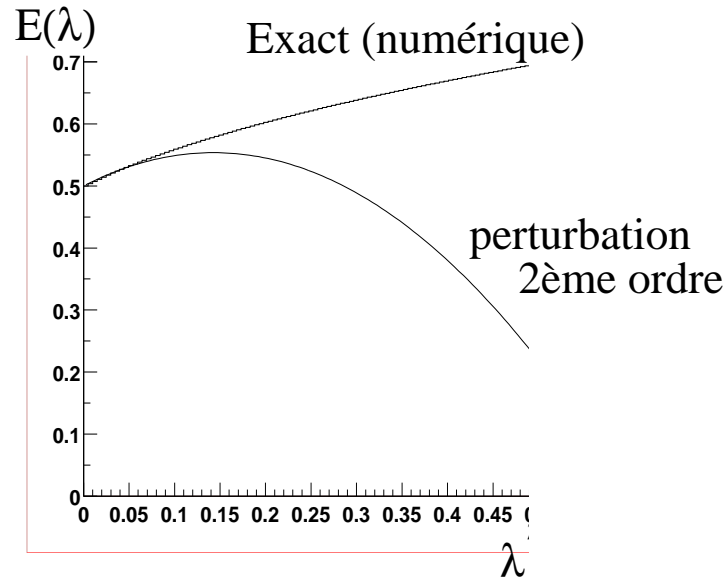


FIG. 6.3 –  $E_0(\lambda)$  pour eq(6.3).  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ .

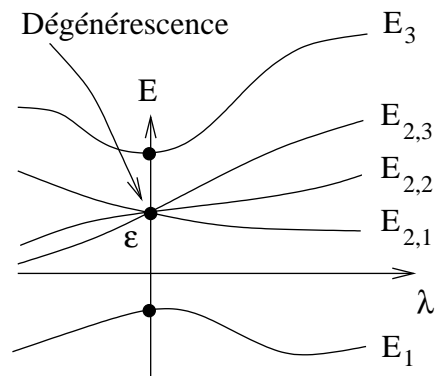


FIG. 6.4 – La dégénérescence en  $\lambda = 0$  de multiplicité  $N = 3$  est levée par la perturbation.

### 6.1.3 Cas de niveaux dégénérés

Supposons ici que la valeur propre  $\varepsilon$  de  $\hat{H}_0$  soit dégénérée avec la multiplicité  $N \in \mathbb{N}$ . On s'attend à ce que la perturbation lève la dégénérescence, c'est à dire enlève la dégénérescence. Lorsque la dégénérescence est due à une symétrie, il faut que le terme  $\hat{H}_1$  ne respecte pas cette symétrie.

Pour  $\lambda = 0$ , il y a donc  $N$  vecteurs propres de  $\hat{H}_0$ , orthogonaux notés  $|n, i \rangle$ ,  $i = 1, \dots, N$  que l'on connaît, et qui ont la même valeur propre  $\varepsilon$ .

On dit que ces  $N$  vecteurs forment une base de l'espace propre dégénéré, noté  $\mathcal{H}_\varepsilon$ , qui est un espace de dimension  $N$ .

On cherche à décrire la modification de la valeur propre  $\varepsilon$  pour  $\lambda \neq 0$ .

On écrit comme ci-dessus :

$$E(\lambda) = \varepsilon + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots$$

(cette fois ci, on introduit  $|\psi^{(0)}\rangle$  car il n'y a pas de raison pour que  $|\psi(\lambda)\rangle \rightarrow |n, i\rangle$  si  $\lambda \rightarrow 0$ . Le vecteur  $|\psi^{(0)}\rangle$  est inconnu).

On obtient à nouveau

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(0)}\rangle = \varepsilon |\psi^{(0)}\rangle \\ \lambda^1 : & \quad \hat{H}_0 |\psi^{(1)}\rangle + \hat{H}_1 |\psi^{(0)}\rangle = \varepsilon |\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(0)}\rangle \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

On projette la première équation ( $\lambda^0$ ) sur les états  $|n'\rangle \notin \mathcal{H}_\varepsilon$ ,  $n' \neq n$ , donnant :

$$(\varepsilon_{n'} - \varepsilon) \langle n' | \psi^{(0)} \rangle = 0$$

donc  $\langle n' | \psi^{(0)} \rangle = 0$ .

Ainsi le vecteur  $|\psi^{(0)}\rangle \in \mathcal{H}_\varepsilon$  appartient à l'espace propre dégénéré. Ce vecteur inconnu est caractérisé par ses  $N$  composantes  $\langle n, i | \psi^{(0)} \rangle$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

On projette la deuxième équation ( $\lambda^1$ ) sur le vecteur de base  $|n, i\rangle \in \mathcal{H}_\varepsilon$  :

$$\varepsilon \langle n, i | \psi^{(1)} \rangle + \langle n, i | \hat{H}_1 | \psi^{(0)} \rangle = \varepsilon \langle n, i | \psi^{(1)} \rangle + E^{(1)} \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle$$

ainsi :

$$\boxed{\langle n, i | \hat{H}_1 | \psi^{(0)} \rangle = E^{(1)} \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle, \quad \forall i = 1, \dots, N}$$

qui montre que la correction à l'énergie  $E^{(1)}$  est une valeur propre de la restriction de la perturbation  $\hat{H}_1$  à l'espace propre dégénéré  $\mathcal{H}_\varepsilon$ , et que  $|\psi^{(0)}\rangle$  est le vecteur propre correspondant.

Pour exprimer autrement ce résultat, on a  $\langle n, i | \hat{H}_1 | \psi^{(0)} \rangle = \sum_j \langle n, i | \hat{H}_1 | n, j \rangle \langle n, j | \psi^{(0)} \rangle$ . Notons

$$\boxed{\psi_i = \langle n, i | \psi^{(0)} \rangle}$$

composantes inconnues, et

$$H_{i,j} = \langle n, i | \hat{H}_1 | n, j \rangle$$

que l'on peut calculer. Alors

$$\sum_j H_{i,j} \psi_j = E^{(1)} \psi_j$$

$(H_{i,j})$  est une matrice  $N \times N$ , et possède donc  $N$  valeurs propres distinctes  $E_i^{(1)}$ ,  $i = 1, \dots, N$ , et  $N$  vecteurs propres orthogonaux associés :  $|\psi_i^{(0)}\rangle$ . Voir figure 6.4.

Ce résultat simple a de nombreuses applications, voir TD :

- TD : Molécule Na-Cl dans champs électrique : rotateur rigide, cf Bransden [BC89] p531-533.
- TD : Effet Starck, champ électrique sur atome H. polarisabilité.
- TD : Structure fine de l'atome H, à mentionner ou TD ?,
- Structure hyperfine : cf Cohen Chapitre XII.
- TD : exemple : Oscillateur harmonique 2D isotrope, perturbé par ...

## 6.2 Théorie des perturbations dépendant du temps

référence : Bransden [BC89] p410-426 : théorie et Bransden p494-492 : application.

On va ici illustrer la théorie des perturbations dépendant du temps, en étudiant un atome avec un électron soumis à une onde électromagnétique extérieure, dans l'approximation dipolaire électrique. Voir figure 6.5. On cherche à décrire l'évolution résultante de l'atome dans le cadre de la mécanique quantique.

En particulier, on observera si l'atome absorbe de l'énergie du champ ou si au contraire il perd de l'énergie.

Ce problème rentre dans le cadre très général de l'étude des interactions entre le rayonnement et la matière.

### 6.2.1 Rappels sur l'approximation dipolaire électrique

#### 6.2.1.1 Onde plane

ref : Cohen T p1300.

Une onde plane *dans le vide*, de vecteur d'onde  $\vec{k}$ , de fréquence  $\omega$  est décrite par les champs électriques et magnétiques :

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \Re \left( \vec{E}_{\vec{k}, \omega} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right), \quad \vec{E}_{\vec{k}, \omega} \in \mathbb{C}^3 \quad (6.4)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \Re \left( \vec{B}_{\vec{k}, \omega} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right), \quad \vec{B}_{\vec{k}, \omega} \in \mathbb{C}^3$$

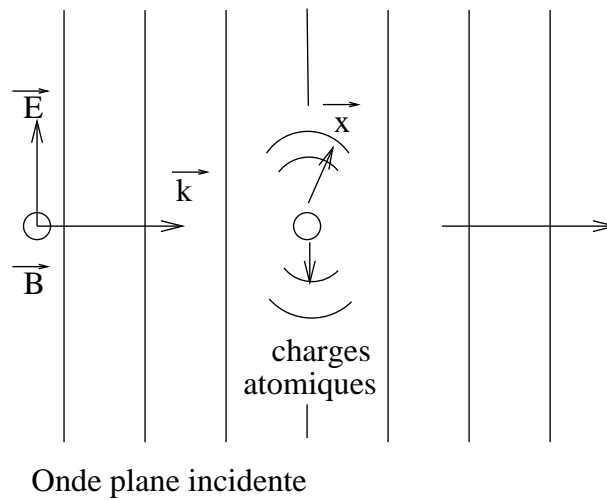


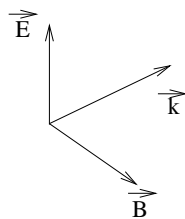
FIG. 6.5 – Action d’une onde plane incidente sur un atome : il se met à osciller dans la direction du champ électrique incident.

avec les contraintes :

$$c = \frac{\omega}{|\vec{k}|}$$

$$|\vec{B}| = \frac{1}{c} |\vec{E}|$$

$$\vec{B} = \frac{1}{c} \left( \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \wedge \vec{E} \right)$$



Il reste comme paramètre libre les deux phases du vecteur complexe  $\vec{E}_{\vec{k},\omega}$  dans le plan orthogonal à  $\vec{k}$ . Ces deux phases décrivent la polarisation du champ électromagnétique. Par exemple polarisation Droite/Gauche ou rectiligne y/z.

Le champ  $\vec{B}$  oscille donc avec le champ  $\vec{E}$ .

### 6.2.1.2 Forces électriques et magnétiques

On remarque le facteur  $1/c$  pour l'intensité du champ  $\vec{B}$  par rapport au champ  $\vec{E}$ . Cela a la conséquence suivante : pour une particule de charge  $q$ , de vitesse  $v$ , l'intensité des forces électriques et magnétiques sont respectivement :  $F_E = qE$ ,  $F_B = \left| q\vec{v} \wedge \vec{B} \right| = qvB = q\frac{v}{c}E = F_E \cdot \left(\frac{v}{c}\right)$ .

Donc pour des vitesses non relativistes  $v \ll c$ , la force magnétique est négligeable :

$$F_B \ll F_E$$

on ne gardera donc que la force électrique  $\vec{F}_E = q\vec{E}(\vec{x}, t)$  s'exerçant sur l'atome.

### 6.2.1.3 Approximation dipolaire électrique

Une approximation supplémentaire est que le champ  $\vec{E}(\vec{x}, t)$  peut être considéré comme uniforme près de l'atome, dans les cas qui vont nous intéresser.

En effet la longueur d'onde de la transition  $n = 2 \rightarrow n = 1$  dans un atome à un électron est @@

$$\lambda = \left(\frac{1,2}{Z^2}\right) 10^{-7}m$$

alors que la fonction d'onde de l'électron est distribuée sur une distance de l'ordre de : @@

$$\langle r \rangle = \left(0,8 \frac{n^2}{Z}\right) 10^{-10}m$$

ainsi :

$$\langle r \rangle \ll \lambda$$

et la fonction d'onde subit à l'instant  $t$  un champ électrique quasiment uniforme (i.e indépendant de  $\vec{x}$ ) dont la valeur est celle à la position  $\vec{x}_0$  de l'atome :

$$\vec{E}(\vec{x}, t) \simeq \vec{E}(\vec{x}_0, t)$$

Cette approximation n'est pas valable pour les longueurs d'ondes trop petites, c'est à dire à partir des rayons X.

La force électrique dérive alors d'un potentiel scalaire  $H_1$  linéaire :

$$\begin{aligned} \vec{F}_E &= -\overrightarrow{grad}(H_1) = q\vec{E}(\vec{x}_0, t) \\ H_1(\vec{x}, t) &= -q\vec{x} \cdot \vec{E}(\vec{x}_0, t) = -\vec{D} \cdot \vec{E}(\vec{x}_0, t) \end{aligned}$$

où  $\vec{D} = -q\vec{x}$  est le moment dipolaire électrique de l'atome à un électron.

Dans cette **approximation dipolaire** le Hamiltonien de l'électron s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

avec

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0) |\hat{x}|} : \quad \text{Hamiltonien non perturbé}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t) &= -q \hat{x} \cdot \vec{E}(t) : && \text{perturbation dépendant du temps} \\ &= \hat{W} e^{i\omega t} + \hat{W}^+ e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

avec :

$$\hat{W} = -\frac{1}{2} q \hat{x} \cdot \vec{E}_{k,\omega} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_0}$$

**Remarque :** Une dérivation plus rigoureuse de l'expression de  $\hat{H}$  à partir de l'expression eq.(3.7) est donnée dans Cohen T [CBF], page.1298.

## 6.2.2 Effet d'une onde cohérente ; transitions dans le spectre discret

Supposons que à l'instant  $t = 0$ , l'atome soit dans un état

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_a\rangle$$

qui est un des états stationnaires du spectre discret de  $\hat{H}_0$  :

$$\hat{H}_0 |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$$

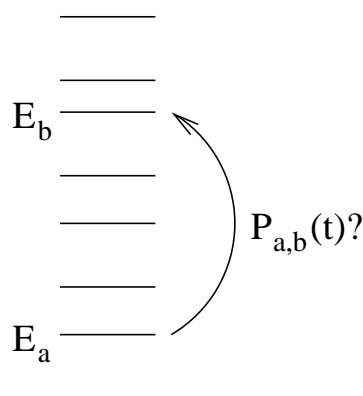
On suppose que le champs électromagnétique (6.4) apparaît pour  $t > 0$ , et que son action est assez faible pour le traiter comme une perturbation.

### 6.2.2.1 Question :

*Quelle est l'expression de l'évolution de l'état  $|\psi(t)\rangle$  pour  $t > 0$  ? (à exprimer dans la base  $|\psi_k\rangle$ ).*

*En particulier, quelle est la probabilité de transition vers un autre état  $|\psi_b\rangle$  du spectre discret :*

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |\langle \psi_b | \psi(t) \rangle|^2 = ?$$



**6.2.2.2 Solution :**

pour cela on décompose  $|\psi(t)\rangle$  dans la base propre de  $\hat{H}_0$  :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \underbrace{|\psi_k\rangle e^{-iE_k t/\hbar}}_{\text{Evolution sous } \hat{H}_0} \underbrace{c_k(t)}_{\text{Coef inconnu}}$$

où  $c_k(t) \in \mathbb{C}$  sont des composantes inconnues.

À  $t = 0$  on a

$$c_k(t = 0) = \delta_{k,a} \tag{6.5}$$

On a aussi :

$$1 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \sum_k |c_k(t)|^2$$

et

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |\langle \psi_b | \psi(t) \rangle|^2 = |c_b(t)|^2$$

Pour pouvoir considérer le champs  $\vec{E}$  comme une perturbation, on remplace  $\vec{E}$  par  $\vec{E} = \lambda \vec{E}_0$  dans l'expression de  $\hat{H}$ , avec  $\lambda$  un paramètre sans dimension, et  $\vec{E}_0$  un champ fixe. On écrit aussi  $\hat{H}_1(t) = -q \vec{x} \cdot \vec{E}_0(t)$ , et

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$$

Cela nous permet juste de faire des développements limités pour  $\lambda \rightarrow 0$ . On développe alors

$$c_k(t) = c_k^{(0)} + \lambda c_k^{(1)} + \lambda^2 c_k^{(2)} + \dots$$

et l'équation de Schrödinger

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

s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \sum_k |\psi_k \rangle e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} \left( -\frac{i}{\hbar} E_k c_k + \frac{dc_k}{dt} \right) &= -\frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t) \right) \left( \sum_k |\psi_k \rangle e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} c_k \right) \\ &= \sum_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} c_k \left( -\frac{i}{\hbar} E_k |\psi_k \rangle - \frac{i}{\hbar} \lambda \hat{H}_1(t) |\psi_k \rangle \right) \end{aligned}$$

soit en multipliant par  $\langle \psi_b |$  :

$$\frac{dc_b(t)}{dt} = -\lambda \frac{i}{\hbar} \sum_k c_k(t) e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} e^{i\frac{E_b t}{\hbar}} \langle \psi_b | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle \quad (6.6)$$

On notera l'élément de matrice de la perturbation :

$$H_{b,k}(t) = \langle \psi_b | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle$$

et la fréquence de Bohr :

$$\omega_{b,k} = \frac{E_b - E_k}{\hbar}$$

L'équation (6.6) est rigoureusement équivalente à l'équation de Schrödinger. On peut la développer en puissances de  $\lambda$ . Cela donne :

$$\begin{aligned} \lambda^0 : \quad \frac{dc_b^{(0)}}{dt} &= 0 \\ \lambda^1 : \quad \frac{dc_b^{(1)}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k c_k^{(0)}(t) e^{i\omega_{b,k} t} H_{b,k}(t) \\ &\vdots \end{aligned}$$

La résolution tenant compte des conditions initiales (6.5), donne :

$$\begin{aligned} c_b^{(0)}(t) &= \delta_{b,a} \\ c_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{b,a} t'} H_{b,a}(t') dt' \end{aligned}$$

donc au premier ordre :

$$\boxed{P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{b,a} t'} H_{b,a}(t') dt' \right|^2, \quad b \neq a}$$

Pour l'application qui nous concerne,  $\lambda H_1(t) = W e^{i\omega t} + W^+ e^{-i\omega t}$  et  $\int_0^t e^{i\omega t'} dt' = \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega}$ . on obtient :

$$P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| W_{ba} \frac{e^{i(\omega_{b,a} + \omega)t} - 1}{\omega_{b,a} + \omega} + W_{ba}^+ \frac{e^{i(\omega_{b,a} - \omega)t} - 1}{\omega_{b,a} - \omega} \right|^2 \quad (6.7)$$

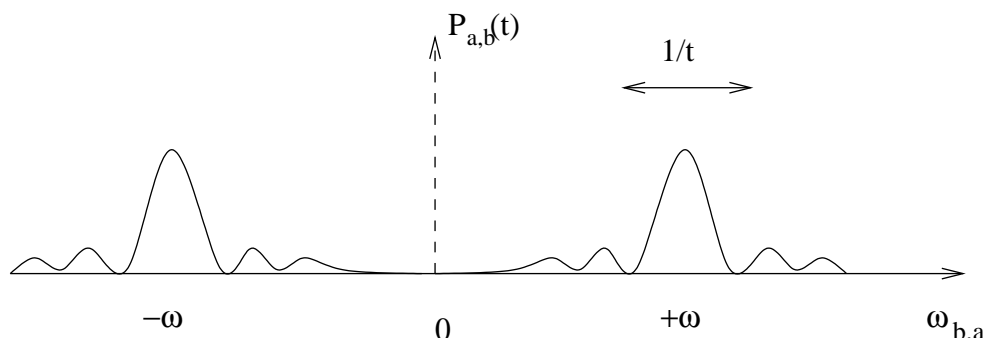


FIG. 6.6 – Allure de  $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$ . Pour  $1 \ll \omega_{ab}t$ , les deux pics provenant de chaque terme de (6.7) sont bien séparés.

dont l'allure est donné sur la figure 6.6.

Dans le cas qui nous intéresse,  $|\omega_{ab}| > 10^{12} \text{ Hz}$  dans l'infrarouge, le visible ou l'ultraviolet, et la durée  $t$  du pulse de radiation, est suffisamment grande pour avoir  $|\omega_{b,a}t| \gg 1$ , et donc une bonne séparation des termes de eq(6.7).

Ainsi  $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$  est important que si l'un ou l'autre des dénominateurs est proche de zéro, c'est à dire si  $\omega_{b,a} \simeq \pm\omega$ , et alors :

$$\boxed{P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) \simeq \frac{|W_{ba}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{ba} \pm \omega)} \quad (6.8)$$

avec

$$F(t, \Omega) = \begin{cases} \frac{4 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2} : & \text{si } \Omega \neq 0 \\ t^2 : & \text{si } \Omega = 0 \end{cases} \quad (6.9)$$

et

$$\Omega = \omega_{ba} \pm \omega : \quad \text{désaccord de fréquences}$$

Voir figures 6.7,6.8, montrant la croissance de  $P_{ab}(t)$  et ses oscillations si il y a désaccord de fréquences.

Remarquer que  $\int F d\Omega = 2\pi t$  et

$$F(t, \Omega) \longrightarrow 2\pi t \delta(\Omega), \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (6.10)$$

voir figure (6.8).

### 6.2.2.3 Interprétation des résonances :

– Si  $\omega_{b,a} = \omega$  alors

$$E_b = E_a + \hbar\omega$$

**L'atome  $a$  gagné l'énergie  $\hbar\omega$  de la part du champ électromagnétique classique.**

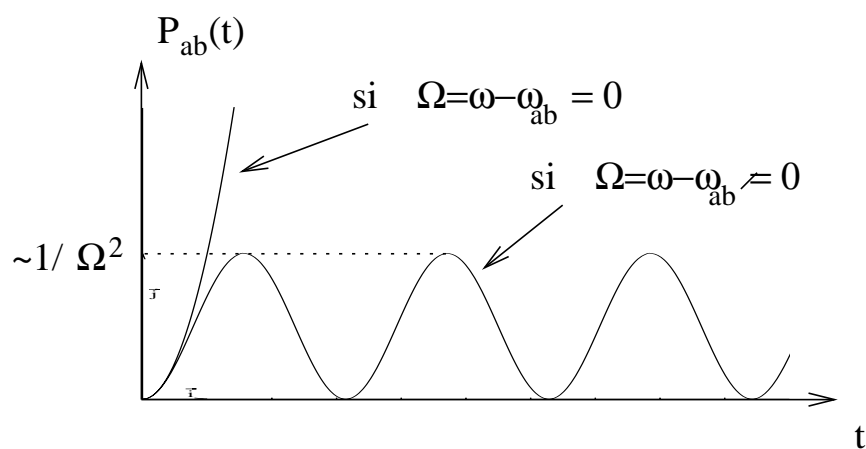


FIG. 6.7 – Allure de la probabilité de transition  $P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t)$ , selon que  $\Omega \neq 0$  ou  $\Omega = 0$ . Dans ce dernier cas, le résultat n'est valable que tant que  $P_{ab}(t) \ll 1$ .

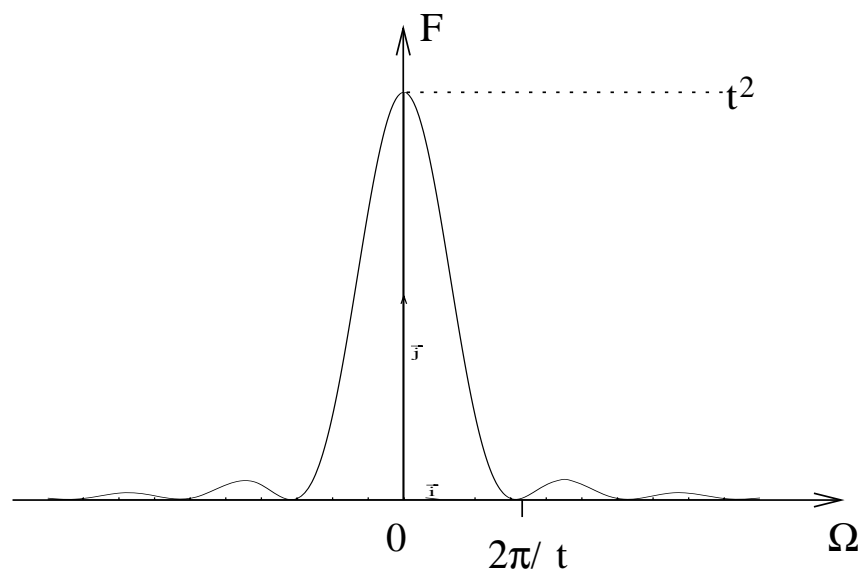


FIG. 6.8 – Graphe de  $F(t, \Omega)$  à  $t$  fixé, voir eq(6.9).

Si on traitait le champ par la mécanique quantique, dans le cadre de l'électrodynamique quantique (Q.E.D.), on montrerait que **l'atome a absorbé un photon d'énergie  $\hbar\omega$** .

- Si  $\omega_{b,a} = -\omega$  alors

$$E_b = E_a - \hbar\omega$$

**L'atome a cédé l'énergie  $\hbar\omega$  au champ électromagnétique classique.** Si on traitait le champ par la mécanique quantique, dans le cadre de l'électrodynamique quantique (Q.E.D.), on montrerait que **l'atome a émit un photon d'énergie  $\hbar\omega$** . C'est le phénomène **d'émission stimulée**.

Finalement, on a retrouvé les relations de Bohr (1913).

### Remarque

- Les résultats que nous venons d'obtenir sont très analogues aux phénomènes de résonance en mécanique classique linéaire (résonances et battements). C'est le même phénomène ici retrouvé dans le cadre des états quantiques.
- On a  $|W_{ab}| = |W_{ba}|$  montrant que dans cette description, le processus d'absorption et émission stimulée ont la même probabilité. En réalité ce n'est pas vrai, et la différence se calcule dans le cadre de la Q.E.D. qui considère le champ comme un système dynamique.

Néanmoins, il est possible de calculer la différence sans rentrer dans la complexité de la Q.E.D.. C'est l'argument d'Einstein qui utilise des considérations de physique statistique pour la dynamique du champ et de l'atome. Il montre alors la nécessité du phénomène **d'émission spontanée** qui est que l'atome peut transiter de  $E_b$  vers  $E_a < E_b$  en émettant un photon, même en l'absence de champ extérieur.

Ce phénomène a un équivalent classique : la radiation de Larmor d'une charge accélérée.

Cf Bransden p499-501. @@ (à rédiger ici)

#### 6.2.2.4 Expression de $|W_{ba}|^2$

La probabilité de transition  $P_{ab}(t)$  eq(6.8), dépend de l'élément de matrice :

$$W_{ba} = \langle \psi_b | \frac{e}{2} \hat{x} \cdot \overline{\vec{E}_{\vec{k},\omega}} | \psi_a \rangle$$

donnant :

$$|W_{ba}|^2 = \frac{1}{4} |\vec{E}_{\vec{k},\omega}|^2 |D_{ba}|^2 \cos^2 \theta \quad (6.11)$$

$$= \frac{I}{2\varepsilon_0 c} |D_{ba}|^2 \cos^2 \theta \quad (6.12)$$

où  $D_{ba}$  sont les éléments de matrice de l'opérateur moment dipolaire électrique  $\vec{D} = -e \vec{x}$ , et où l'intensité de l'onde incidente  $I$  est obtenue par la norme du vecteur de Poynting  $\vec{S} = c^2 \varepsilon_0 \vec{E} \wedge \vec{B}$  :

$$I = \text{flux d'énergie incident} = \langle |\vec{S}| \rangle = \frac{\varepsilon_0 c}{2} |\vec{E}_\omega|^2 : \text{intensité de l'onde incidente}$$

Le résultat (6.12) montre que *l'influence du champ  $\vec{E}$  sur l'atome est directive à cause du terme  $\cos^2 \theta$*  : l'absorption d'énergie ou l'émission d'énergie se fait de façon privilégiée si  $\vec{D}$  est parallèle à  $\vec{E}$ . Voir figure (6.9).

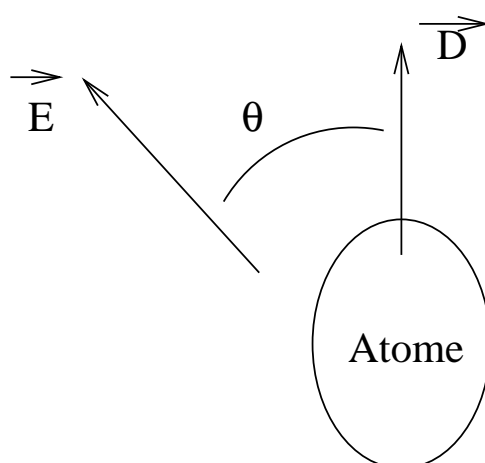


FIG. 6.9 –

Nous discuterons au chapitre suivant le terme  $|D_{ab}|^2$  qui est souvent nul pour des raisons de symétries. (**règles de sélections**).

### 6.2.3 Effet d'une onde incohérente

Nous supposons toujours l'atome soumis à l'influence d'une onde électromagnétique à partir de  $t = 0$ . Mais maintenant, nous supposons l'**onde incohérente**, c'est à dire que c'est une superposition d'onde planes de différentes fréquences  $\omega$ , (avec des déphasages aléatoires).

C'est le cas de la lumière émise par une ampoule par exemple, où cette lumière est la superposition de nombreux trains d'ondes provenant de la désexcitation indépendantes de nombreux atomes.

Au contraire un faisceau cohérent (dans une certaine limite) est produit par un dispositif LASER.

Du fait de l'indépendance statistique des ondes planes composant un faisceau incohérent, **on somme les probabilités** (et non pas les amplitudes).

**6.2.3.1 Question :**

Dans le cas d'un faisceau incident incohérent, quelle est la probabilité de transition de l'état atomique  $|\psi_a\rangle$  vers un autre état  $|\psi_b\rangle$  du spectre discret :

$$P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) = ?$$

**6.2.3.2 Solution**

On a

$$P_{a \rightarrow b}^{inc}(t) = \int_0^\infty P_{ab}(t) d\omega$$

on utilise (6.8) et (6.10), donnant :

$$P_{ab}^{inc}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |W_{ba}|^2 t = \frac{\pi I}{\hbar^2 c \varepsilon_0} \cos^2 \theta |D_{ab}|^2 t$$

où  $I$  est l'intensité de l'onde incidente à la fréquence  $\omega_{ab}$ .

qui n'est valable bien sûr tant que  $P \ll 1$  (car on utilise la théorie de perturbation qui suppose cela). La croissance  $P_{ab}^{inc}(t)$  est donc linéaire.

On défini :

$$T_{ab} = \frac{dP_{ab}^{inc}}{dt} = \text{constante} \quad : \text{taux de transition}$$

et

$$\sigma_{ab} = \frac{T_{ab}}{I} (\hbar\omega_{ab}) \quad : \text{section efficace d'absorption}$$

Si la radiation incidente est non polarisée et isotrope, c'est à dire si les trains d'ondes ont des polarisations et directions indépendantes, et on obtient @@ :

$$T_{ab} = \frac{I}{3\hbar^2 c \varepsilon_0} |D_{ab}|^2$$

**Exercice (TD) :** @@ Bransden p508, la loi de somme de Thomas Reiche Kuhn.

**6.2.3.3 Loi de décroissance**

@@

Bransden p509, distribution Lorentzienne, partie imaginaire de  $E$ .

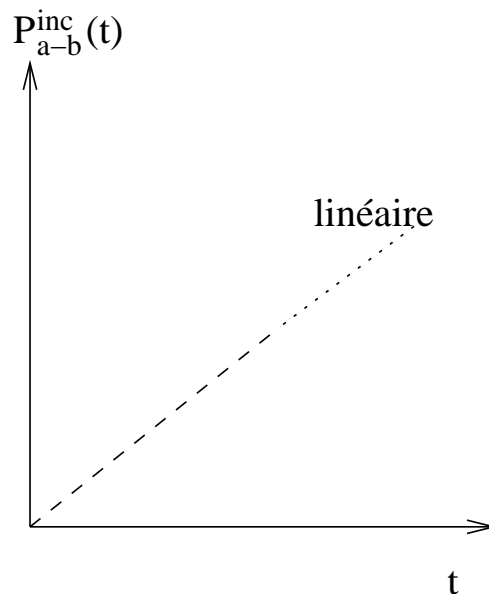


FIG. 6.10 – Loi linéaire de la transition induite par un faisceau incohérent.

#### 6.2.4 Transition vers les continuum ; La photo-ionisation ; Effet photoélectrique

On considère toujours le même modèle que précédemment, mais cette fois ci, on s'intéresse à la transition de l'état fondamental d'énergie  $E_a$  (état lié) vers un état du continuum d'énergie  $E_b \gg E_a$ , qui est un état non lié, où l'électron de l'atome est libéré et part, voir figure 1.20, page 48.

Dans l'état final, l'atome est donc ionisé.

On notera

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} \quad : \text{densité de niveaux du continuum par unité de volume}$$

la densité de niveau qui est le nombre de niveaux par intervalle d'énergie et unité de volume, que l'on supposera constante autour de  $E_b$ .

On supposera aussi  $|W_{ab}|^2$  constante autour de  $E_b$ .

Voir figure 6.11.

**Question :** En sommant sur les probabilité  $P_{a \rightarrow b}(t)$ , donner  $P_{a \rightarrow cont}(t)$  qui est la probabilité de ionisation de l'atome ?

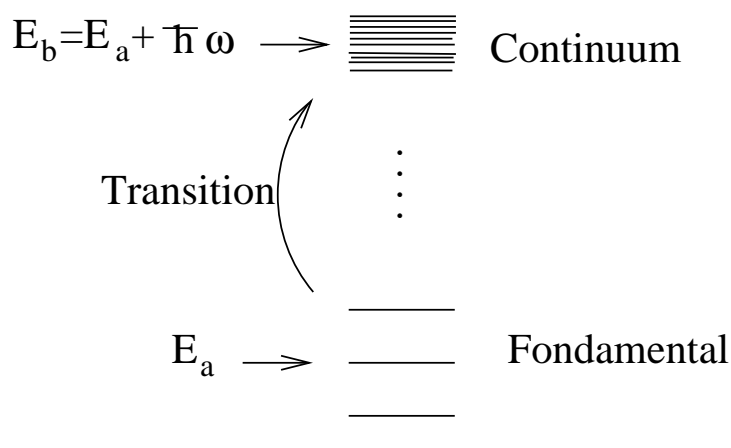


FIG. 6.11 –

**Solution**

$$\begin{aligned}
 P_{a \rightarrow \text{cont}} &= \sum_b P_{a \rightarrow b}(t) \\
 &= \int P_{a \rightarrow b}(t) \rho(E) dE \quad \text{car } dn = \frac{dn}{dE} dE = \rho(E) dE
 \end{aligned}$$

Donc, comme  $\frac{dE}{d\Omega} = \hbar$

$$P_{a \rightarrow \text{cont}}(t) = \rho(E_b) \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ab}|^2 t$$

ce dernier résultat s'appelle **la règle d'or de Fermi**.

**6.2.4.1 Remarques**

- Noter que cette probabilité est proportionnelle au temps  $t$  (tant que  $P_{a \rightarrow \text{cont}} \ll 1$  bien sûr), et aussi proportionnelle à la densité de niveaux  $\rho(E_b)$ .
- (TD) Si l'énergie cinétique finale est très supérieure à l'énergie potentielle alors  $E \simeq \frac{p^2}{2m}$  comme pour une particule libre. La densité de niveaux est (voir TD, ou chapitre 1 @@) :

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{2\pi}{h^3} (2m) V p$$

où  $V$  est le volume où se trouve la particule libérée ( $V$  grand et n'apparaîtra pas à la fin).

on obtient alors @@ (Bransden p519), pour la **section efficace différentielle** d'ionisation (section efficace par unité d'angle solide) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega) = 32\alpha \frac{\hbar}{m\omega} \left( \frac{Z}{k a_a} \right)^5 \cos^2 \theta$$

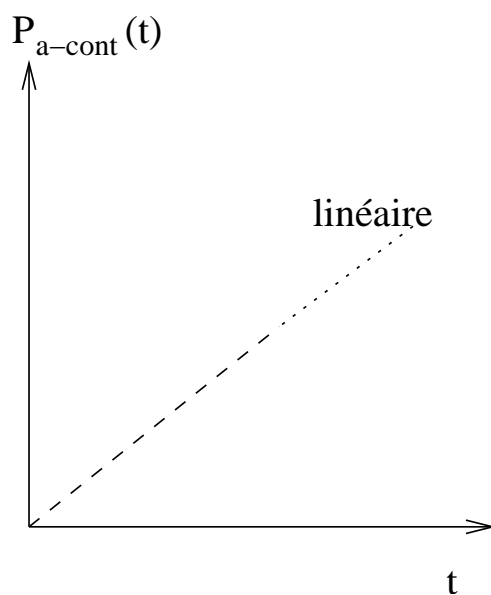


FIG. 6.12 – Loi linéaire de la transition induite par un faisceau cohérent vers un continuum d'états.

Pour un faisceau non polarisé, on obtient :

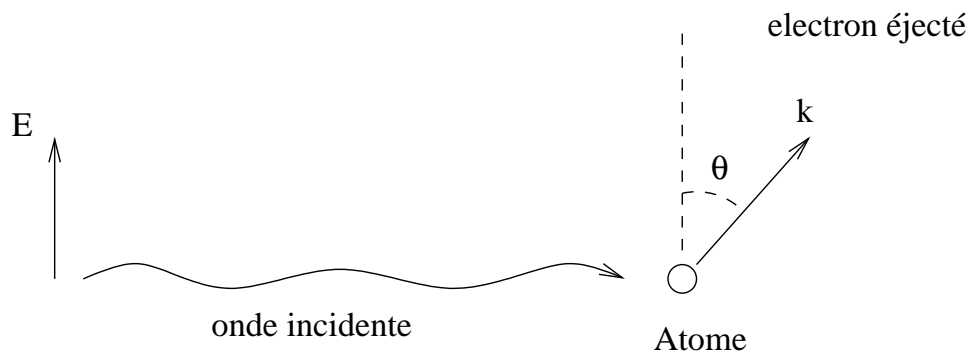


FIG. 6.13 – Diffusion de l'onde électromagnétique polarisée rectiligne, sur un atome, éjectant un électron dans le vecteur impulsion  $\vec{k}$ .

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega) = 16\alpha \frac{\hbar}{m\omega} \left( \frac{Z}{k a_a} \right)^5 \sin^2 \Theta$$

où  $\Theta$  est l'angle entre  $\vec{k}$  et l'axe de faisceau incident.

– La section efficace totale (intégrée sur toutes les directions) est :

$$\sigma(\omega) = \frac{16\pi\sqrt{2}}{3} \alpha \left( \frac{Z}{a_0} \right)^5 \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{7/2}$$

– courbes expérimentales @@

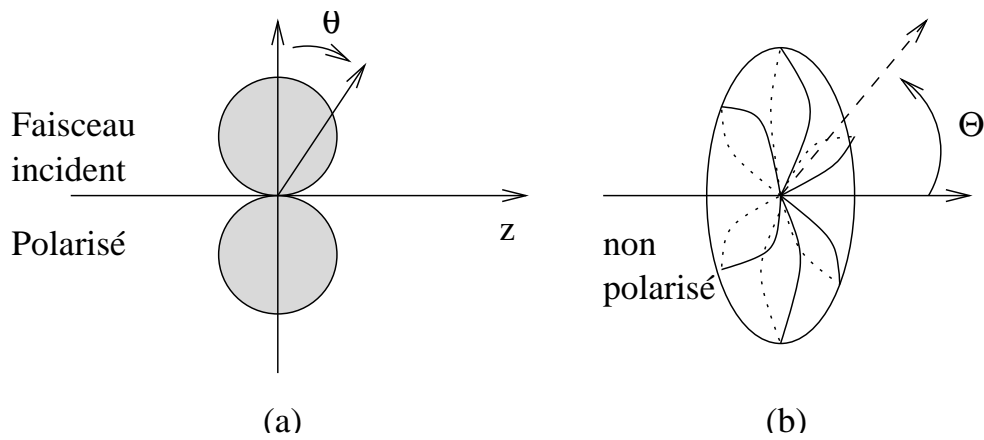


FIG. 6.14 – Distribution angulaire de probabilité de l'électron éjecté lors de l'ionisation, dans le cas (a) d'un faisceau polarisé selon  $z$  ou (b) d'un faisceau non polarisé.

### Exercices

- TD : Photo-désintégration du deuton, Bransden p520 @@
- TD : Théorie élémentaire de la constante diélectrique  $\varepsilon(\omega)$ .

## 6.3 Méthodes variationnelles

### 6.3.1 Méthode variationnelle pour problèmes stationnaires

ref : Ballentine [L.E90]p.270.

Le résultat que nous allons montrer est très simple, mais très utile dans de nombreux problèmes de physique quantique, où il est impossible de connaître la solution exacte.

#### 6.3.1.1 Propriété

Si  $E_0$  est l'énergie fondamentale de l'opérateur  $\hat{H}$ , alors pour tout état  $|\phi\rangle$ , on a :

$$E_0 \leq \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

preuve :

si le spectre de  $\hat{H}$  est :  $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ , on a  $|\phi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|\phi\rangle$ , donc :

$$\langle \phi|\hat{H}|\phi\rangle = \sum_n E_n |\langle \phi|\psi_n\rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle \phi|\psi_n\rangle|^2 = E_0 \langle \phi|\phi\rangle$$

■

Cette propriété ne dit en fait rien d'autre que : la moyenne d'une série de nombre est plus grande que le plus petit des nombres de cette série.

### 6.3.1.2 Méthode variationnelle

Dans un problème où l'on cherche à estimer l'état fondamental  $|\psi_0\rangle$  et l'énergie  $E_0$  d'un Hamiltonien  $\hat{H}$  :

1. On choisit une famille d'états quantiques  $|\phi_\mu\rangle$  appelée **famille d'essai**, dépendant d'un paramètre continu  $\mu$ , ou de plusieurs paramètres.
2. La propriété ci-dessus se traduit sur le graphique (6.15), et le calcul consiste alors à trouver le paramètre  $\mu^*$  tel que  $E_\mu = \frac{\langle \phi_\mu|\hat{H}|\phi_\mu\rangle}{\langle \phi_\mu|\phi_\mu\rangle}$  soit minimum.
3. On espère alors que  $|\phi_{\mu^*}\rangle$  sera une bonne approximation de l'état fondamental  $|\psi_0\rangle$  inconnu, et que  $E_{\mu^*}$  sera une bonne approximation de son énergie  $E_0$ .

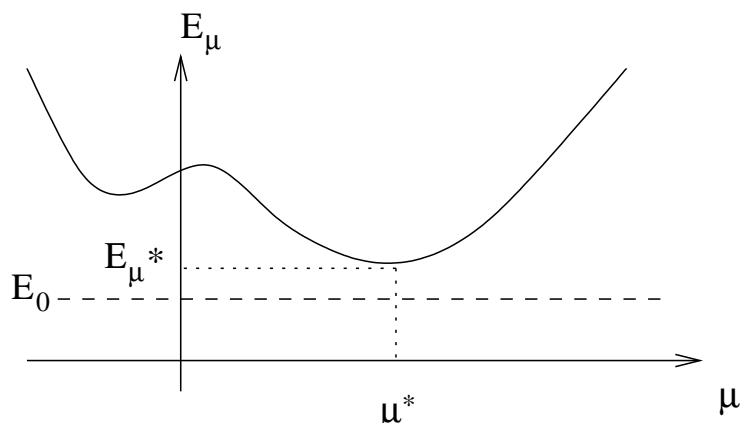


FIG. 6.15 – Illustre la méthode variationnelle : Pour estimer  $E_0$ , on recherche le minimum de  $E_\mu = \langle \phi_\mu|\hat{H}|\phi_\mu\rangle / \langle \phi_\mu|\phi_\mu\rangle$  en fonction de  $\mu$ .

Dans de nombreux problèmes importants (ex.. théorie B.C.S. de la supraconductivité) cette méthode est irremplaçable. Cependant la difficulté est de choisir la “bonne” famille d'essai sur des critères d'arguments physiques (pour bien approcher  $E_0$ ), et aussi de calculabilité (il faut pouvoir calculer la moyenne). Souvent les calculs se font à l'ordinateur.

**6.3.1.3 Exemple : vibration anharmonique d'un atome (TD)**

On reprend l'exemple (6.3) page 190, avec

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4$$

pour  $\lambda > 0$ , il est impossible de calculer analytiquement l'état fondamental.

Pour la fonction d'onde d'essai, il est naturel de choisir une fonction gaussienne normalisée, de largeur variable  $\sigma$ , voir (1.6), page 18 :

$$\langle x | \psi_\sigma \rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

**Calcul de l'énergie moyenne :**

$$E_\sigma = \langle \psi_\sigma | \hat{H} | \psi_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-1/\sigma^2 + x^2/\sigma^4\right) + \frac{1}{2}kx^2 + \lambda x^4 \right] \frac{1}{(\pi\sigma^2)^2} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right)$$

C'est une intégrale Gaussienne (??), et donne :

$$E_\sigma = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \left( \frac{w}{4} + \frac{1}{4w} + \frac{3}{4}g \frac{1}{w^2} \right)$$

avec

$$w = \frac{\hbar}{\sigma^2 \sqrt{km}} > 0$$

et

$$g = \frac{\hbar^2 \lambda}{km} > 0$$

**Recherche du minimum de  $E_\sigma$**  On observe que pour  $w \rightarrow 0$  ou  $+\infty$ , alors  $E_\sigma \rightarrow +\infty$ . Cela garantit l'existence d'un minimum de la fonction  $E(w)$ , que l'on trouve en écrivant :

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dw} &= 0 \\ \Leftrightarrow w^3 - w - 6g &= 0 \end{aligned}$$

C'est une équation du troisième degré.

Posons

$$G = 3^5 g^2$$

Alors si  $G > 1$ , la solution est

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \alpha + \frac{1}{\alpha} \right) \\ \alpha &= \sqrt{G} + \sqrt{G-1} \end{aligned}$$

et si  $0 \leq G \leq 1$  la solution est

$$w = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right)$$

$$\cos \varphi = \sqrt{G}$$

**Résultats numériques et observations** On pose  $E_{\text{variét.}} = E(w_{\text{min}})$ . Comparons à la solution exacte (numérique avec  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $k = 1$ ), tracée sur la figure 6.3.

$\lambda$	0	0.1	1	10	100
$E_{\text{exact}}$	0.5	0.55915	0.8038	1.5050	3.1314
$E_{\text{variét.}}$	0.5	0.5603	0.8125	1.53125	3.19244
$\delta E$	0	0.0012	0.0087	0.026	0.06

On remarque que les résultats sont bons, avec une faible erreur, et d'autant meilleurs que  $\lambda \rightarrow 0$ . Cela tient du fait que la fonction d'onde d'essai est la solution exacte pour  $\lambda = 0$ .

**Exercices (suggestions)** TD : États électron. de l'hélium par th. perturbation 1er ordre, et méthode variationnelle. Tenir compte du spin, cf Sakurai p369.

Ex : excitons en puits quantiques, cf livre Singh p300.

Approx particules indépend pb dépendant du temps et états coh. donnant la mécanique classique.

TD : modèle de Friedrichs et applications.



# Chapitre 7

## Symétries et règles de conservation

### 7.1 Propriétés et méthodes de base

#### 7.1.1 Spectre commun de deux opérateurs qui commutent

Jusqu'à présent nous avons discuté le spectre d'un seul opérateur à la fois. La propriété suivante qui concerne deux opérateurs est très utile pour la suite.

**Propriété** *Supposons que deux opérateurs auto-adjoints  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent, (c'est à dire que  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ). Alors il existe une base propre commune des deux opérateurs. C'est à dire qu'il existe une famille de vecteurs  $|V_i\rangle$  formant une base de  $\mathcal{H}$ , tels que*

$$\hat{A}|V_i\rangle = a_i|V_i\rangle \quad \text{et} \quad \hat{B}|V_i\rangle = b_i|V_i\rangle$$

*(Ici  $i$  est un indice discret ou continu selon que le spectre est discret ou continu). Géométriquement, les espaces propres de  $\hat{A}$  sont invariants par l'action de  $\hat{B}$ , et inversement. Plus généralement on peut énoncer une propriété similaire pour  $N$  opérateurs qui commutent deux à deux.*

**preuve :** (cf Bransden p205).

Considérons tout d'abord un opérateur  $\hat{A}$  seul, et son spectre. On note  $a$  les différentes valeurs propres de  $\hat{A}$ . Chaque valeur propre peut avoir une certaine multiplicité  $d_a \geq 1$ , et l'espace propre correspondant noté  $\mathcal{H}_a$  est de dimension  $d_a$ . Ainsi on décompose :

$$\mathcal{H} = \bigoplus_a \mathcal{H}_a$$

Considérons l'opérateur  $\hat{B}$ . Soit un vecteur  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_a$ . Par définition,  $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ . Notons  $|\psi'\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$ , alors

$$\hat{A}|\psi'\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle = a|\psi'\rangle$$

donc  $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}_a$  aussi. On dit que **l'espace propre  $\mathcal{H}_a$  de  $\hat{A}$  est globalement invariant par l'opérateur  $\hat{B}$** . On peut alors chercher le spectre de  $\hat{B}$  dans chaque l'espace  $\mathcal{H}_a$ . Un tel vecteur propre  $|V_i\rangle$  vérifiera donc  $\hat{B}|V_i\rangle = b_i|V_i\rangle$  et  $\hat{A}|V_i\rangle = a|V_i\rangle$ , car  $|V_i\rangle \in \mathcal{H}_a$ . ■

### 7.1.2 Application : recherche du spectre de $\hat{H}$

L'application habituelle de cette propriété est la suivante :

Si  $\hat{A}$  est un opérateur dont le spectre est connu, et si l'on a  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ , alors la propriété ci-dessus permet de simplifier la recherche du spectre de  $\hat{H}$ . Il suffit :

1. Chercher les espaces propres  $\mathcal{H}_a$  de l'opérateur  $\hat{A}$
2. Chercher le spectre de  $\hat{H}$  dans chaque espace propre  $\mathcal{H}_a$ .

On a vu que la dynamique générée par  $\hat{H}$  est interne à chaque espace  $\mathcal{H}_a$ .

**Exemples simples** Voici des exemples (simples ; on verra des exemples plus compliqués plus loin, montrant l'intérêt de la méthode).

1. Pour une particule libre dans  $(x, y, z)$ , on a  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ , et donc  $[\vec{p}, \hat{H}] = 0$ , c'est à dire  $\hat{A}_1 = \hat{p}_x$ , et  $\hat{A}_2 = \hat{p}_y$ , et  $\hat{A}_3 = \hat{p}_z$ . L'espace propre commun de valeur propre  $(p_x, p_y, p_z)$  correspond à une onde plane  $|p_x, p_y, p_z\rangle$  (Il est de dimension 1). Par conséquent les états propres de  $\hat{H}$  sont des ondes planes.
2. Pour une particule à une dimension, dans un double puits de potentiel *symétrique*,  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ , considérons **l'opérateur de parité  $\hat{\mathcal{P}}$**  défini par :

$$\hat{\mathcal{P}} : \psi(x) \rightarrow \psi(-x)$$

C'est un opérateur unitaire. On a  $\hat{\mathcal{P}}^2 = Id$ , et donc ses valeurs propres sont  $\pm 1$ . L'espace propre associé à la valeur propre  $+1$  est constitué par toutes les fonctions paires,  $\mathcal{H}_+$ . L'espace propre associé à la valeur propre  $-1$  est constitué par toutes les fonctions impaires,  $\mathcal{H}_-$ . Ce sont des espaces de dimension infinie, et l'on a  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$ .

On a  $[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$  (vérifier), et la propriété ci-dessus, permet de chercher les fonctions d'ondes stationnaires (spectre de  $\hat{H}$ ), parmi les fonctions paires puis impaires. cf TD.

### 7.1.3 Loi de conservation et groupe de symétrie dynamique

Supposons encore que  $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ , et que  $\hat{A}$  soit un *opérateur auto-adjoint*.

Rappelons que l'opérateur auto-adjoint  $\hat{A}$  peut s'interpréter comme étant une **observable physique**, ou encore comme le **générateur d'un groupe à un paramètre de transformations** :

$$\hat{G}(\lambda) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{A}\lambda\right)$$

De même pour l'opérateur  $\hat{H}$  qui génère les opérateurs unitaires d'évolution :

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

Les quatre relations suivantes sont alors *équivalentes* :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= 0 \\ [\hat{U}(t), \hat{A}] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{G}(t)] &= 0 \\ [\hat{U}(t), \hat{G}(t)] &= 0 \end{aligned}$$

en effet, par exemple si  $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ , alors  $[\hat{U}(t), \hat{A}] = [\exp(-i\hat{H}t/\hbar), \hat{A}] = [\sum_n \frac{1}{n!} (-i\hat{H}t/\hbar)^n, \hat{A}] = 0$  car  $[\hat{H}^n, \hat{A}] = 0, \forall n$ .

Nous allons voir maintenant que chacune de ces quatre relations a une interprétation ou une conséquence physique spécifique.

Tout d'abord la relation  $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$  a été exploitée au paragraphe précédent.

Ensuite :

#### 7.1.3.1 Loi de conservation :

De la relation  $[\hat{U}(t), \hat{A}] = 0$  on déduit que quelque soit l'état initial  $|\psi\rangle$ , la valeur moyenne de l'observable  $\hat{A}$  sur l'état  $|\psi(t)\rangle$  est constante au cours du temps :

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \text{constante}_t \quad (7.1)$$

Plus précisément, **toute la distribution de probabilité de l'observable sur l'état (1.22) est conservée.**

**preuve :**  $\langle \hat{A} \rangle (t) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) \hat{A} | \psi(0) \rangle = \langle \hat{A} \rangle (0)$ , car  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = Id$ .

**Exemples simples**

1. Pour une particule libre dans  $(x, y, z)$ , on a  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ , et donc  $[\vec{p}, \hat{H}] = 0$ . Alors  $\langle \vec{p} \rangle (t) = cste$ , c'est à dire que l'impulsion moyenne est conservée au cours du temps.
2. Pour une particule à une dimension, dans un double puits de potentiel *symétrique*,  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ , si l'état  $|\psi(0)\rangle$  est une fonction paire (respect. impaire) à la date  $t = 0$ , alors elle reste une fonction paire (respect. impaire) à tout instant  $t$ .
3. On a  $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$  naturellement. Donc  $\langle \hat{H} \rangle (t) = cste$  : l'énergie moyenne est conservée. (Attention, on a supposé que l'opérateur  $\hat{H}$  ne dépend pas du temps).

**Remarques :**

- Sur la brisure spontanée de symétrie, qui fait que certains états observés ne respectent pas la symétrie de  $H$ . Ex : le crayon qui tombe, une particule dans un double puits, ou la vie qui a la chiralité droite (on assimile pas le sucre "gauche"). @@
- Non conservation de la parité par l'interaction faible. (1956) @@

**7.1.3.2 Groupe de symétrie dynamique**

De la relation  $[\hat{U}(t), \hat{G}(\lambda)] = 0, \forall t, \lambda$ , on déduit que la dynamique est invariante par les opérations de symétrie  $\hat{G}(\lambda)$ . En effet le diagramme de la figure (7.1)(a) commute. On dit que le groupe d'opérateurs  $\hat{G}(\lambda)$  est un **groupe de symétrie dynamique**.

La relation  $[\hat{H}, \hat{G}(\lambda)] = 0$   
a pour conséquence que si  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , et si on transforme  $|\psi'\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$ , alors

$$\hat{H}|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{G}|\psi\rangle = \hat{G}\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{G}|\psi\rangle = E|\psi'\rangle$$

donc  $|\psi'\rangle$  est aussi vecteur propre de  $\hat{H}$ , de même valeur propre  $E$ . Voir figure 7.1(b).  
Autrement dit l'espace propre d'énergie  $E$  est invariant par l'action du groupe.  
Si  $|\psi'\rangle$  n'est pas colinéaire à  $|\psi\rangle$ , on déduit que la valeur propre  $E$  est dégénérée. Mais il se peut que  $|\psi'\rangle$  soit colinéaire à  $|\psi\rangle$ . On verra plus loin une règle générale à ce sujet (selon que le groupe de symétrie est commutatif ou non).

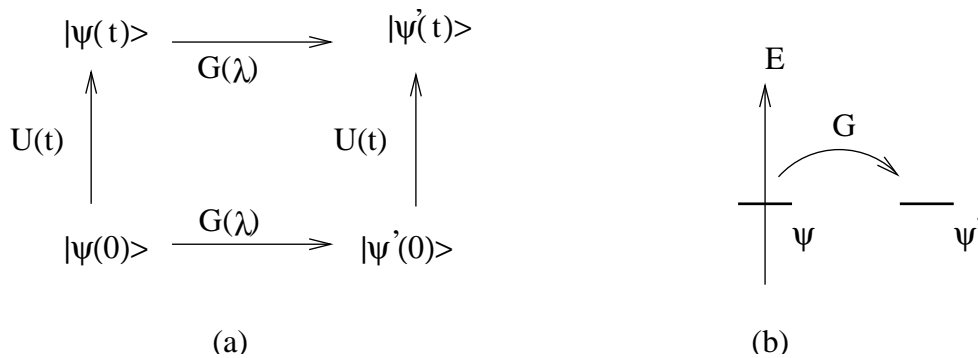


FIG. 7.1 – (a) La relation de commutation  $[\hat{U}(t), \hat{G}(\lambda)] = 0, \forall t, \lambda$ , signifie que partant d'un état  $|\psi(0)\rangle$ , il est équivalent de le transformer et le faire évoluer ensuite, ou l'inverse. (b) La relation  $[\hat{H}, \hat{G}(\lambda)] = 0$  montre que si  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  alors  $|\psi'\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$  est aussi vecteur propre de même énergie.

### Exemples simples

1. Pour une particule libre dans  $(x, y, z)$ , on a  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ , et donc  $[\vec{p}, \hat{H}] = 0$ . Or  $\vec{p}$  est le générateur des translations en espace. Il y a donc invariance de la dynamique par translation spatiale. En termes plus simples, une particule libre aura la même évolution indépendamment de son point de départ.
2. On a  $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$  naturellement. Or  $\hat{H}$  est le générateur des translations en temps. Il y a donc invariance de la dynamique par translation temporelle. En termes plus simples, une particule aura la même évolution indépendamment de sa date de départ.

**Exercice (TD) :** réflexion d'un paquet d'onde sur un mur.

#### 7.1.4 Impulsion totale et conservation

Considérons deux particules en **interaction mutuelle**, (comme un électron et un proton dans un atome d'hydrogène). Supposons que cette interaction soit décrite par une force dérivant de l'énergie potentielle  $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ .

L'espace de Hilbert total est

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$$

et le Hamiltonien total est l'opérateur :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$$

**L'énergie ne dépend donc que de la distance mutuelle  $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$  des deux particules.**

Le système est donc invariant par translation de l'ensemble des deux particules, dont l'opérateur (de translation de  $\vec{\lambda}$ ) agissant dans  $\mathcal{H}_{tot}$  est :

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\vec{\lambda}} &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1 \cdot \vec{\lambda}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_2 \cdot \vec{\lambda}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_{tot} \cdot \vec{\lambda}\right)\end{aligned}$$

montrant que le générateur des translation de l'ensemble du système est l'opérateur **impulsion totale** :

$$\boxed{\vec{p}_{tot} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad : \text{impulsion totale}}$$

(rappel : il s'agit en fait de  $\vec{p}_{tot} = \vec{p}_1 \otimes Id_2 + Id_2 \otimes \vec{p}_2$ , voir eq.5.1).

L'invariance par translation se traduit par les relations de commutation :

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{\lambda}}] = 0 \quad (7.2)$$

$$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}_{tot}] = 0 \quad (7.3)$$

et ont pour conséquence que *l'impulsion totale est conservée, que le système total est invariant par translation spatiale.*

$$\left\langle \hat{\vec{p}}_{tot} \right\rangle (t) = \text{constante}_{/t}$$

(Par exemple un atome d'hydrogène aura le même comportement quel que soit sa position globale initiale).

Plus généralement en physique, l'invariance par translation d'un ensemble de particules isolées est une propriété fondamentale qui est même un principe en physique des particules élémentaires.

## 7.2 Groupe de symétrie dynamique commutatif : électron dans un potentiel périodique cristallin, spectre en bandes.

ref : Sakurai p265.

Pour modéliser la dynamique des électrons dans un cristal, une approche simplificatrice (approximative) et de négliger tout d'abord, l'interaction répulsive entre électrons. Cela permet d'étudier la dynamique d'un électron individuellement.

---

<sup>1</sup>Plus généralement, ce calcul montre que le générateur  $\hat{G}_{tot}$  d'une transformation dans  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \dots \otimes \mathcal{H}_N$  est la somme des générateurs  $\hat{G}_{tot} = \hat{G}_1 \oplus \hat{G}_2 \dots \oplus \hat{G}_N$ .

## 7.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL PÉRIODIQUE

Cet électron subit les forces électrostatiques exercées par les noyaux du cristal. Les noyaux sont rangés de façon périodique. On modélise donc ces forces par un potentiel  $V(\vec{x})$  périodique, selon les trois translations élémentaires du cristal (voir figure 7.2) :

$$V(\vec{x} + \vec{l}_1) = V(\vec{x} + \vec{l}_2) = V(\vec{x} + \vec{l}_3) = V(\vec{x})$$

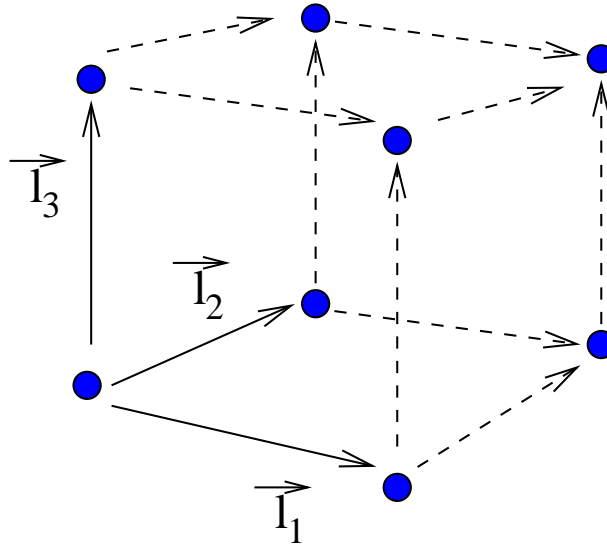


FIG. 7.2 – Dans un cristal les atomes sont répartis de façon périodique. On note  $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{l}_3$  les côtés d'une maille élémentaire.

La dynamique d'un électron est décrite par le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (7.4)$$

### 7.2.1 Explication qualitative de la formation de bandes

Sans calcul, il y a une façon simple de deviner la structure des niveaux d'énergies électronique dans un potentiel périodique :

Rappel : le potentiel Coulombien créé par un atome de charge  $+Z$  est

$$V(r) = -\frac{(eZ)e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Le potentiel créé par la structure régulière d'atomes est la superposition de ces potentiels individuels, voir figure 7.3.

Pour un électron dans le potentiel d'un atome pris individuellement, le spectre est discret (comme l'atome  $H$ ). Les états stationnaires (orbitales atomiques) sont **localisées**.

Mais à cause de la symétrie par rotation et du spin, les niveaux sont (quasi) dégénérés.

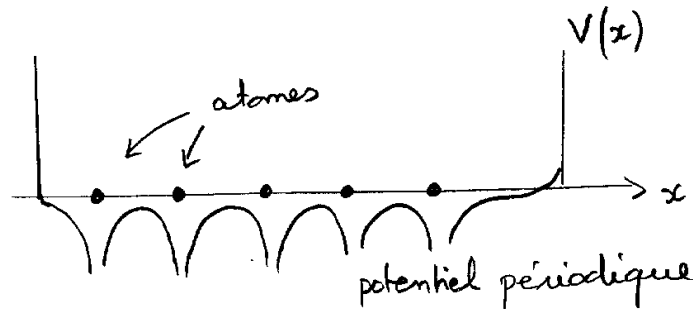


FIG. 7.3 –

Rappel : pour l'atome H les niveaux d'énergie sont

$$E_n = -\frac{\varepsilon_1 Z^2}{n^2}$$

avec  $\varepsilon_1 = me^4/(2\hbar^2) = 13,6 \text{ eV}$ . et ensuite les autres nombres quantiques sont  $0 \leq l \leq n-1$ ,  $l \leq m \leq l$ ,  $spin = \pm 1/2$ . On appelle états  $s, p, d, f, \dots$  pour respectivement  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Au total :

orbitales	1s	2s	2p	3s	3p
nombre de niveaux	2	2	6	2	6

On s'intéresse maintenant à un **état discret donné pour l'atome seul**. cad  $(n, l, m, spin = \pm 1/2)$  fixés.

- Si **2 atomes** identiques voisins : Les orbitales atomiques sont réparties sur les 2 atomes (liante-anti-liante) donnant 2 niveaux serrés
- Si **3 atomes** identiques : on a de même 3 niveaux serrés. chaque fonction est répartie sur les trois atomes.
- Si  $N$  atomes identiques (pour une mole,  $N \approx 10^{23}$ .), il y aura  $N$  niveaux serrés  $\approx$  **bande d'énergie** et une fonction d'onde stationnaire est répartie sur tout le cristal appelée **onde de Bloch**.

Voir figure 7.4.

La **largeur de la bande** dépend du recouvrement des orbitales atomiques. Donc **bandes étroites pour** le niveau 1s et bandes plus larges au dessus.

#### Schéma parlant :

Par l'imagination, on **ressère les atomes** (distance inter-atomes  $a : \infty \rightarrow 0$ ). Les orbitales se recouvrent de plus en plus, alors les bandes passent de largeur 0 (dégénérés) à très larges (car recouvrement)

Par ex : Sodium qui a 11 électrons par atome, et un écart entre atomes  $a = 3,7$ , voir figures 7.5. Le remplissage des niveaux par les électrons donne la figure 7.6.

## 7.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

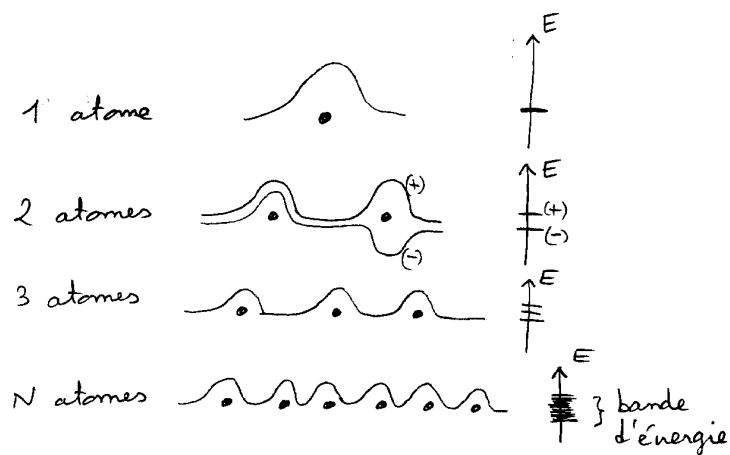


FIG. 7.4 -

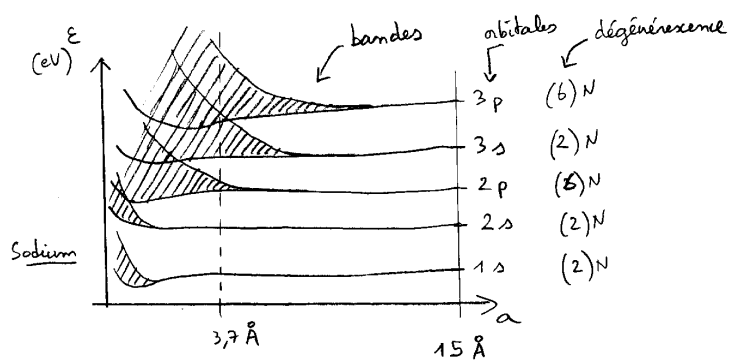


FIG. 7.5 -

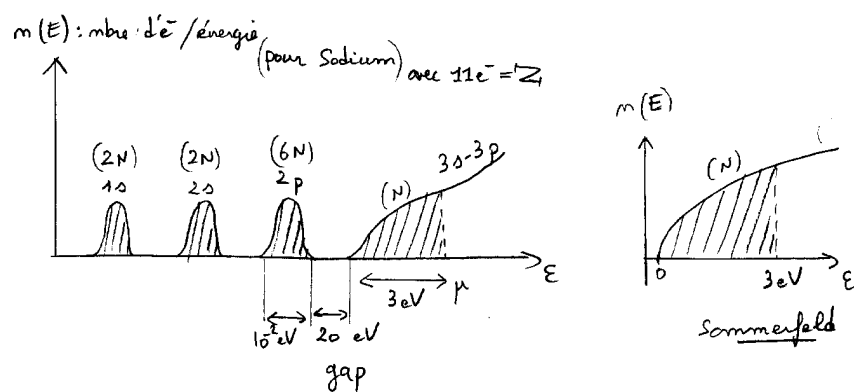


FIG. 7.6 -

### 7.2.2 Ondes de Bloch

Reprenons maintenant le problème qui est de calculer le spectre de l'opérateur 7.4, en utilisant les symétries du problème.

Le but est de montrer que les symétries par translations sont responsables de la structure en bande du spectre.

Considérons les trois opérateurs de translations d'une maille élémentaire,  $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$  :

$$\hat{T}_1 = \exp\left(-i\frac{\hat{p}\cdot\vec{l}_1}{\hbar}\right), \quad \text{etc...}$$

La périodicité du potentiel se traduit par les relations de commutations :

$$[\hat{H}, \hat{T}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

On a aussi :

$$[\hat{T}_i, \hat{T}_j] = 0, \quad \forall i, j = 1, 2, 3$$

Montrant que **le groupe de symétrie dynamique sont les translations discrètes du réseau, et que c'est un groupe commutatif.**

**preuve(TD)** : la relation  $[\hat{T}_i, \hat{T}_j] = 0$  découle de  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$  (car les opérations de dérivation commutent). Pour montrer  $[\hat{H}, \hat{T}_i] = 0$ , il faut utiliser :

$$\hat{x}\hat{T}_i = \hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i) \quad (7.5)$$

Cela découle de  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ , et  $\hat{T}_i|x\rangle = |\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$ , obtenu en eq. (2.11). Ainsi pour tout état  $|x\rangle$ , on a  $\hat{x}\hat{T}_i|x\rangle = \hat{x}|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$ . Et de même  $\hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i)|x\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)\hat{T}_i|x\rangle = (\vec{x} + \vec{l}_i)|\vec{x} + \vec{l}_i\rangle$ . Donc  $\hat{x}\hat{T}_i = \hat{T}_i(\hat{x} + \vec{l}_i)$ . On déduit progressivement, que cela est aussi vrai pour toute fonction  $V(x)$ , (d'abord sur les monômes, puis polynômes,...) c'est à dire :

$$V(\hat{x})\hat{T}_i = \hat{T}_i V(\hat{x} + \vec{l}_i)$$

dans notre cas,  $V(\hat{x} + \vec{l}_i) = V(\hat{x})$ ; par ailleurs  $[\hat{T}_i, \hat{p}] = 0$  donc  $[\hat{H}, \hat{T}_i] = 0$ .

■.

Ensuite, d'après la propriété de base page 213, afin d'étudier le spectre en énergie de  $\hat{H}$ ,

**on cherche d'abord les vecteurs propres communs de  $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$ .**

Ces trois opérateurs sont unitaires, et donc leur valeurs propres sont des nombres complexes de module 1, que l'on peut donc écrire sous la forme  $e^{-i\varphi_k}$ ,  $k = 1, 2, 3$ .

En effet si  $\hat{T}_1|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ , alors  $|\psi\rangle = \hat{T}_1^{-1}\hat{T}_1|\psi\rangle = \hat{T}_1^+\hat{T}_1|\psi\rangle = \bar{\lambda}\lambda|\psi\rangle$ , donc  $|\lambda| = 1$ .

On note :

## 7.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

$$\hat{T}_k |\psi\rangle = e^{-i\varphi_k} |\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3$$

et l'espace de Hilbert des vecteurs propres communs de  $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$ , de valeur propre respectives  $(e^{-i\varphi_1}, e^{-i\varphi_2}, e^{-i\varphi_3})$  sera noté  $\mathcal{H}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ . C'est à dire

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \Leftrightarrow \hat{T}_k |\psi\rangle = e^{-i\varphi_k} |\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3$$

Cette dernière équation est équivalente à :

$$\psi(\vec{x} + \vec{l}_k) = e^{i\varphi_k} \psi(\vec{x}), \quad k = 1, 2, 3 \quad (7.6)$$

En effet, (voir aussi eq.2.9) :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x} - \vec{l}_1) &= \langle \vec{x} - \vec{l}_1 | \psi \rangle = \langle x | \hat{T}_1 | \psi \rangle = e^{-i\varphi_1} \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= e^{-i\varphi_1} \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Ainsi, à  $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \in [0, 2\pi]^3$  fixés, la fonction d'onde  $\psi$  est déterminée par sa valeur qu'elle prend dans une cellule du cristal, voir figure (7.2).

L'équation (7.6) est appelée **conditions de Bloch**, montrant que la fonction d'onde  $|\psi\rangle$  est périodique à une phase près.

Une telle fonction d'onde est appelée **onde de Bloch**.

### 7.2.2.1 Spectre en bandes

Pour  $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \in [0, 2\pi]^3$  fixés, c'est à dire dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}(\vec{\varphi})$ , il suffit ensuite de résoudre l'équation de Schrödinger

$$\hat{H} \psi_{\vec{\varphi}, n} = E_{\vec{\varphi}, n} \psi_{\vec{\varphi}, n} \quad (7.7)$$

La résolution de cette équation, donne pour  $\vec{\varphi}$  fixé, un spectre d'énergie discret :

$$E_{\vec{\varphi}, n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

et  $\psi_{\vec{\varphi}, n}$  est une fonction d'onde vérifiant les conditions de Bloch (7.6).

Noter que grâce à la périodicité, au lieu de résoudre l'équation de Schrödinger dans tout le cristal, on est ramené à la résoudre dans une cellule seulement. Si il n'y a pas de symétrie supplémentaire, on ne peut rien dire de plus. Le spectre est discret en effet car une cellule est compacte (comme un puits de potentiel). Voir argument de la figure 1.20. (Les conditions de périodicité peuvent s'interpréter en disant que grâce à la périodicité, l'espace de configuration est devenu un tore  $\mathbb{T}^3$ ).

À  $n$  fixé, et pour différent  $\vec{\varphi}$ , la valeur  $E_{\vec{\varphi}, n}$  parcourt un ensemble d'énergies appelée **bande d'énergie**. Chaque bande est indiquée par la valeur de  $n$ .

La figure 7.7, montre l'allure des bandes d'énergie ainsi obtenues.

Un intervalle d'énergie n'appartenant à aucune bande est appelé **bande interdite**.

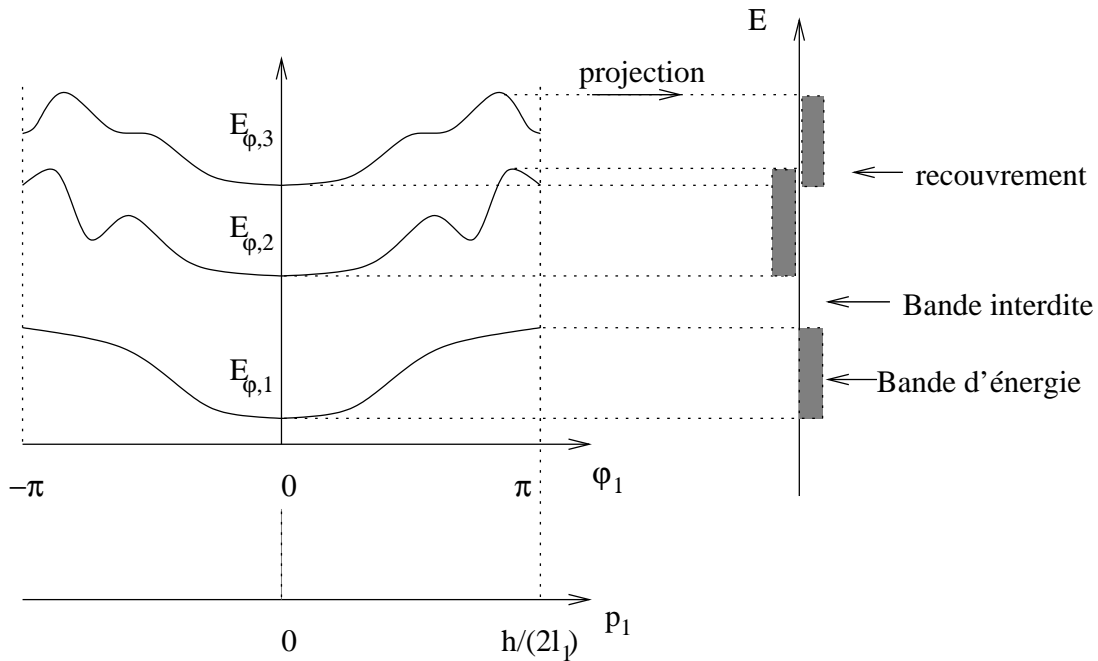


FIG. 7.7 – Allure du spectre d'énergie d'un électron dans un potentiel périodique. On a représenté seulement la dépendance en  $\varphi_1 \in [-\pi, \pi]$ .

**Remarque :** On définit le vecteur  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$  par :

$$\vec{p} \cdot \vec{l}_k = \hbar \varphi_k, \quad k = 1, 2, 3$$

Comme  $\vec{\varphi}$ , le vecteur  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$  représente aussi une phase. Si les vecteurs  $\vec{l}_k$  étaient orthonormés,  $\hbar \varphi_k$  serait les composantes de  $\vec{p}$  dans la base  $\vec{l}_k$ .

On peut écrire la fonction d'onde sous la forme :

$$\psi(\vec{x}) = e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} u_{\vec{p}}(\vec{x})$$

avec  $u_p(\vec{x})$  qui est périodique (périodicité du réseau et sans phase), car :

$$\begin{aligned} u_p(\vec{x} + \vec{l}_1) &= \psi(\vec{x} + \vec{l}_1) e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_1}{\hbar}} = \psi(\vec{x}) e^{i \varphi_1} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_1}{\hbar}} \\ &= u_p(\vec{x}) \end{aligned}$$

ainsi  $\psi(\vec{x})$  est comme une onde plane  $e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}}$ , modulée périodiquement par  $u_p(\vec{x})$ .

Pour ces raisons de forte similarité avec l'impulsion, le paramètre  $\vec{p}$  est appelée **la quasi-impulsion**.

**Remarques**

## 7.2. GROUPE DE SYMÉTRIE DYNAMIQUE COMMUTATIF : ÉLECTRON DANS UN POTENTIEL

– Eq 7.6 s'écrit aussi :

$$\hat{T}_k |\psi\rangle = \exp\left(-i \frac{\hat{\vec{p}} \cdot \vec{l}_k}{\hbar}\right) |\psi\rangle = \exp\left(-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{l}_k}{\hbar}\right) |\psi\rangle, \quad k = 1, 2, 3$$

montrant aussi l'analogie entre la quasi-impulsion  $\vec{p}$  et une impulsion.

- Noter aussi que si le cristal a une symétrie de parité @@, alors  $E_{-p,n} = E_{p,n}$ , qui se traduit par une symétrie des bandes.
- Près du minimum d'énergie d'une bande, on peut approximer  $E_n(\vec{p})$  par une parabole, et écrire :

$$E_n(p_1) = E_0 + \frac{p_1^2}{2m^*}$$

la coefficient  $m^*$  s'appelle **la masse effective** de l'électron. En effet un paquet d'onde électronique situé près du bas de la bande, aura les mêmes propriétés dynamiques qu'une particule libre de masse  $m^*$ .

- Par exemple dans le Germanium,  $m^* = 0,6 m_e$ .
- En fait, comme  $\vec{p}$  a trois composantes,  $m^*$  est un tenseur symétrique de rang 3.
- Près du maximum d'énergie d'une bande, on peut aussi approximer  $E_n(\vec{p})$  par une parabole, et écrire :

$$E_n(p_1) = E_0 - \frac{p_1^2}{2m_t^*}$$

la coefficient  $m_t^*$  s'appelle **la masse effective** des trous. (voir cours de physique du solide).

**Résumé** Il faut retenir le double aspect d'une onde de Bloch décrivant un électron dans un cristal :

- **nature d'électron libre** car étendu sur tout le cristal, comme une onde plane, et partie du spectre continu dans une bande.
- **nature d'électron lié** : car modulation de l'onde autour de chaque atome et caractère discret de l'indice de bande  $n$ .

En d'autres termes, le spectre d'énergie en bande a une partie discrète (l'indice  $n$ ), liée à des écarts d'énergie  $\Delta E$  grands, car reliés à la dynamique à une petite échelle de temps  $\tau$  au sein d'une cellule du cristal (relation d'incertitude  $\tau \Delta E \simeq \hbar$ ),

et une partie continue (indice  $\varphi$  ou  $p$ ) lié à la dynamique balistique à plus grande échelle de temps à travers le cristal.

En termes simples, l'aspect discret des différentes bandes est lié au détail du potentiel dans une cellule du cristal, alors que l'aspect continu des bandes est relié à l'invariance par translation des cellules dans le cristal.

**Manifestation physique de la structure en bandes** Comment expliquer que certains matériaux sont isolants comme le soufre, avec une résistivité :

$$\rho_{\text{soufre}} \simeq 10^{17} \Omega.cm$$

et que d'autres sont conducteurs comme le cuivre :

$$\rho_{\text{cuivre}} \simeq 1,7 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$$

et d'où vient une telle différence (23 ordres de grandeurs!) ?

Pour ces matériaux qui sont des cristaux, la structure en bandes d'énergies est essentielle pour expliquer l'existence de matériaux isolants et matériaux conducteurs. Il y a un grand nombre d'électrons dans un cristal, et ils sont soumis au principe d'exclusion de Pauli. Ainsi ces électrons occupent les états de plus basse énergie des bandes, à raison de un électron par état, voir figure 7.8.

Lorsque ces électrons remplissent entièrement certaines bandes (dites de valence) et laisse les suivantes complètement vides, cela donne un matériau isolant. En effet les électrons sont figés dans leur état quantique, et ne peuvent changer d'état car les états voisins sont déjà occupés. Il n'ont pas assez d'énergie pour atteindre la bande supérieure qui est vide. Ils peuvent cependant l'atteindre mais avec une probabilité  $\simeq \exp(-\Delta E/kT)$  où  $\Delta E$  est la largeur du gap. Noter que  $kT \simeq 1/40 \text{eV}$  à température ambiante, et que  $\Delta E$  peut atteindre plusieurs eV. Cela explique la très faible valeur de la conductivité des isolants.

Au contraire si la dernière bande (dites de conduction) est partiellement remplie, cela donne un matériau conducteur (conducteur du courant et de la chaleur), comme dans le cas du Sodium, figure 7.6, car il y a des états quantiques inoccupés près des électrons qui sont au seuil du remplissage. Le moindre champ électrique appliqué permet à ces électrons de changer d'état et de se déplacer, engendrant un courant électrique. (Voir cours de physique du solide).

Le spectre en bande d'un cristal est à l'origine de la technologie des 1/2 semi-conducteurs. (Voir cours de physique du solide).

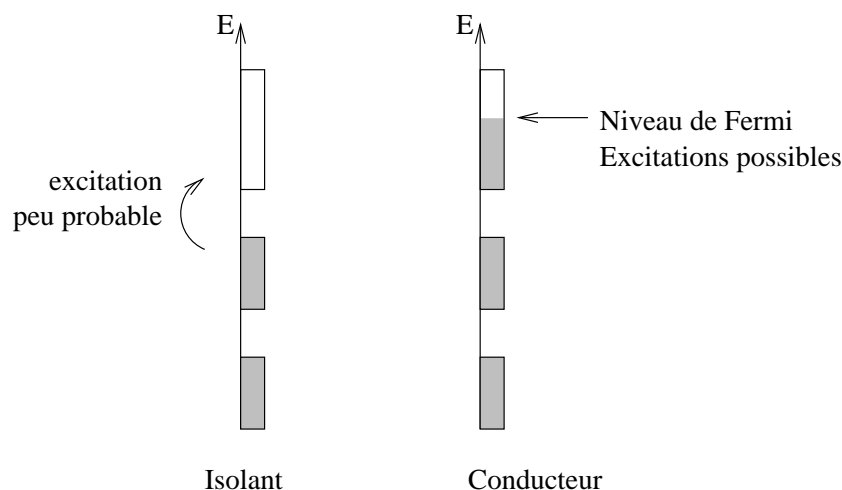


FIG. 7.8 – Schéma du remplissage des bandes, expliquant la différence isolant-conducteurs.

**Exercices :**

- déterminer la densité de niveaux dans certains cas @@.
- Problème sur le spectre de Hofstadter, voir examen novembre 2002.
- TD : Modèle de potentiel périodique avec faible couplages @@.

## 7.3 Groupe non commutatif : les rotations et le moment angulaire

Dans le paragraphe précédent nous avons vu comment utiliser une symétrie associée à un groupe commutatif, pour trouver le spectre de  $\hat{H}$ .

Dans ce paragraphe, on considère des problèmes qui ont une symétrie par rotation, comme c'est le cas pour un électron en orbite autour du proton dans l'atome d'hydrogène.

On va aussi appliquer les propriétés générales énoncées ci-dessus, mais comme nous l'avons vu en page 151, *le groupe des rotations est non commutatif, et cela apporte quelque chose de nouveau.*

Supposons donc que  $\hat{H}$  est invariant par rotations, ce qui se traduit par :

$$\left[ \hat{R}_{\vec{u}}(\alpha), \hat{H} \right] = 0, \quad \forall \vec{u}, \alpha \quad (7.8)$$

ou

$$\left[ \hat{R}_{\vec{u}}(\alpha), \hat{U}(t) \right] = 0, \quad \forall \vec{u}, \alpha$$

où  $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$  est l'opérateur de rotation d'un angle  $\alpha$ , autour de l'axe  $\vec{u}$ .

**Exemple** Un exemple simple et important est le cas d'une particule dans un potentiel central, cad ne dépendant que de la distance  $r$  à l'origine, et non de la direction :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r), \quad \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

C'est le cas par exemple pour l'atome d'hydrogène où  $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ , mais cela peut aussi concerner un électron libre dans une sphère métallique ( $V(r) = 0$  à l'intérieur, et  $V = \infty$  à l'extérieur).

### 7.3.1 Générateurs du groupe de rotation dans $\mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$

Réf : Sakurai p196.

Un système quantique général peut être composé de plusieurs particules ayant des degrés de liberté spatiaux et de spin.

Nous avons vu l'expression de l'opérateur rotation  $\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha)$  dans l'espace quantique du spin  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ . Ses générateurs ont été défini en eq.(153).

Intéressons nous maintenant à la partie spatiale, par exemple à une particule sans spin. Son état quantique est donc spécifié par sa fonction d'onde  $\psi \in \mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$ . On va chercher l'expression des opérateurs rotation et de ses générateurs.

La rotation de la fonction d'onde autour de l'axe  $z$  s'exprime en coordonnées sphériques  $(r, \theta, \varphi)$  par :

$$\psi'(r, \theta, \varphi) = \left( \hat{R}_z(\alpha) \psi \right)(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha)$$

voir figure 7.9.

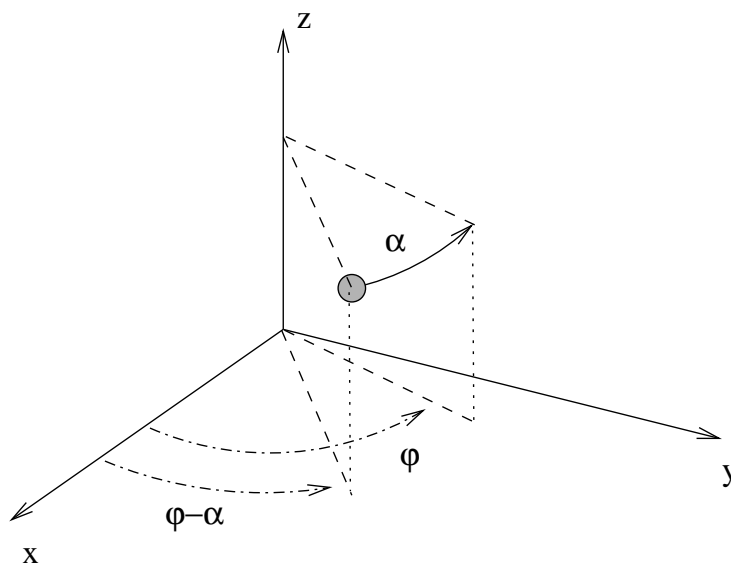


FIG. 7.9 – Rotation d'un angle  $\alpha$  autour de  $z$ , montrant que  $\psi'(r, \theta, \varphi) = \left( \hat{R}_z(\alpha) \psi \right)(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha)$ .

Or par définition du générateur  $\hat{L}_z$  on doit avoir :

$$\hat{R}_z(\alpha) = \exp\left(-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\alpha\right)$$

on peut trouver alors  $\hat{L}_z$  en dérivant par rapport à  $\alpha$  (et posant  $\alpha = 0$ ) :

$$\left(-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\psi\right) = -\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$

donnant :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

remarquer que ce résultat est analogue à  $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  obtenu figure 2.1, générateur des translations.

7.3.1.1 Écriture vectorielle indépendante des coordonnées

Propriété

les générateurs des rotations dans  $\mathcal{H}_{\text{espace}} = L^2(\mathbb{R}^3)$ , noté  $\hat{\vec{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$  est donné par :

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} x & -i\hbar\partial/\partial x \\ y & -i\hbar\partial/\partial y \\ z & -i\hbar\partial/\partial z \end{vmatrix} \wedge = \begin{cases} L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \\ L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases}$$

L'opérateur de rotation d'une fonction d'onde d'un angle  $\alpha$  autour de l'axe  $\vec{u}$  est donné par

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(-i\frac{\hat{\vec{L}} \cdot \vec{u}}{\hbar}\alpha\right)$$

**preuve :**

par le calcul, cf Cohen T. p666.

Preuve graphique : on aurait  $\hat{L}_z = (\hat{\vec{L}})_z = (\hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}})_z = \rho \cdot \hat{p}_\varphi$ , voir figure 7.10, avec  $\rho = r \sin \theta$ , et  $\hat{p}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{du}$ , et  $du = \rho d\varphi$ , donnant bien  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ . La relation valable pour l'axe  $z$  est en fait valable pour toute direction, car il n'y a pas de direction privilégiée.

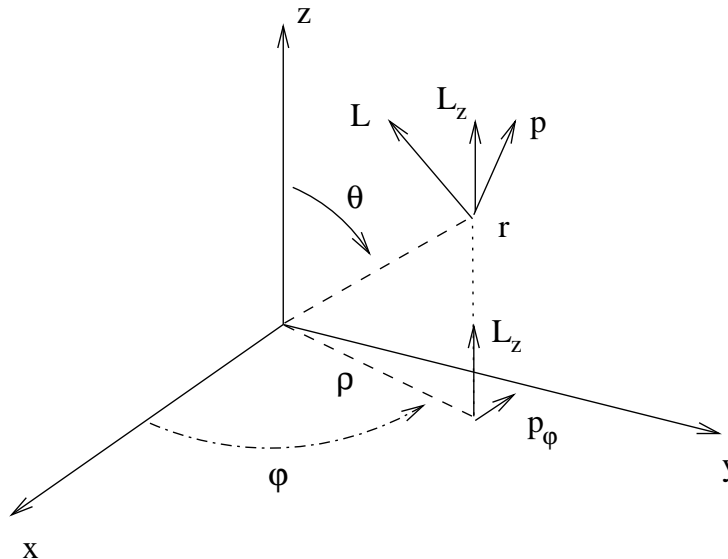


FIG. 7.10 –



**Remarques :**

- L'expression de  $\vec{L}$  est identique en mécanique classique.
- Pour une expression en coordonnées sphériques, voir Cohen [CBF] p.667. Cette expression montre comme attendu que la variable  $r$  n'intervient pas.
- Une rotation de  $2\pi$  d'une fonction d'onde la laisse inchangée, donc, (contrairement aux rotations du spin  $1/2$  dans l'espace  $\mathcal{H}_{spin}$ ), on a pour les rotations dans l'espace  $\mathbb{R}^3$  :

$$\hat{R}_{\vec{u}}(2\pi) = Id \quad (7.9)$$

Ici pour la rotation de la fonction d'onde spatiale, une rotation dans l'espace  $(x, y, z)$  est caractérisée par une matrice  $3 \times 3$ , Orthogonale, de déterminant 1 (dite Spéciale), il s'agit donc du groupe de matrices noté **SO(3)**, voir Sakurai p169.

Rappel : Le groupe de rotation du spin est identifié au groupe **SU(2)**, voir page 154, et vérifiait.  $\hat{R}_{\vec{u}}(2\pi) = -Id$ .

**7.3.1.2 Relations de commutations**

On a

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned}$$

**preuve (TD) :** ces relations ont déjà été calculées pour le groupe de rotation du spin, voir eq.4.8. Elle traduisent la non commutativité du groupe de rotation. Mais on peut les calculer à nouveau directement ici :

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= yp_x [p_z, z] + p_y x [z, p_z] \\ &= i\hbar (xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

car  $[z, p_z] = i\hbar$ .

**7.3.2 Moment angulaire total et conservation**

Considérons un système quelconque constitué de plusieurs particules ayant chacune un spin  $1/2$  ou non.

En général, il peut y avoir des interactions entre ces particules et des interactions entre le mouvement des particules et leur spin (en effet une particule chargée en mouvement crée

un champ  $\vec{B}$  qui agit sur le moment magnétique de spin), et aussi des interactions entre les spins, pour la même raison.

Cependant on suppose que le **système total est isolé**, et par conséquent qu'il est **invariant par une rotation globale du système**.

Voir figure 7.11. Dans cet exemple, l'espace de Hilbert total est (en supposant les particules discernables)

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{espace1} \otimes \mathcal{H}_{spin1} \otimes \mathcal{H}_{espace2} \otimes \mathcal{H}_{spin2}$$

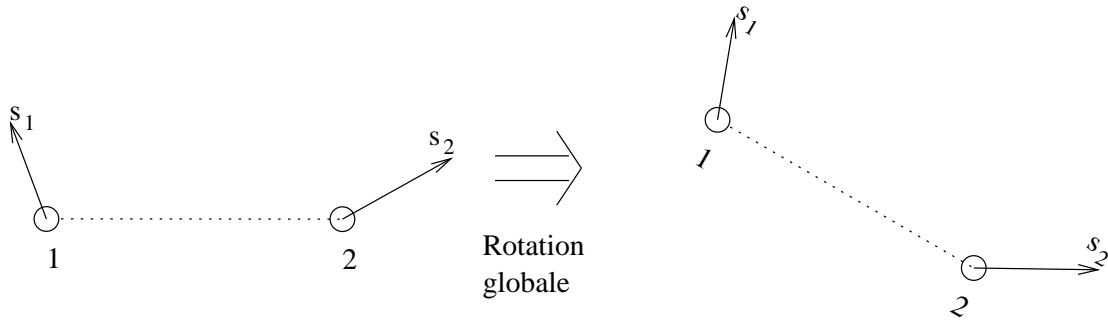


FIG. 7.11 – Une rotation globale s'applique sur la position et aussi le spin de chaque particule.

### 7.3.2.1 Exemples de termes d'interaction invariants par une rotation globale

Entre le mouvement d'une particule et un spin il peut y avoir le couplage dit "**spin-orbite**" :

$$\hat{H}_{spin-orbite} = A \vec{S}_1 \cdot \vec{L}_1$$

où  $A$  est une constante avec la bonne dimension.

Entre deux spins, il peut y avoir un couplage de type "**spin-spin**" :

$$\hat{H}_{spin-spin} = B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

### 7.3.2.2 Moment angulaire total

L'opérateur de rotation du système total d'un angle  $\alpha$  autour de l'axe  $\vec{u}$  est :

$$\begin{aligned} \hat{R}_{tot, \vec{u}}(\alpha) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_1 \cdot \vec{u} \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{S}_1 \cdot \vec{u} \alpha\right) \\ &\quad \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_2 \cdot \vec{u} \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{S}_2 \cdot \vec{u} \alpha\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{L}_{tot} \cdot \vec{u} \alpha\right) \end{aligned}$$

avec

$$\boxed{\hat{\vec{L}}_{tot} = \vec{L}_1 + \vec{S}_1 + \vec{L}_2 + \vec{S}_2 \quad : \text{moment angulaire total}}$$

Montrant que le **moment angulaire total est le générateur des rotation globales du système.**

Et d'après l'invariance par rotation globale du système, il commute avec  $\hat{H}$  :

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}_{tot}] = 0$$

La loi de conservation qui en découle est la conservation du moment angulaire total :

$$\langle \hat{\vec{L}}_{tot} \rangle (t) = \text{constante}/t$$

On a aussi la relation

$$\forall \vec{u}, \alpha, \quad [\hat{H}, \hat{R}_{tot, \vec{u}}(\alpha)] = 0,$$

qui s'interprète en disant que les **espaces propres de  $\hat{H}$  sont invariants par les rotations globales.**

### 7.3.3 Espace de représentation réductible et irréductible d'un groupe

En termes mathématiques, un espace vectoriel invariant par les transformations d'un groupe d'opérateurs, est appelé **espace de représentation du groupe.**

Par exemple, ci-dessus, les espaces propres de  $\hat{H}$  sont des espaces de représentation du groupe de rotation.

**Définition** *Un espace vectoriel  $\mathcal{H}$  qui est espace de représentation d'un groupe est dit **réductible** si il se décompose :*

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$$

*où  $\mathcal{H}_1$  et  $\mathcal{H}_2$  sont des espaces invariants par le groupe.*

*Sinon, on dit que  $\mathcal{H}$  est un espace de représentation **irréductible** du groupe.*

Pour illustrer simplement cette notion, considérons le groupe de rotation autour de l'axe  $z$ , qui agit dans l'espace (de représentation)  $\mathbb{R}^3$ . On observe que le plan  $(x, y)$  est invariant et de même pour l'axe  $z$  seul. Ainsi pour ce groupe de rotation, l'espace  $\mathbb{R}^3$  est réductible :

$$\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}_{plan\,x,y}^2 \oplus \mathbb{R}_{axe\,z}$$

Mais le plan  $(x, y)$  et l'axe  $z$  sont eux irréductibles. Voir figure 7.12.

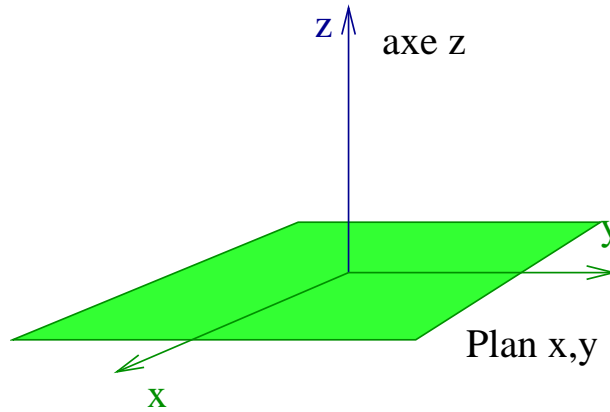


FIG. 7.12 –

Nous allons voir dans la suite que cette notion d'espace irréductible est très importante : nous allons montrer que les espaces propres d'énergie d'un Hamiltonien invariant par rotation sont des espaces de représentation irréductible dans le cas général.

Mais avant cela, nous allons caractériser précisément ces espaces de représentation irréductibles.

#### 7.3.4 Espaces de représentation irréductibles des groupes de rotation $SU(2)$ et $SO(3)$

cf Sakurai [J.J85] p. 188, Cohen [CBF] p. 653.

(Ce paragraphe est un peu technique. On aura besoin de ses résultats dans la suite.)

On s'intéresse ici à des opérateurs de rotations qui agissent dans un espace de Hilbert donné  $\mathcal{H}$ . On s'intéresse d'abord aux générateurs des rotations agissant dans cet espace.

**Propriété** Soient des opérateurs  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ , vérifiant l'algèbre de Lie du groupe de rotation :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \text{etc...}$$

alors les deux opérateurs suivant commutent :

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

et le spectre commun des opérateurs  $\hat{J}_z$  et  $\hat{J}^2$  est

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \quad (7.10)$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad (7.11)$$

ou  $j$  est entier ou demi-entier ( $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ ) et

$$m = -j, -j+1, \dots, +j \quad : \text{ prend } (2j+1) \text{ valeurs}$$

A  $j$  fixé, les vecteurs  $|j, m\rangle$  forment donc une base orthonormée d'un espace noté  $\mathcal{H}_j$ , de dimension  $(2j+1)$ .

On a les opérateurs d'échelle

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

(noter que  $(\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$ ), vérifiant :

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$$

et :

$$\hat{J}_+|j, m\rangle = [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} \hbar|j, m+1\rangle$$

$$\hat{J}_-|j, m\rangle = [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \hbar|j, m-1\rangle$$

Voir figure 7.13.

$\mathcal{H}_j$  est un espace de représentation **irréductible** du groupe de rotation.

Tout espace de représentation du groupe des rotations peut se décomposer comme la somme d'espaces irréductibles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2} \oplus \dots$$

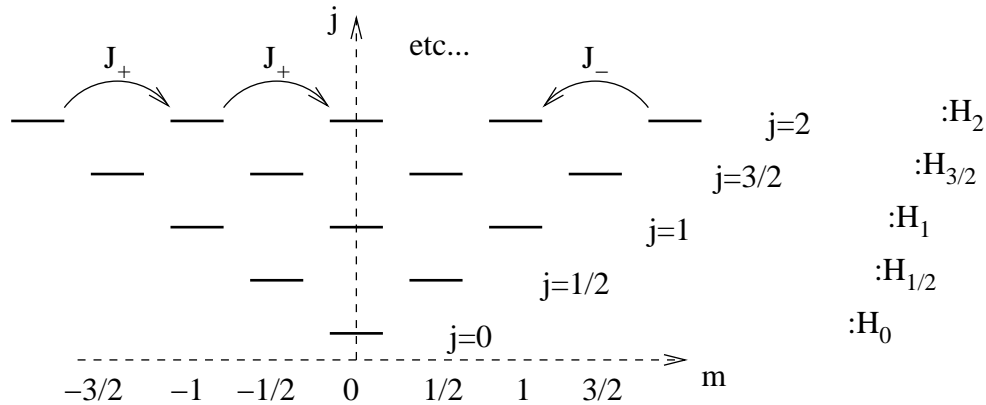


FIG. 7.13 – Schéma des vecteurs propres communs de  $\hat{J}_z$  et  $\hat{J}^2$ , notés  $|j, m\rangle$ , et action des opérateurs d'échelle  $\hat{J}_\pm$ . Les vecteurs  $|j, m\rangle$  de la ligne  $j$ , avec  $m = -j \rightarrow +j$ , forment une base de l'espace  $\mathcal{H}_j$ .

**preuve (TD) :** Noter que la situation est très similaire au spectre de l'oscillateur Harmonique, avec les opérateurs  $a, a^+, \hat{N}$ , voir page 78. La preuve est aussi similaire. Comme  $\vec{J}^2$  et  $\vec{J}_z$  commutent, ils possèdent une base de vecteurs propres communs. Notons  $|a, m\rangle$  un vecteur propre commun des opérateurs  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  :

$$\begin{aligned}\hat{J}^2|a, m\rangle &= \hbar^2 a|a, m\rangle \\ \hat{J}_z|a, m\rangle &= \hbar m|a, m\rangle\end{aligned}$$

Noter que

$$\begin{aligned}[J_+, J_-] &= \left[ (\hat{J}_x + i\hat{J}_y), (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \right] \\ &= -i [\hat{J}_x, \hat{J}_y] + i [\hat{J}_y, \hat{J}_x] = 2\hbar\hat{J}_z\end{aligned}$$

et

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_y \pm i(-i\hbar\hat{J}_x) = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

et

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$$

Remarque : Les trois générateurs  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  forment une base de l'algèbre de Lie (espace vectoriel de dimension trois), dite algèbre de Lie  $so(3)$  ou  $su(2)$ . Les trois générateurs  $\hat{J}_z, \hat{J}_+, \hat{J}_-$  forment une autre base de cette même algèbre, qui est plus intéressante, pour les relations de commutations. Cette base s'appelle la **décomposition de Cartan** de l'algèbre  $su(2)$ .

On a :

$$\begin{aligned}\hat{J}_z (\hat{J}_\pm|a, m\rangle) &= (\pm\hbar\hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm\hat{J}_z)|a, m\rangle \\ &= \hbar(\pm 1 + m) (\hat{J}_\pm|a, m\rangle)\end{aligned}$$

et

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_\pm|a, m\rangle) = \hat{J}_\pm\hat{J}^2|a, m\rangle = \hbar^2 a (\hat{J}_\pm|a, m\rangle)$$

donc on pose :

$$|a, m' = m \pm 1 \rangle = \frac{1}{c_{\pm}} (\hat{J}_{\pm} |a, m \rangle)$$

où  $c_{\pm}$  est une constante réelle positive, de normalisation, à déterminer.

Ainsi à partir du vecteur  $|a, m \rangle$ , on construit un vecteur  $|a, m \pm 1 \rangle$ , etc.... Cette construction s'arrête lorsque le vecteur  $(\hat{J}_{\pm} |a, m \rangle)$  est nul.

On a

$$\begin{aligned} a - m^2 &= \langle a, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | a, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle a, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ | a, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( \|\hat{J}_- |a, m \rangle\|^2 + \|\hat{J}_+ |a, m \rangle\|^2 \right) \geq 0 \end{aligned}$$

(on a utilisé  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_z^2$ )

donc

$$a \geq m^2$$

donc la construction ci-dessus s'arrête forcément à disons  $m_{min} \leq m \leq m_{max}$ , c'est à dire :

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |a, m_{max} \rangle &= 0, \\ \hat{J}_- |a, m_{min} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

et  $m_{max}$  et  $m_{min}$  sont séparés par un entier :

$$m_{max} = m_{min} + n, \quad n \in \mathbb{N}$$

On a

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) \\ &= \hat{J}_z^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_z \\ &= \hat{J}_z^2 + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_z \end{aligned}$$

, donc appliqué à  $|a, m_{max} \rangle$  et  $|a, m_{min} \rangle$  on obtient :

$$\begin{aligned} a &= m_{max}^2 + m_{max} \\ a &= m_{min}^2 + m_{min} \end{aligned}$$

donnant :

$$\begin{aligned} (m_{min} + n)^2 + (m_{min} + n) &= m_{min}^2 + m_{min} \\ \Leftrightarrow n^2 + 2n m_{min} + m_{min} + n + m_{min} &= 0 \\ \Leftrightarrow n(n + 1) + 2m_{min} (n + 1) &= 0 \\ \Leftrightarrow m_{min} &= -\frac{n}{2} \end{aligned}$$

Donc  $m_{max} = m_{min} + n = \frac{n}{2}$ , et on pose

$$j = m_{max} = \frac{n}{2} : \text{ entier ou demi - entier}$$

alors

$$a = j(j + 1)$$

et

$$m = -j, \dots, +j : (2j + 1) \text{ valeurs}$$

Normalisation, choix de  $c_{\pm}$  :

si  $|j, m\rangle$  est normalisé, on a

$$\begin{aligned} |c_{+,jm}|^2 \| |j, m + 1\rangle \|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 (j(j + 1) - m(m + 1)) \end{aligned}$$

et de même pour  $c_-$ .

D'après ci-dessus, chaque espace  $\mathcal{H}_j$  est de dimension  $(2j + 1)$ , et les opérateurs  $\hat{J}_{\pm}, \hat{J}_z$  agissent à l'intérieur de chaque espace  $\mathcal{H}_j$ . Il en est de même par conséquence, pour les opérateurs  $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$  qui s'obtiennent par combinaisons linéaires, et pour les opérateurs de rotation  $\hat{R}_x(\alpha) = \exp(-i\hat{J}_x\alpha/\hbar), \hat{R}_y, \hat{R}_z$ . Donc chaque espace  $\mathcal{H}_j$  est invariant par le groupe de rotation : c'est un , ou espace de représentation du groupe de rotation. Chaque espace  $\mathcal{H}_j$  ne peut se décomposer en somme de deux espaces invariants par le groupe de rotation (i.e.  $\mathcal{H}_j \neq \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ , avec  $\mathcal{H}_1$  et  $\mathcal{H}_2$  invariants). On le devine en effet, car à partir de tout vecteur  $|j, m\rangle$ , on peut obtenir  $|j, m'\rangle$  par actions répétées de  $\hat{J}_{\pm}$ . Donc  $\mathcal{H}_j$  est un espace de représentation irréductible du groupe de rotation.

■

**Représentations irréductibles des groupes de rotation SO(3) (Rotation de l'espace) et SU(2) (Rotation du spin).** On a

$$\begin{aligned} \hat{R}_z(2\pi) |j, m\rangle &= \exp\left(-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}2\pi\right) |j, m\rangle = \exp(-im2\pi) |j, m\rangle \\ &= \begin{cases} |j, m\rangle & \text{si } m \text{ entier} \\ -|j, m\rangle & \text{si } m \text{ demi - entier} \end{cases} \end{aligned}$$

par conséquent :

- Pour **le groupe de rotation SO(3)**, il faut que  $\hat{R}(2\pi) = \hat{I}$ , (voir 7.9), et donc il faut que  $j$  (et donc  $m$ ) soit entier. Dans ce cas, on note :

$$l = j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Les espaces de représentations irréductibles du groupe SO(3) sont donc  $\mathcal{H}_l$  caractérisées par l'entier  $l$ .

Noter que  $\mathcal{H}_l$  est de dimension impaire  $(2l + 1)$ .

- Pour **le groupe de rotation du spin 1/2 (groupe  $SU(2)$ )**, il faut que  $\hat{R}(4\pi) = Id$ , et donc toutes les valeurs de  $j$  sont permises :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2 \dots$$

Les espaces de représentations irréductibles du groupe  $SU(2)$  sont donc  $\mathcal{H}_j$ , caractérisés par l'entier ou demi-entier  $j$ .

### Remarques

- De la relation  $[\vec{J}^2, \vec{J}] = 0$ , on déduit que  $[\vec{J}^2, \hat{R}] = 0$  pour tout opérateur de rotation  $\hat{R}_{\vec{u}, \theta} = \exp(-i\vec{J} \cdot \vec{u}\theta/\hbar)$ . On dit alors que  $\vec{J}^2$  est **un opérateur de Casimir** du groupe de rotation. Il en résulte que les espaces de représentations irréductibles  $\mathcal{H}_j$  sont des espaces propres de  $\vec{J}^2$  (voir page 213), comme le montre la relation (7.10) : la valeur propre associée est  $\hbar^2 j(j+1)$ . Les espaces irréductibles  $\mathcal{H}_j$  sont donc caractérisés (et classifiés) par la valeur propre  $\hbar^2 j(j+1)$  de  $\vec{J}^2$  (directement relié à l'indice  $j$ ). C'est le grand intérêt des opérateurs de Casimir. Cela se généralise pour d'autres groupes. Voir par exemple page 262, pour le groupe de Poincaré en relativité.
- Les vecteurs  $|j, m\rangle$ ,  $m = -j, \dots, +j$  forment une base de l'espace  $\mathcal{H}_j$ . Ces vecteurs sont vecteurs propres de  $\hat{J}_z$ , et le choix de cette base dépend donc du choix de l'axe  $z$ .

### Exemples déjà rencontrés d'espaces irréductibles $\mathcal{H}_j$

1. **Pour décrire le spin 1/2**, l'espace  $\mathcal{H}_{spin}$  de dimension 2 et les opérateurs  $\hat{S}$  introduit à la section 4.3, s'identifie avec l'espace  $\mathcal{H}_{1/2}$  pour  $j = 1/2$ , et aux opérateurs  $\hat{J}$  introduits ici.
2. **L'espace ordinaire  $\mathbb{R}^3$**  est naturellement un espace de représentation irréductible du groupe de rotation  $SO(3)$ . On devine alors que  $\mathbb{R}^3$  **s'identifie à l'espace  $\mathcal{H}_{l=1}$** . Il reste à identifier les 3 vecteurs de base  $|l=1, m=-1, 0, +1\rangle$ , dans ce cas, à partir des 3 vecteurs de base de  $\mathbb{R}^3$ , notés  $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ .
  - (a) Première étape : on se permet de considérer des vecteurs à composantes complexes, comme  $|V\rangle = \alpha|x\rangle + \beta|y\rangle + \gamma|z\rangle$ ,  $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$ . On considère donc  $\mathbb{C}^3$  (l'**espace complexifié** de  $\mathbb{R}^3$ ).
  - (b) D'après l'étude des harmoniques sphériques, faite plus loin, voir tableau (7.3.6.4), il apparaît que

$$|l=1, m=1\rangle = Y_{1,1} \propto \sin\theta e^{i\varphi} \propto |x\rangle + i|y\rangle \quad (7.12)$$

$$|l=1, m=0\rangle = Y_{1,0} \propto \cos\theta \propto |z\rangle$$

$$|l=1, m=-1\rangle = Y_{1,-1} \propto \sin\theta e^{-i\varphi} \propto |x\rangle - i|y\rangle$$

(De façon plus précise, il faudrait dire que  $\mathcal{H}_{l=1}$  s'identifie à l'espace des fonctions linéaires sur  $\mathbb{R}^3$ , qui est l'espace dual de  $\mathbb{R}^3$ ).

### 7.3.5 Espace de représentation irréductible d'un groupe commutatif

**Propriété :** Pour un groupe commutatif, les espaces de représentations irréductibles sont de dimension 1.

**Preuve :** Si les opérateurs de groupes  $\hat{G}_1, \hat{G}_2 \dots$  (ou générateurs d'un groupe commutatif) vérifient  $[\hat{G}_i, \hat{G}_j] = 0$ , alors les vecteurs propres communs (qui existent et forment une base d'après page 213) sont une décomposition de l'espace total en espaces de dimension 1.

L'aspect non commutatif du groupe de rotation étudié page 151, joue donc un rôle important, car il permet aux espaces  $\mathcal{H}_j$  d'avoir une dimension supérieure à 1.

### 7.3.6 Application : calcul du spectre du rotateur rigide

Nous avons dit plus tôt que grâce aux symétries d'un problème, ici l'invariance par rotation, il était plus aisé de calculer le spectre d'énergie.

Prenons dans ce paragraphe, l'exemple d'une *molécule diatomique rigide, ou rotateur rigide*. (On ignore ici les mouvements de vibrations de la molécule car on considère qu'ils sont trop rigides). Seul le mouvement de rotation de la molécule est considéré.

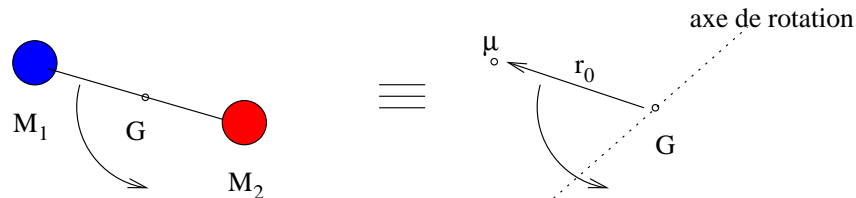


FIG. 7.14 – Schéma d'une molécule diatomique rigide, et de l'équivalence par une masse réduite  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ . Le mouvement de la particule réduite est sur une sphère de rayon  $r_0 = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

(ref Bransden p272, Cohen p720).

#### 7.3.6.1 L'espace de Hilbert des états quantiques

Le mouvement de la particule réduite est sur la sphère  $S^2$ , voir figure (7.14), et l'espace quantique de Hilbert est donc

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

constitué par les fonctions d'onde  $\psi(\theta, \varphi)$  dépendant d'un point  $(\theta, \varphi)$  sur la sphère. La sphère est en effet **l'espace de configuration**.

On note par :

$$|\theta, \varphi \rangle$$

la “fonction d’onde” de position (distribution de Dirac) localisée au point  $(\theta, \varphi)$ .

La relation de fermeture en position (sur la sphère) s’écrit alors :

$$\hat{I} = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\varphi |\theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi| \quad (7.13)$$

(Noter que  $d\Omega = d\theta \sin(\theta) d\varphi$  est l’élément d’angle solide).

### 7.3.6.2 L’opérateur Hamiltonien

Classiquement l’énergie (cinétique) de la molécule est

$$H = \frac{1}{2}\mu v^2 = \frac{1}{2}\mu r_0^2 \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

avec le moment d’inertie  $I = \mu r_0^2$ , et le moment angulaire  $L = r_0 p = r_0 \mu v_0 = r_0 \mu r_0 \omega = I\omega$ .

Nous considérons donc l’opérateur Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

où

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Nous cherchons le spectre d’énergie discret de  $\hat{H}$ .

### 7.3.6.3 Spectre de $\hat{H}$

(cf Cohen p725).

On a  $[\hat{H}, \hat{L}_x] = 0$ ,  $[\hat{H}, \hat{L}_y] = 0$ ,  $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ , mais  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z \neq 0$ , donc on ne peut pas chercher les vecteurs propres communs de  $L_x$  et  $L_y$ .

Par contre  $[L^2, L_z] = 0$  donc  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$  sont trois opérateurs qui commutent entre eux. On peut donc appliquer la propriété page 213, et s’intéresser aux vecteurs propres communs de  $\hat{L}^2$  et  $L_z$ .

Il s’agit ici du groupe  $SO(3)$ , et ces vecteurs propres communs, sont justement donnés par la propriété page 7.3.4, avec  $l = j$ . Ces vecteurs sont notés :

$$|l, m \rangle, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, +l$$

et appelés **Harmoniques sphériques**.

On obtient ainsi le spectre du rotateur rigide :

$$\begin{aligned} \hat{H}|l, m \rangle &= E_l |l, m \rangle, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, \dots, +l \\ E_l &= \frac{1}{2I} \hbar^2 l(l+1) \end{aligned}$$

L'écart entre niveaux est donc de l'ordre

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2I} = 1,3 \cdot 10^{-3} eV$$

La valeur numérique est donnée pour la molécule HCl, montrant que les écarts correspondent à des transitions dans l'infra-rouge.

Voir figure 7.15.

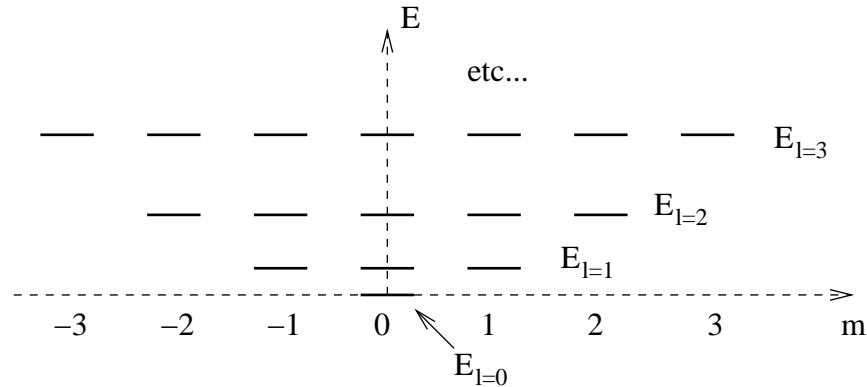


FIG. 7.15 – Spectre  $E_l = \frac{1}{2I} \hbar^2 l(l+1)$  du rotateur rigide.

### Remarques

- Comme attendu dans le cas général, (figure 7.1), chaque espace propre d'énergie  $E$ , est un espace invariant par le groupe de rotation, ici  $\mathcal{H}_l$ .
- Le fait que le groupe de rotation soit non commutatif permet que les espaces de représentations irréductibles soient de dimension supérieure à 1, et donc que les espaces propres soient de dimension supérieure à 1.  
Ainsi la dégénérescence du spectre du rotateur rigide est d'une part due à *la symétrie par rotation*, et d'autre part due à *la non commutativité des rotations*. (On verra la propriété générale ci-dessous, page 244).
- Voir les conséquences expérimentales observables du spectre du rotateur rigide, cf Cohen p728. (TD?)

#### 7.3.6.4 Les Harmoniques sphériques

cf Cohen T. p668.

Il nous reste à déterminer la fonction d'onde de chaque état stationnaire harmonique sphérique  $|l, m\rangle$ .

La fonction d'onde de l'harmonique sphérique  $|l, m\rangle$  est notée :

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

Leurs propriétés découlent directement de l'étude générale des vecteurs  $|j, m\rangle$ , faite page 7.3.4 :

### Propriétés

- La relation de fermeture (7.13), donne la relation de normalisation :

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\varphi |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

- On a (Bransden p265)

$$Y_{l,m=l}(\theta, \varphi) = (-1)^l \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} \right]^{1/2} \sin^l(\theta) e^{il\varphi}$$

en effet, on vérifie :  $\hat{L}_z Y_{l,l} = \hbar l Y_{l,l}$  et  $\hat{L}_+ Y_{l,l} = 0$ .

- L'expression analytique des autres fonctions  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  s'obtient par application de l'opérateur  $\hat{L}_-$  sur  $Y_{l,l}$ . Voir tableau, et figure 7.16.

l	m	Harmonique sphérique $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$
0	0	$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
1	0	$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$
	$\pm 1$	$Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$
	$\pm 1$	$Y_{2,\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi}$
	$\pm 2$	$Y_{2,\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$

Les fonctions  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  forment bien une base de l'espace de Hilbert  $L^2(S^2)$ , car ce sont les vecteurs propres communs de  $\hat{L}^2$  et  $L_z$ .

### 7.3.6.5 Parité des harmoniques sphériques

remarquons ici une symétrie que possède les harmoniques sphériques  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  par rapport à la transformation par **parité** ou par **inversion** :

$$\mathcal{P} : \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2 \longmapsto (-\vec{x}) \quad : \text{parité (ou inversion)}$$

correspondant au groupe  $\mathbb{Z}_2 = \{I, -I\}$ .

En coordonnées sphériques, si  $\vec{x} \equiv (r, \theta, \varphi)$ , alors  $(-\vec{x}) \equiv (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$ . On a donc

$$(\mathcal{P}Y_{lm})(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (7.14)$$

(pour la dernière égalité, voir [BC89] p.265, par exemple). Donc  $Y_{lm}$  est de **parité**  $(-1)^l$  (**paire** ssi  $l$  est **paire**) .

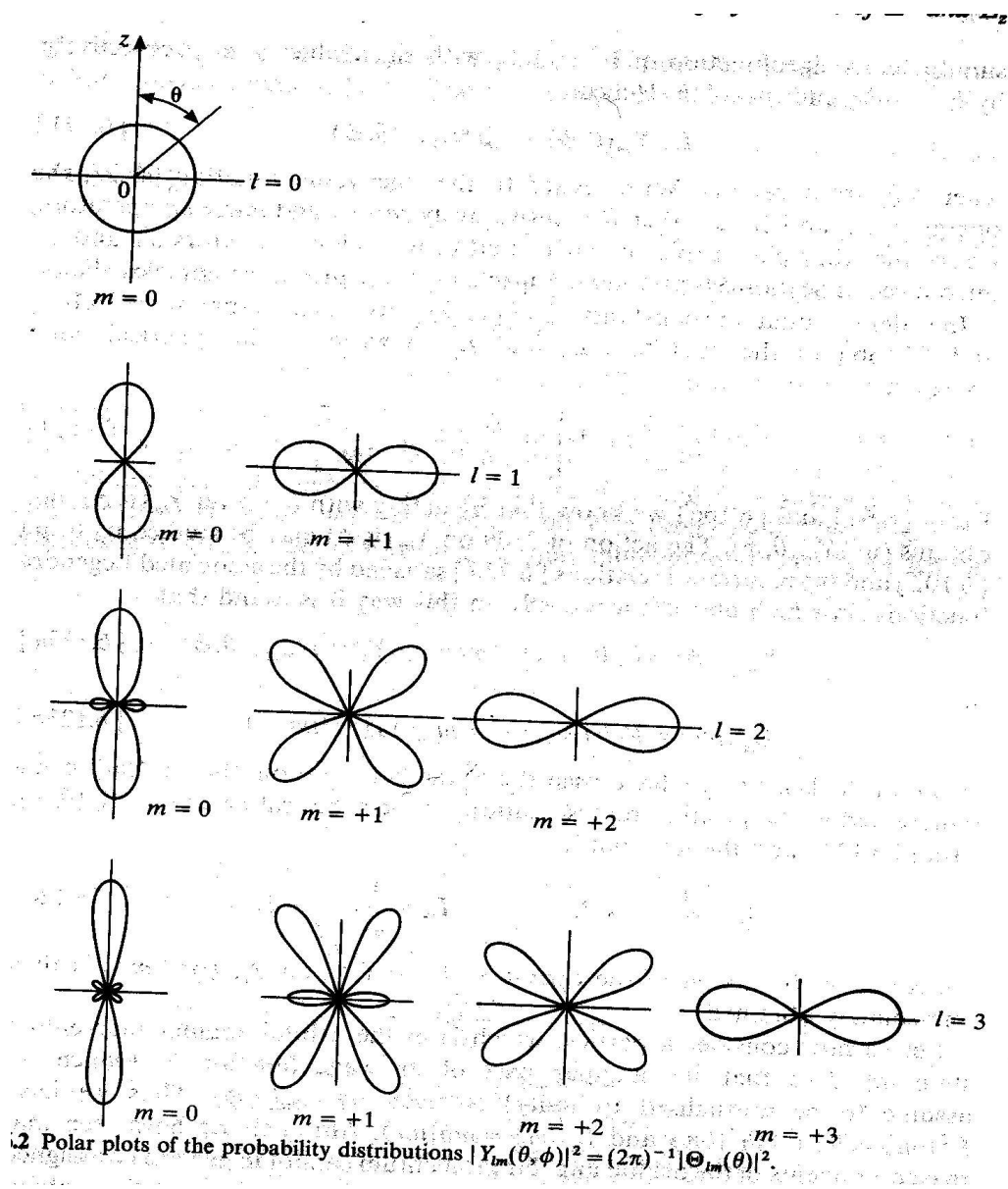


FIG. 7.16 – Dessin en polaire des distributions de probabilités  $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ .

## 7.4 Importance des représentations irréductibles en physique

Il ressort des études précédentes, une propriété générale très utile dans l'étude des spectres d'énergie des systèmes quantiques :

### 7.4.1 Propriété fondamentale : le théorème de Wigner

**Théorème de Wigner :** (Voir [HB], chap. 7)

*Si le Hamiltonien  $\hat{H}$  a un spectre discret, et **admet une symétrie par un groupe d'invariance dynamique  $G$  discret ou continu, cad si***

$$[\hat{H}, \hat{G}] = 0, \quad \forall \hat{G} \in G$$

*alors génériquement (c'est à dire résultat stable par toute perturbation respectant cette symétrie) , **les espaces propres de  $\hat{H}$  sont des représentations irréductibles de  $G$ .***

*En particulier, si le groupe  $G$  est commutatif, ses représentations irréductibles sont de dimension 1 (page 239), et on s'attend à aucune dégénérescence (générique) dans le spectre, i.e. les niveaux d'énergie sont tous différents.*

*Si le groupe  $G$  est non commutatif, il admet des représentation irréductibles de dimension  $d \geq 1$ , et **on s'attend à des dégénérescences dans le spectre, de multiplicité  $d$ .** (i.e. différents états de même énergie).*

**Idée de la Preuve** On a déjà montré que les espaces propres de  $\hat{H}$  sont des espaces représentation du groupe  $\hat{G}$ . Considérons un tel espace propre. Si il est réductible, il se décompose comme somme d'espaces de repr. irréductibles, et il est aisé d'imaginer une perturbation de  $\hat{H}$  respectant la symétrie, mais qui couple ces différents espaces. Ainsi l'opérateur perturbé respecte toujours la symétrie, mais ses espaces propres sont des espaces de représentations irréductibles qui ont des énergies (valeurs propres) différentes.

#### Remarques et commentaires

- La propriété montre que “sauf cas exceptionnel”, **une dégénérescence dans un spectre traduit la présence d'une symétrie**, et plus précisément la présence d'un groupe de symétrie non commutatif.
- Cette propriété est très utile en physique moléculaire par exemple, car connaissant les représentations irréductibles des différents groupes (il y a 230 groupes finis de l'espace tous catalogués et observés dans la nature, voir [Ste94] page 41), et observant le spectre d'une molécule, on déduit le groupe d'invariance, et ainsi on peut déduire

la forme géométrique de la molécule :

**Spectre**  $\Rightarrow$  **Groupe de symétrie**  $\Rightarrow$  **Forme de la molécule**

Cela montre l'importance des représentations irréductibles de groupes en physique.

- Dans l'énoncé de la propriété, le terme **générique** signifie "sauf exceptions". (Il a un sens mathématique précis, en terme de mesures).

Si l'espace propre d'énergie est réductible, cela signifierait que l'on a mal identifié le groupe de symétrie. Il y aurait une symétrie supplémentaire oubliée, et donc un groupe  $G'$  plus important pour lequel l'espace propre est bien irréductible.

C'est le cas du spectre de l'atome Hydrogène par exemple, cf ci-dessous.

Si on est dans un tel cas, et si l'on rajoute une perturbation à  $\hat{H}$  qui préserve seulement la symétrie de  $G$ , alors la symétrie supplémentaire serait brisée, et le gros espace propre se décomposerait en espaces irréductibles de  $G$ , d'énergies différentes, conformément à la propriété ci-dessus. C'est le cas des corrections relativistes dans le spectre de l'atome H.

- **Exemple du double puits symétrique à 1D** : il y a l'invariance par parité qui est un groupe commutatif. Le spectre est bien non dégénéré.
- **Exemple d'une particule dans un potentiel périodique**. Le groupe de symétrie est celui des translations. Dans ce cas le spectre en bandes a des dégénérescences mais qui sont dues à l'aspect continu du spectre. La propriété ci-dessus où l'on a supposé spectre de  $\hat{H}$  discret, ne s'applique plus.

## 7.4.2 Exemple : Spectre de l'atome d'hydrogène

Pour illustrer la propriété générale précédente, considérons le cas très connu de l'atome d'hydrogène.

### 7.4.2.1 Rappels du spectre :

Le Hamiltonien décrivant la dynamique de l'atome H (particule réduite) est

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{r}|} \quad (7.15)$$

(Dans ce paragraphe on ne parle pas du spin 1/2 des protons et électrons.)

Il y a invariance par rotation, se traduisant par  $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ . On calcule que le spectre de  $\hat{H}$  est :

$$\hat{H}|\psi_{n,l,m}\rangle = E_n|\psi_{n,l,m}\rangle$$

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, +l$$

avec les vecteurs propres qui sont produit d'une harmonique sphérique et d'une fonction radiale :

$$\langle \vec{x} | \psi_{n,l,m} \rangle = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

et les niveaux énergies :

$$E_n = -\frac{\varepsilon_1}{n^2} \quad (7.16)$$

avec

$$\varepsilon_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV.}$$

On remarque que l'espace propre de chaque niveau d'énergie est

$$\mathcal{H}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \mathcal{H}_l$$

Cet espace est dimension  $n^2$ .

Ce n'est pas un espace de représentation irréductible du groupe de rotation, puisqu'il se décompose en espaces irréductibles  $\mathcal{H}_l$ .

Voir figure 7.17.

#### 7.4.2.2 Symétrie supplémentaire de Pauli, et dégénérescence en $l$

( Voir [Ste94] p.244.)

La situation semble contredire le théorème de Wigner.

En fait non, due à la forme particulière du potentiel central en  $1/r$ , il y a une symétrie supplémentaire, (découverte par Pauli en 1925), dont le générateur est :

$$\hat{A} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} \wedge \hat{L} - \hat{L} \wedge \hat{p} \right) - mK \frac{\hat{x}}{|\vec{x}|}$$

appelé **vecteur de Runge et Lenz**, (où  $K = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ )

On peut vérifier que

$$\left[ \hat{A}, \hat{H} \right] = 0$$

et que le groupe de symétrie est maintenant  $SU(2) \times SU(2)$ , et que chaque espace propre  $\mathcal{H}_E$  est irréductible pour cette symétrie.

(en particulier on obtient ainsi directement les niveaux d'énergie (7.16)).

(Cette symétrie est aussi vraie en mécanique classique dans le problème de Kepler, avec le potentiel gravitationnel en  $1/r$  entre deux corps, et est relié au fait que les orbites de Kepler sont fermées, ce qui n'est pas vrai en général pour un potentiel central).

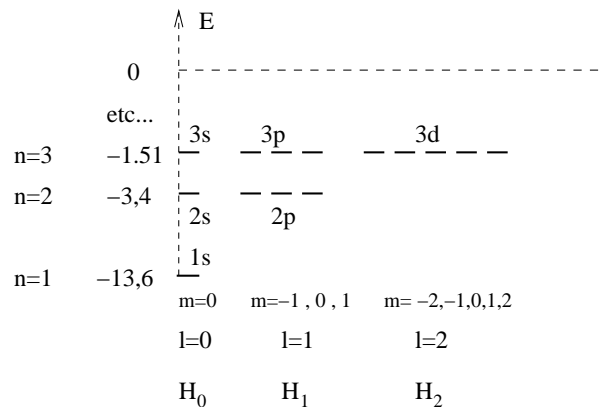


FIG. 7.17 – Spectre de l'atome H.

### 7.4.2.3 Exemple de la correction relativiste, brisant cette symétrie.

La symétrie particulière de Runge et Lenz ci-dessus, est brisée par la moindre perturbation, qui tout en gardant l'invariance par rotation du problème modifie la forme particulière du Hamiltonien eq.(7.15).

Considérons par exemple la correction relativiste. En relativité,  $(\frac{E}{c})^2 - \vec{p}^2 = (mc)^2$ , donnant  $E = mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc}\right)^2} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + o(p^4)$ . (on a utilisé  $(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1)x^2 + o(x^2)$ .)

En régime faiblement relativiste, l'énergie cinétique  $p^2/2m$  a donc un terme correctif :

$$H'_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}$$

Les niveaux d'énergie  $E_n$ , eq. (7.16) sont alors modifiés de  $\Delta E$  qui se calcule en théorie des perturbations. On obtient :

$$\Delta E = -E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{3}{4} - \frac{n}{l+1/2} \right)$$

la dépendance en  $l$  montre que **la dégénérescence entre différents espaces propres  $\mathcal{H}_l$  est en effet levée, conformément au théorème de Wigner.**

Bien sûr la dégénérescence liée à l'invariance par rotation demeure (cela se traduit par le fait que des états avec  $m$  différents ont la même énergie). Voir figure 7.18.

### 7.4.2.4 Atome à plusieurs électrons

Le spectre de l'atome d'hydrogène est aussi celui pour des atomes à un électron, comme  $He^+$ ,  $Li^{2+}$ , (sauf qu'il faut remplacer la charge du noyau par  $Ze$ , et utiliser une masse réduite différente).

Pour des atomes à plusieurs électrons, le problème est bien plus compliqué. Il n'y pas de solution exacte du spectre, mais des méthodes approchées (comme la méthode variationnelle ou autres) donnent des résultats très satisfaisants. En particulier la méthode de champs moyen, consiste à considérer que **chaque électron est indépendant**, et subit un **potentiel moyen**  $V(r)$ , créé par toutes les autres charges ( $Ze$  du noyau, et  $-(Z-1)e$  des autres électrons). Ce potentiel a une **symmétrie sphérique**, qui est une symétrie exacte de l'atome, mais **diffère légèrement du potentiel en  $1/r$** . Cette différence **brise donc la symétrie supplémentaire de Pauli, et lève donc la dégénérescence entre états avec  $l$  différents**.

L'ordre habituel obtenu est :

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 3d \simeq 4s < 4p < 5s \simeq 4d, \quad \text{etc...}$$

Voir figure 7.18.

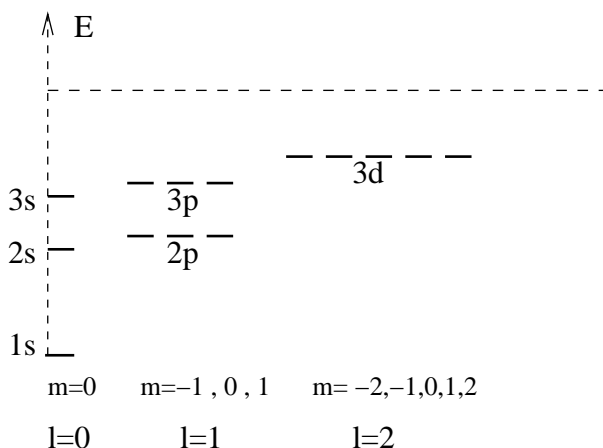


FIG. 7.18 – Spectre d'un atome à plusieurs électrons (orbitales atomiques).

#### 7.4.2.5 Effet d'un champ magnétique extérieur

Si en plus un champ magnétique extérieur  $\vec{B}$  est appliqué, il brise la symétrie par rotation, car il privilégie une direction particulière (direction de  $\vec{B}$ ). Ainsi la dégénérescence en  $m$  est levée, et **le spectre est alors non dégénéré** : C'est l'**effet Zeeman**.

Si le champ magnétique est constant selon l'axe  $z$ , il subsiste une symétrie de rotation autour de l'axe  $z$ .

Cependant cette symétrie ne suffit pas à donner des dégénérescences dans le spectre, car **les rotations autour de  $z$  forment un groupe commutatif** :

$$\hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_z(\beta) = \hat{R}_z(\beta) \hat{R}_z(\alpha)$$

### 7.4.2.6 Structure fine et hyperfine de l'atome hydrogène

ref : Bransden p370, 376. Cohen T.

Le spectre de l'atome d'hydrogène décrit figure (7.17) n'est pas tout à fait correct. En effet il y a de nombreux effets physiques que l'on a négligé et qui modifient ce spectre. Des expériences de spectroscopie permettent d'obtenir les niveaux d'énergie avec une grande précision, et il est donc important de tenir compte de toutes ces corrections. Ces corrections sont natures différentes.

Comme il s'agit de petites corrections, la théorie des perturbations est tout à fait adaptée. Les corrections seront très inférieures à  $\epsilon_1 = 13,6 \text{ eV}$ . Mais comme le spectre de l'atome  $H$  est dégénéré, il faut utiliser la théorie des perturbations pour niveaux dégénérés.

#### Structure fine :

- Une **correction relativiste** portant sur l'énergie cinétique et potentielle de l'électron (provenant de l'équation de Dirac) :

$$\hat{H}'_1 = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{\pi\hbar^2}{2(mc)^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \delta(\vec{x})$$

- Une **correction "spin-orbite"** due à l'interaction entre le mouvement orbital de l'électron et son spin :

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2(mc)^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Noter que ces corrections respectent la symétrie par rotation de l'atome. La correction  $\hat{H}'_2$  couple la position au spin. Par conséquent seul le moment angulaire total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  est conservé. Au résultat, les valeurs propres obtenues dépendent de  $n$  et  $j$  et  $l$ , correspondant aux valeurs propres des opérateurs  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{J}^2$  qui commutent entre eux et qui commutent aussi avec  $\hat{H}$  (d'après  $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left( \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right)$ ).

L'écart obtenu entre les niveaux (2p3/2-2p1/2) est  $\Delta E \simeq 4.10^{-5} \text{ eV}$  .

**Structure hyperfine :** Il provient du couplage entre les moments magnétiques intrinsèques du proton et de l'électron. Voir une étude page 254, pour son effet sur l'état 1s. L'écart obtenu entre les niveaux E1-E0 de l'état 1s est  $\Delta E \simeq 4.10^{-6} \text{ eV}$

Ref : Cohen T. p1209. chap XII.

**Déplacement de Lamb :** Il provient du couplage de l'électron avec le vide quantique du champ électromagnétique, que nous avons introduit page 87.

L'écart obtenu entre les niveaux (2s1/2-2p1/2) est  $\Delta E \simeq 4.10^{-6} \text{ eV}$  . Voir [CTDRG88].

## 7.5 Composition des moments angulaires

### 7.5.1 Particule composée de deux particules de spin 1/2

références : Feynman 12-1, 12-2, 12-5.

C'est par exemple le noyau de Deutérium composé de proton et neutron :

$$\text{Deutrium} = (\text{proton}, \text{neutron})$$

ou du pion  $\pi_0$  formé de deux quarks  $u, \bar{u}$ .

Ou finalement de l'atome d'hydrogène formé de électron + proton.

L'espace de Hilbert du spin total est :

$$\boxed{\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}}$$

Une base de  $\mathcal{H}_{tot}$  est formée par les quatre vecteurs :

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$$

où l'on note  $|++\rangle = |+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$ , etc...

Si le système de deux particules est isolé dans l'espace, alors il est invariant par rotation de l'ensemble, dont le générateur est le moment angulaire total (voir ci-dessus) :

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$$

Et le Hamiltonien commute avec  $\hat{S}$  :

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0$$

**Par exemple :**

$$\hat{H} = K \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

est bien invariant par rotation globale des deux spins.

Dans cet exemple on peut vérifier directement que  $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$ , en écrivant :

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

donnant :

$$\hat{H} = \frac{K}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

et utilisant  $[\hat{S}^2, \hat{S}] = 0$ .

De l'invariance par rotation, on déduit :

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{S}^2] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{S}_z] &= 0 \\ [\hat{S}^2, \hat{S}_z] &= 0 \end{aligned}$$

Pour trouver le spectre de  $\hat{H}$ , on cherche donc d'abord les vecteurs propres communs de  $\hat{S}^2, \hat{S}_z$ .

D'après (7.10), ces vecteurs propres peuvent être noté  $|J, M\rangle$  et vérifient :

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |J, M\rangle &= M\hbar |J, M\rangle \\ \hat{S}^2 |J, M\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle \end{aligned}$$

et forment une base orthonormée de l'espace  $\mathcal{H}_{tot}$ . On veut leur expression dans la base  $|\pm, \pm\rangle$ .

**Propriété** Voici la décomposition de l'espace  $\mathcal{H}_{tot}$  en vecteurs  $|J, M\rangle$  orthonormés :

$$\text{Triplet} : \begin{cases} |J=1; M=+1\rangle & = |++\rangle \\ |J=1; M=0\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |J=1; M=-1\rangle & = |--\rangle \end{cases}$$

$$\text{Singlet} : |J=0; M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Montrant que l'espace  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$  se décompose en somme deux représentations irréductibles du groupe de rotation :

$$\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=1} \oplus \mathcal{H}_{J=0} \quad (7.17)$$

Les dimensions de ces espaces sont :

$$2 \times 2 = 3 + 1$$

Remarquer que les valeurs de  $J$  possibles de la particule composée sont la somme  $J = |\frac{1}{2} + \frac{1}{2}| = 1$  et la différence  $J = |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| = 0$  des deux spins  $\frac{1}{2}$  individuels.

Les coefficients devant les états  $|\pm, \pm\rangle$  dans les expressions des états triplets et singlet ci-dessus, s'appellent coefficients de **Clebsch-Gordan**.

**Conséquence, spectre de  $\hat{H}$  :** Les niveaux d'énergie de la particule composée est donnée par le spectre de  $\hat{H}$  qui donc a deux niveaux d'énergie,  $E_{J=0}, E_{J=1}$  de multiplicité respectives 1, 3. Pour l'exemple,  $\hat{H} = K \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$ , on obtient  $E_J = -\frac{K}{2} \hbar^2 (J(J+1) - \frac{3}{2})$ , soit :

$$E_0 = -\frac{3}{2} K \hbar^2$$

$$E_1 = +\frac{1}{4} K \hbar^2$$

Voir figure 7.19.

Donc dans son état d'énergie fondamentale, la particule composée est une particule de moment angulaire intrinsèque  $J = 0$ . Dans son état excité elle a un moment angulaire intrinsèque  $J = 1$ .

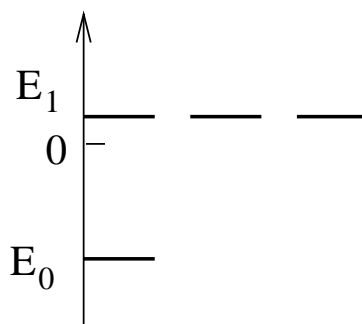


FIG. 7.19 – Niveaux d'énergie de  $\hat{H} = +K \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$ . Le niveau  $E_0$  est non dégénéré. Le niveau  $E_1$  a une multiplicité 3.

**preuve (TD) :**

On va utiliser :

$$\begin{aligned} \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 &= (\hat{S}_{1,x} \hat{S}_{2,x} + \hat{S}_{1,y} \hat{S}_{2,y} + \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z}) \\ &= \left( \frac{1}{2} \hat{S}_{1,+} \hat{S}_{2,-} + \frac{1}{2} \hat{S}_{1,-} \hat{S}_{2,+} + \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z} \right) \\ &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2 \hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 \\ &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + (\hat{S}_{1,+} \hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-} \hat{S}_{2,+} + 2 \hat{S}_{1,z} \hat{S}_{2,z}) \end{aligned}$$

on va aussi utiliser :

$$\begin{aligned} \hat{S}_1^2 |-\rangle &= \hbar^2 \frac{3}{4} |-\rangle \\ \hat{S}_{1,+} |-\rangle &= \hbar |+\rangle \\ \hat{S}_{1,-} |-\rangle &= 0 \\ \hat{S}_{1,z} |\pm\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \end{aligned}$$

On calcule :

$$\hat{S}_z |--> = (-1)\hbar |-->$$

$$\hat{S}^2 |--> = \hbar^2 \left( \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2\frac{1}{4} \right) |--> = 2\hbar^2 |-->$$

donc :

$$|--> = |J = 1, M = -1 >$$

Ensuite, on crée  $|J = 1, M = 0 >$  par action de  $\hat{S}_+$  :

$$|J = 1, M = 0 > = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_+ |J = 1; M = -1 > = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (\hat{S}_{1,+} + \hat{S}_{2,+}) |-->$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-> + |-+>)$$

et on crée  $|J = 1, M = 1 >$  par action à nouveau de  $\hat{S}_+$  :

$$|J = 1, M = 1 > = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_+ |J = 1; M = 0 > = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (\hat{S}_{1,+} + \hat{S}_{2,+}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-> + |-+>)$$

$$= \frac{1}{2} (|++> + |++>) = |++>$$

On a donc obtenu trois vecteurs  $|J = 1, M = -1, 0, +1 >$  de l'espace  $\mathcal{H}_{tot}$  qui lui est de dimension 4.

Le complémentaire orthogonal est de dimension 1, et engendré par le vecteur :

$$|\psi > = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-> - |-+>)$$

on calcule de même :

$$\hat{S}^2 |\psi > = \dots = 0$$

$$\hat{S}_z |\psi > = 0$$

donc  $|\psi > = |J = 0, M = 0 >$ .

Le spectre de  $\hat{H}$  s'obtient en écrivant :

$$\hat{H} = \frac{K}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

■

**Remarque** On peut montrer que l'opérateur  $\hat{H}$  le plus général dans  $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$  qui commute avec les rotations est de la forme :

$$\hat{H} = A \hat{I} + B \hat{S}_1 \hat{S}_2$$

(réf Feynman 12-5,12-2 p237).

### 7.5.1.1 La raie de 21 cm de l'hydrogène

ref cours de L'X, p236.

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, la figure (7.19), montre comment l'état (1s) est en fait formé de 4 états dus à l'interaction entre les spins 1/2 de l'électron et du proton. L'écart en énergie est

$$\Delta E = E_1 - E_0 = 6.10^{-6} eV$$

et s'appelle **la structure hyperfine** de l'état 1s.

Si un atome d'hydrogène isolé est dans un état d'énergie  $E_1$ , il n'est pas rigoureusement stationnaire à cause du couplage avec le champ électromagnétique. Il se désexcite vers l'état fondamental  $E_0$ , par émission spontanée avec une durée de vie moyenne très longue :

$$\tau \simeq 10^7 \text{ ans}$$

Le photon ainsi produit, d'énergie  $h\nu = \Delta E$  a une longueur d'onde  $\lambda = \frac{c}{\nu} = 21 \text{ cm}$  (onde radio).

L'espace interstellaire contient beaucoup d'atome H, et ce signal est observable. C'est "la raie à 21 cm". Il permet d'ailleurs de **cartographier notre Galaxie**. Dans le gaz interstellaire, constitué d'Hydrogène, les collisions entre atomes est responsable d'un température  $T = 100K$ , soit  $kT = 10^{-2} eV$ . Ces collisions excitent l'état  $E_1$ , qui se désécite ensuite par émission spontanée.

### 7.5.1.2 Horloges atomiques et mesure du temps

La valeur de  $\Delta E = \hbar\omega$  est connue expérimentalement avec une précision relative remarquable :  $10^{-13}$ .

Cette grande précision sur la période  $T = 2\pi/\omega$  de transition entre les niveaux  $E_0$  et  $E_1$  est à l'origine de la définition actuelle de la seconde (unité de temps). On utilise la structure hyperfine du Césium 133 avec  $\Delta E \simeq 3,8 \cdot 10^{-5} eV$  plutôt que celle de l'hydrogène :

**Définition** Une **seconde** est 9192631770 périodes de transitions de la structure hyperfine du *Ce 133*.

Les mesures du temps les plus précises sont ainsi faites avec des **Horloges atomiques**.

La précision est telle que on vérifie les effets du champ de gravitation terrestre prédits par la relativité générale, sur ces horloges atomiques, avec une précision relative de  $10^{-5}$ .

**Remarque :** Une ancienne définition de la seconde provient de la division du jour (et de la nuit) en 12 heures, de la division d'une heure en 60 minutes et d'une minute en 60 secondes.

Pourquoi avoir choisi 12 et 60 ?

Peut être pour des raisons pratiques : parmi les nombres en 1 et 100, les chiffres 12 et 60 sont ceux qui ont relativement le plus de diviseurs. Un grand nombre de diviseurs permet ainsi de diviser un jour de plusieurs manières différentes :

$$1/2 \text{ jour} = 1 \times 12h = 2 \times 6h = 3 \times 4h = 4 \times 3h = 6 \times 2h = 12 \times 1h$$

Voir figure 7.20.

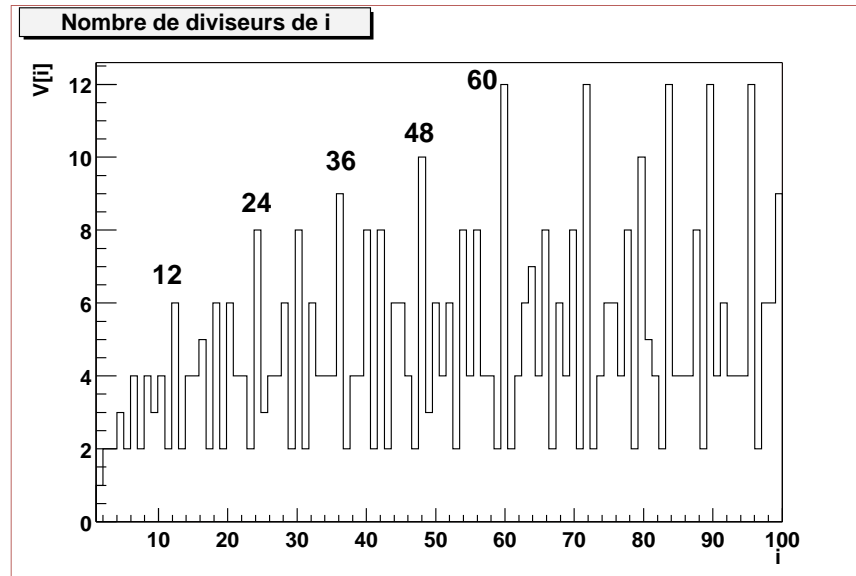


FIG. 7.20 – Nombre de diviseurs d'un entier  $i$ . Cette courbe justifie pourquoi les nombres 12 et 60 ont été choisis pour diviser le jour (et la nuit) en 12 heures, et l'heure en 60 minutes, et la minute en 60 secondes. En effet il apparaît que 12 et 60 ont beaucoup de diviseurs. Cela offre la possibilité de diviser la journée de plusieurs manières différentes.

Toujours à propos de la division du temps, il y a 7 jours dans la semaine, car dès l'époque antique (Babyloniens), et sûrement avant, on observait 7 astres se déplaçant dans le ciel : Lune, Mars, Mercure, Jupiter, Venus, Saturne, Soleil, qui ont donné les sept jours de la semaine, et aussi l'importance particulière du chiffre 7 dans toutes les cultures.

### 7.5.2 Résultat général sur la composition de deux moments cinétiques

On conçoit que l'étude précédente se généralise au couplage de deux moments cinétiques  $j_1$  et  $j_2$  quelconques :

si deux particules de moment angulaire intrinsèque  $j_1$  et  $j_2$  sont en interaction par un Hamiltonien  $\hat{H}$ , et si cette interaction est invariante par rotation globale du système, alors les niveaux d'énergie de  $\hat{H}$  (i.e. de la particule composée) correspondent à des représentations irréductibles du groupe de rotation, notée  $\mathcal{H}_J$ .

En résumé le problème consiste à savoir **comment l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$  se décompose en représentations irréductibles  $\mathcal{H}_J$ .**

Le résultat qui généralise (7.17) est :

$$\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{J=|j_1+j_2|} \mathcal{H}_J$$

**Exemple :**

$$\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=0} \oplus \mathcal{H}_{J=1}$$

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=1/2} \oplus \mathcal{H}_{J=3/2}$$

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{J=0} \oplus \mathcal{H}_{J=1} \oplus \mathcal{H}_{J=2}$$

Voir figure 7.21.

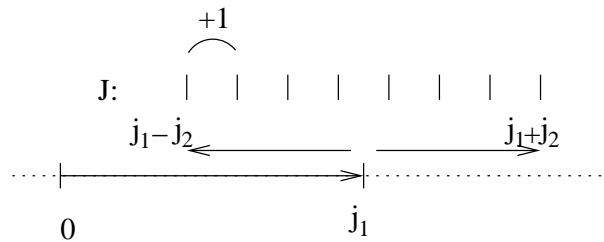


FIG. 7.21 – Composition de deux moments cinétiques  $j_1, j_2$ .

Autrement dit, par rapport à l'état individuel de chaque particule, une base de  $\mathcal{H}_{tot}$  est

$$|j_1, m_1 \rangle \otimes |j_2, m_2 \rangle, \quad m_1 = -j_1, \dots, +j_1, \quad m_2 = -j_2, \dots, +j_2.$$

(soit  $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$  vecteurs).

mais par rapport à la particule composée, une base de  $\mathcal{H}_{tot}$  qui est composée par les vecteurs propres de  $\hat{H}$ , est :

$$|J, M \rangle, \quad J = |j_1 - j_2|, \dots, |j_1 + j_2|, \quad M = -J, \dots, +J$$

qui forme aussi un ensemble de  $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$  vecteurs.

**Exercice :** vérifier que le nombre d'état  $|J, M \rangle$  est bien  $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ .

Les vecteurs de base  $|J, M \rangle$  s'expriment à partir des vecteurs de base  $|j_1, m_1 \rangle \otimes |j_2, m_2 \rangle$  par des relations précises, appelées **relations de Clebsch-Gordan** :

$$|J, M \rangle = \sum_{m_1, m_2} C(J, M, j_1, m_1, j_2, m_2) |j_1, m_1 \rangle \otimes |j_2, m_2 \rangle$$

On trouve ces coefficients, par une technique analogue à celle utilisée pour la propriété (7.5.1).

Voici ces coefficients de **Clebsch-Gordan** disposés dans la table 7.1, ou 7.2.

		J=1	1	0	1
$m_1$	$m_2$	M=1	0	0	-1
1/2	1/2	1			
1/2	-1/2		$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$	
-1/2	1/2		$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/2}$	
-1/2	-1/2				1

TAB. 7.1 – Table des Coefficients de Clebsch-Gordan, pour  $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=0} \oplus \mathcal{H}_{J=1}$

		J=3/2	3/2	1/2	3/2	1/2	3/2
$m_1$	$m_2$	M=3/2	1/2	1/2	-1/2	-1/2	-3/2
1	1/2	1					
1	-1/2		$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{2/3}$			
0	1/2		$\sqrt{2/3}$	$-\sqrt{1/3}$			
0	-1/2				$\sqrt{2/3}$	$\sqrt{1/3}$	
-1	1/2				$\sqrt{1/3}$	$-\sqrt{2/3}$	
-1	-1/2						1

TAB. 7.2 – Table des Coefficients de Clebsch-Gordan, pour  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=1/2} \oplus \mathcal{H}_{J=3/2}$

### Remarques :

- Noter que expérimentalement, on peut mesurer le moment angulaire intrinsèque  $J$  d'une particule en faisant passer un faisceau dans un appareil de Stern Gerlach. Il y aura alors  $2J + 1$  faisceaux à la sortie. cf Bransden p37.

## 7.5.3 Application : symétrie d'isospin, et sections efficaces de réactions hadroniques

Nous allons illustrer l'utilité des Coefficients de **Clebsch-Gordan**, pour la décomposition  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{J=1/2} \oplus \mathcal{H}_{J=3/2}$ , en l'appliquant non pas aux groupe de rotation spatial, mais à la **symétrie d'isospin**, en physique nucléaire, qui correspond au groupe  $SU(2)$ .

### 7.5.3.1 La symétrie d'isospin

Mis à part leur charge électrique différente, le proton et le neutron ont des propriétés très semblables. Par exemple leur masse est voisine  $m_n = 940MeV$ ,  $m_p = 939MeV$ , et ils se comportent de façon similaire dans les interaction nucléaires.

En 1930, Heisenberg a émit l'hypothèse, que le proton et le neutron correspondent à une seule particule, appelée **nucléon**, dont le proton et neutron serait deux états interne différent, notés  $|p\rangle$  et  $|n\rangle$ . L'état interne du nucléon serait donc décrit par un vecteur dans un espace de dimension deux noté  $\mathcal{H}_{j=1/2}$ , appelé espace **d'isospin**, et ayant pour base  $|p\rangle, |n\rangle$  (en analogie avec le spin  $1/2$ ).

Comme la force nucléaire ne fait pas la différence entre le proton et le neutron, Heisenberg a postulé que la force nucléaire possède une symétrie par rapport au mélange de ces deux états, autrement dit une invariance par rapport **au groupe SU(2)**. C'est la **symmétrie d'isospin**.

Seule la force électromagnétique fait la différence entre ces deux états internes, et brise cette symétrie. Cependant les forces électromagnétique sont beaucoup plus faibles que les forces nucléaires, et cela explique la petite différence de masse entre le proton et neutron.

Par exemple dans l'espace  $\mathcal{H}_{1/2}$ , l'opérateur de charge électrique est

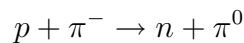
$$\hat{Q} \equiv_{base(|p\rangle, |n\rangle)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

En d'autres termes, la base  $|p\rangle, |n\rangle$  est une base particulière de  $\mathcal{H}_{1/2}$  privilégiée par la force électromagnétique.

D'autres particules nucléaires ont été découvertes ; les pions,  $\pi^+, \pi^0, \pi^-$  (de charge électrique respectives  $+e, 0, -e$ ). Leur masse est  $m_{\pi^+} = m_{\pi^-} = 139,6 \text{ MeV}$ ,  $m_{\pi^0} = 135 \text{ MeV}$ . D'après l'hypothèse de Heisenberg, ces trois particules sont en fait une seule particule, appelée le **pion**, et possédant un état interne décrit par un vecteur dans l'espace  $\mathcal{H}_{j=1}$  de la symétrie d'isospin (rappel : c'est un espace de représentation irréductible de SU(2), et  $\dim \mathcal{H}_{j=1} = 2j + 1 = 3$ ). La force électromagnétique ne respectant pas cette symétrie, est responsable du choix particulier de la base  $|\pi^{\pm,0}\rangle$  et de leur différence de masse. (comme la charge électrique interagit avec l'environnement, c'est pour cela que lors d'une mesure ce soit des états privilégiés. On appelle cela une règle de super-sélection).

### 7.5.3.2 Réaction nucléaires nucléon-pion

Considérons les collisions nucléaires entre un nucléon N et un pion  $\pi$ . En sortie de la collision, les particules peuvent être diverses, par exemple :



La figure 7.22 montre les sections efficaces de diffusion  $\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi')$  pour diverses réactions de ce type.

La section efficace  $\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi')$  est proportionnelle à la probabilité de la réaction, et donc au module carré d'un opérateur de diffusion  $\hat{U}$ , pris entre l'état initial et final :

$$\sigma(N + \pi \rightarrow N' + \pi') = \left| \langle N', \pi' | \hat{U} | N, \pi \rangle \right|^2$$

#### Exercice 28 Diffusion nucléon-pion

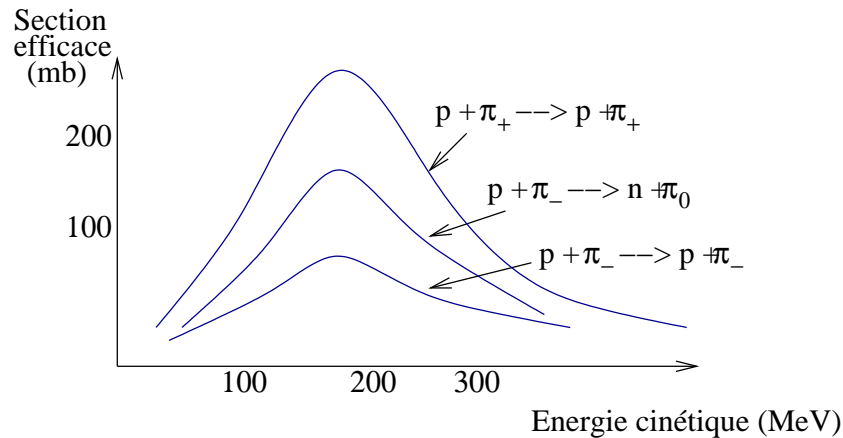


FIG. 7.22 – Sections efficaces de diffusion pour diverses réactions. Le pic de largeur  $\Delta E \simeq 100 \text{ MeV}$  correspond à une résonance.

1. Un état (nucléon - pion)  $|N, \pi\rangle$  se décrit par un vecteur dans l'espace  $\mathcal{H}_{(N, \pi)} = \mathcal{H}_{j=1/2} \otimes \mathcal{H}_{j=1}$ . Comment se décompose cet espace en représentation irréductibles de la symétrie  $SU(2)$  d'isospin ? préciser les dimensions.
2. En utilisant la table (7.2) des coefficients de Clebsch-Gordan, écrire les états de base  $|N, \pi\rangle$  dans la base des états  $|J, M\rangle$  appropriée à cette décomposition.
3. D'après l'hypothèse de l'invariance de la force nucléaire par rapport à la symétrie d'isospin, montrer que la forme générale que prend la matrice de l'opérateur  $\hat{U}$  exprimé dans cette base des états  $|J, M\rangle$ , dépend de seulement deux amplitudes  $A_{3/2}, A_{1/2} \in \mathbb{C}$  ?
4. On supposera que ces amplitudes  $A_{3/2}, A_{1/2}$ , ne dépendent pas de l'énergie. Exprimer les trois sections efficaces de la figure (7.22), à partir de  $A_{3/2}, A_{1/2}$ . Simplifier ces expressions dans les cas extrêmes où (a)  $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$ , (b)  $|A_{3/2}| \ll |A_{1/2}|$ , (c)  $A_{3/2} = A_{1/2}$ .
5. Comme il apparaît sur la figure (7.22), l'expérience donne (à la résonance)

$$\begin{aligned} \sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) &= 195 \text{ mb} \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) &= 45 \text{ mb} \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) &= 23 \text{ mb} \end{aligned}$$

Que déduire sur les amplitudes  $A_{3/2}, A_{1/2}$  ?

6. Dans le même esprit avec lequel nous avons introduit le nucléon et le pion, l'interprétation du pic de résonance est qu'une particule intermédiaire est créée, appelée **résonance**  $\Delta$ . Quelle est la durée de vie de cette particule (utiliser  $h = 6.5 \cdot 10^{-22} \text{ MeV}\cdot\text{s}$ ) ? Quel est l'espace de degré interne d'isospin de cette particule  $\Delta$  ? Comment noter les états internes de cette particule, en faisant apparaître la charge électrique ?

### 7.5.4 Règles de sélection et théorème de Wigner-Eckardt

Voici une autre application de la composition de moment angulaires très importante pour la spectroscopie des atomes.

Nous l'illustrons sur un exemple, montrant le principe d'utilisation.

Considérons un **atome isolé**. Le spectre des niveaux électronique est constitué d'**orbitales atomiques**, notée  $(n, l, m)$ , comme expliqué sur la figure 7.18.

Maintenant si l'atome est soumis à une onde électromagnétique plane de fréquence  $\omega$ , la description faite section 6.2.2, en terme de théorie des perturbations dépendant du temps, montre que celle-ci est susceptible de créer des transitions entre les orbitales  $(n, l, m)$  (en absorbant ou emmettant un photon). Nous avons établi, eq.(6.8,6.12), que la probabilité de transition  $a = (n, l, m) \rightarrow b = (n', l', m')$  est :

$$P_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) \simeq \frac{I}{2\varepsilon_0 c \hbar^2} |D_{ba}|^2 \cos^2 \theta F(t, \omega_{ba} \pm \omega)$$

et est proportionnelle à l'élément de matrice  $|D_{ba}|^2 = e^2 \left| \langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle \right|^2$ , qui fait intervenir l'opérateur vectoriel de position  $\hat{x}$ .

#### 7.5.4.1 Règle de sélection

Même si en général les états quantiques orbitales  $|n, l, m\rangle$  sont difficiles à calculer dans un atome à plusieurs électrons, un simple argument de symétrie, appelé **règle de sélection** montre que l'élément de matrice est nul sauf si

$$l' = l + 1, \quad \text{ou} \quad l' = l - 1$$

(ce résultat est aussi obtenu par un calcul direct en TD). Les transitions possibles dans le spectre atomique sont schématisée sur la figure 7.23.

Voici maintenant l'explication de cette règle de sélection en terme de symétrie. L'élément de matrice  $\langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle$  fait intervenir trois objets appartenant à des représentations irréductibles précises du groupe de rotation  $SO(3)$  : les vecteurs  $|n, l, m\rangle \in \mathcal{H}_l$ ,  $|n', l', m'\rangle \in \mathcal{H}_{l'}$  et l'opérateur vectoriel  $\hat{x} \in \mathcal{H}_1$ , comme montré eq.(7.12).

**L'élément de matrice  $\langle n', l', m' | \hat{x} | n, l, m \rangle$  est le produit scalaire entre le vecteur  $\hat{x} | n, l, m \rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_l = \mathcal{H}_{l-1} \oplus \mathcal{H}_l \oplus \mathcal{H}_{l+1}$  et le vecteur  $|n', l', m'\rangle \in \mathcal{H}_{l'}$ .**

Comme des vecteurs appartenant à des représentation irréductibles différentes sont orthogonaux, une condition nécessaire pour que l'élément de matrice soit non nul est :

$$\boxed{l' = l - 1, \text{ ou } l' = l, \text{ ou } l' = l + 1}$$

Le deuxième cas  $l' = l$  est exclu à cause du même argument utilisé avec une autre symétrie : la symétrie par inversion  $\vec{x} \rightarrow (-\vec{x})$ , ou symétrie de **parité**, correspondant au groupe  $\mathbb{Z}_2 = \{I, -I\}$ . (C'est une symétrie de l'atome car le potentiel vérifie  $V(-\vec{x}) =$

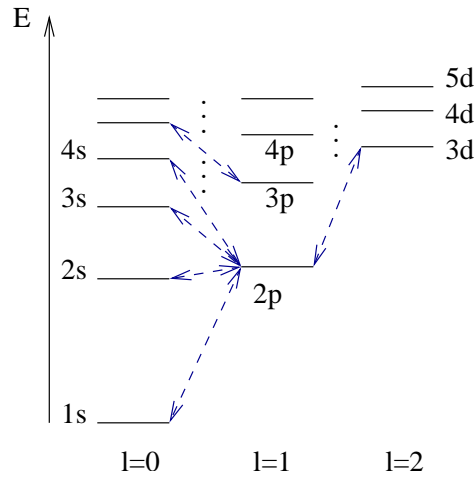


FIG. 7.23 – Les transitions permises sont entre les états  $l' = l \pm 1$ , donnant des raies  $\hbar\omega$  caractéristiques en spectroscopie.

$V(\vec{x})$ ). L'opérateur  $\hat{x}$  est impair (parité  $-1$ ), et  $|n, l, m\rangle$  a la parité  $(-1)^l$ , d'après eq. (7.14). Donc le vecteur  $\hat{x}|n, l, m\rangle$  a la parité  $-(-1)^l$ . Pour que l'élément de matrice soit non nul, il est nécessaire que  $|n', l', m'\rangle$  ait la même parité, donc que  $(-1)^{l'} = -(-1)^l$ . Cela exclue le cas  $l' = l$ .

**7.5.4.2 Théorème de Wigner Eckardt**

Voici une formulation qui généralise le paragraphe précédent.

**Définitions :**

- un **opérateur vectoriel** est une famille d'opérateurs  $\hat{O} = (\hat{O}_1, \hat{O}_2, \hat{O}_3)$ , sur laquelle agit le groupe de rotation  $SO(3)$ , et qui sous l'effet d'une rotation, se transforme comme un vecteur dans  $\mathcal{H}_{l=1}$ . Exemples :  $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ , ou  $\hat{x} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ , ou  $\hat{J} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$  sont des opérateurs vectoriels.
- Un **opérateur scalaire** est un opérateur  $\hat{O}$  qui est invariant sous l'effet d'une rotation (c'est à dire se transforme comme un vecteur dans  $\mathcal{H}_{l=0}$ ). Exemples :  $\hat{H}$ , ou  $\hat{L} \cdot \hat{S}$  sont des opérateurs scalaires.
- Plus généralement, un **opérateur tensoriel irréductible** de rang  $j$  est une famille de  $(2j + 1)$  opérateurs notés  $\hat{T}_j \equiv (\hat{T}_{j,m'})_{m'=-j \rightarrow j}$  sur laquelle agit le groupe  $SO(3)$  de rotation (ou  $SU(2)$ ), et qui sous l'effet d'une rotation se transforme comme un vecteur (à  $2j + 1$  composantes) de la représentation irréductible  $\mathcal{H}_j$ .
- Plus généralement un **opérateur tensoriel** est une famille d'opérateurs sur laquelle agit le groupe  $SO(3)$  de rotation (ou  $SU(2)$ ), et qui sous l'effet d'une rotation se trans-

forme comme un vecteur d'une représentation du groupe de rotation, pas forcément irréductible. Exemple :  $\hat{L} \otimes \hat{L}'$  a 9 composantes, et correspond à  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ .

**Eléments de matrices** Pour  $l, l', l''$  donnés, supposons qu'il faille calculer des éléments de matrices  $\langle l', m' | \hat{T}_{l'', m''} | l, m \rangle$ , où  $|l', m'\rangle \in \mathcal{H}_{l'}$ , et  $|l, m\rangle \in \mathcal{H}_l$  espaces de repres. irréductibles, et  $\hat{T}_{l'', m''}$  est un opérateur tensoriel irréductible et  $m = -l \rightarrow +l$ , etc...

Alors  $\hat{T}_{l'', m''} |l, m\rangle \in \mathcal{H}_{l''} \otimes \mathcal{H}_l = \sum_{k=|l''-l|}^{l''+l} \mathcal{H}_k$ .

Théorème de Wigner-Eckardt :

Si  $\mathcal{H}_{l'}$  n'est pas présent dans la décomposition  $\mathcal{H}_{l''} \otimes \mathcal{H}_l = \sum_{k=|l''-l|}^{l''+l} \mathcal{H}_k$ , alors les éléments de matrice sont nuls (c'est la règle de sélection).

Si  $\mathcal{H}_{l'}$  n'est pas présent dans la décomposition, alors l'élément de matrice peut être non nul et s'exprime à l'aide de Coefficients de Clebsch-Gordan. Voir [CBF, HB] pour plus de récisions, et des exemples d'utilisations.

## 7.6 Symétries fondamentales en physique

Il y a de nombreuses symétries dites fondamentales en physiques, car supposées exactes.

### 7.6.0.3 Le groupe de Poincaré

C'est par exemple l'invariance de la physique par le groupe de Poincaré (translation dans l'espace-temps et changement de Lorentz de référentiels relativistes), qui est donc responsable de la conservation de l'énergie, de la quantité de mouvement, et du moment angulaire.

On montre que les représentations irréductibles du groupe de Poincaré sont caractérisées par deux nombres :  $m$  et  $s$  que l'on interprète comme étant **la masse** et **le spin** des particules élémentaires. (ou hélicité si  $m = 0$ ). Voir [Ste94] p300. Ce résultat de Wigner est considéré comme un des résultats majeure du XXe siècle.

### 7.6.0.4 Autres symétries fondamentales :

- Les forces élémentaires sont exprimées par les groupes de Jauges U(2) (pour la force électro-faible) ou SU(3) pour la force nucléaire forte. Les bosons de Jauges, sont l'expression des générateurs de ces groupes. Il en résulte des quantités conservées. La charge électrique est l'une d'entre elles.
- Symétrie brisée spontanément, @@
- Des indices suggèrent la recherche de nouvelles symétries : exemple la **super-symétrie** qui ferait un lien entre les particules de matière (les quarks et les leptons). cf : [http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/grandunification\\_fr.html](http://public.web.cern.ch/Public/SCIENCE/grandunification_fr.html)
- Conservation de la charge, @@

## 7.7 Topologie des groupes de rotation SO(3) et SU(2) (\*)

@@

on montrera qu'une matrice de SU(2) s'écrit :

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad \text{avec } |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

cf Sakurai , Stenberg p 21, avec l'objet de Dirac.

## 7.8 Solution des exercices

### Exercice 28 Diffusion nucléon-pion page 258.

1.  $\mathcal{H}_{j=1} \otimes \mathcal{H}_{j=1/2} = \mathcal{H}_{j=1/2} \oplus \mathcal{H}_{j=3/2}$ , dimensions  $3 \times 2 = 2 + 4 = 6$ .
2. On obtient :

$$\begin{aligned} |p\pi^+\rangle &= \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle \\ |p\pi^0\rangle &= \sqrt{2/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{1/3} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \\ |p\pi^-\rangle &= \sqrt{1/3} \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{2/3} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^+\rangle &= \sqrt{1/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{2/3} \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^0\rangle &= \sqrt{2/3} \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{1/3} \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |n\pi^-\rangle &= \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

3. Dans un espace de représentation irréductible,  $\hat{U}$  doit agir comme l'identité à une constante complexe près (Lemme de Shur). Donc dans la décomposition  $\mathcal{H}_{j=1/2} \oplus \mathcal{H}_{j=3/2}$  :

$$\hat{U} \equiv_{\mathcal{H}_{3/2} \oplus \mathcal{H}_{1/2}} \begin{pmatrix} A_{3/2} \hat{I}_4 & 0 \\ 0 & A_{1/2} \hat{I}_2 \end{pmatrix}$$

avec  $A_{3/2}, A_{1/2} \in \mathbb{C}$ .

4. On obtient :

$$\begin{aligned} \sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) &= \left| \langle p, \pi^+ | \hat{U} | p, \pi^+ \rangle \right|^2 = |A_{3/2}|^2 \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) &= \left| \langle n, \pi^0 | \hat{U} | p, \pi^- \rangle \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2}}{3} A_{3/2} - \frac{\sqrt{2}}{3} A_{1/2} \right|^2 \\ \sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) &= \left| \langle p, \pi^- | \hat{U} | p, \pi^- \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{3} A_{3/2} + \frac{2}{3} A_{1/2} \right|^2 \end{aligned}$$

- (a) si  $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$ , alors  $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) = |A_{3/2}|^2$ ,  $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq \frac{2}{9}|A_{3/2}|^2$ ,  
 $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq \frac{1}{9}|A_{3/2}|^2$ .
- (b) si  $|A_{3/2}| \ll |A_{1/2}|$ , alors  $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) \simeq 0$ ,  $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq \frac{2}{9}|A_{1/2}|^2$ ,  
 $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq \frac{4}{9}|A_{1/2}|^2$ .
- (c) si  $A_{3/2} = A_{1/2}$ , alors  $\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+) = |A_{3/2}|^2$ ,  $\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0) \simeq 0$ ,  $\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-) \simeq |A_{3/2}|^2$ .

5. L'expérience donne :

$$\frac{\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+)}{\sigma(p\pi^- \rightarrow n\pi^0)} = 4.33 \simeq 4.5$$

$$\frac{\sigma(p\pi^+ \rightarrow p\pi^+)}{\sigma(p\pi^- \rightarrow p\pi^-)} = 8.47 \simeq 9$$

On est donc proche de la situation  $|A_{3/2}| \gg |A_{1/2}|$ .

6. Durée de vie  $\tau \simeq \frac{\hbar}{\Delta E} = 6.510^{-24}s$ . L'espace de degré interne d'isospin de cette particule  $\Delta$  est  $\mathcal{H}_{j=3/2}$ , de dimension  $2j+1=4$ . D'après l'écriture  $|j=3/2, m=3/2\rangle = |p^+, \pi^+\rangle$ , etc... on déduit que  $|\Delta^{++}\rangle = |j=3/2; m=3/2\rangle$ ,  $|\Delta^+\rangle = |j=3/2; m=1/2\rangle$ ,  $|\Delta^0\rangle = |j=3/2; m=-1/2\rangle$ ,  $|\Delta^-\rangle = |j=3/2; m=-3/2\rangle$ .

# Annexe A

## Formules

### A.1 Intégrales Gaussiennes

**Formule 1**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-X^2) dX = \sqrt{\pi} \quad (\text{A.1})$$

preuve : @@

**Formule 2** Soit

$$Q(x) = Ax^2 + Bx + C$$

$A, B, C \in \mathbb{C}$  et  $\Re(A) > 0$  pour la convergence.

Alors

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-Q(x)) dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp\left(-C + \frac{B^2}{4A}\right) \quad (\text{A.2})$$

Preuve : @@

**Formule 3** @@

$$\int_{-\infty}^{+\infty} X^n e^{-X^2} dX = .. \quad (\text{A.3})$$

### A.2 Relations de commutation

On a :

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{q}, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{dF(\hat{p})}{d\hat{p}}$$

$$[F(\hat{q}), \hat{p}] = i\hbar \frac{dF(\hat{q})}{d\hat{q}}$$

**preuve :** Voir [CBF]p 172.

Si les opérateurs  $A, B$  vérifient :

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

alors on a la **formule de Glauber**

$$\exp(A) \exp(B) = \exp([A, B]/2) \exp(A + B) \quad (\text{A.4})$$

**preuve :** Voir [CBF]p 174, ou TD.

Autre preuve : poser  $C = i[A, B]$ ; Alors les trois opérateurs  $(A, B, C)$  vérifient l'algèbre de Weyl-Heisenberg (comme  $\hat{q}, \hat{p}, i\hbar$ ) :

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

Considérons les matrices :

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

qui vérifient aussi la même algèbre. On procède comme dans la section 2.2.7.4, on vérifie sur les matrices  $3 \times 3$  que  $e^a e^b = e^{c/2} e^{a+b}$  ■.

### A.3 Algèbre des matrices de Pauli

On a

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B}) \quad (\text{A.5})$$

valable même si  $\vec{A}, \vec{B}$  sont des opérateurs.

Si  $\vec{u}$  vecteur unitaire :

$$\exp(i\varphi \vec{\sigma} \cdot \vec{u}) = \cos \varphi + i \sin \varphi \vec{\sigma} \cdot \vec{u}$$

# Bibliographie

- [ADR82] A. Aspect, Dalibard J., and Roger G. Experimental tests of Bell's inequalities using time-varying analysers. *Physical Review Letters*, 49 :1804–1807, 1982.
- [Arn76] V.I. Arnold. *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique*. 1976.
- [Aro02] S. Aroche. *Cours de mécanique quantique*. [http ://...](http://...), 2002.
- [Asp76] A Aspect. Proposed experiment to test the non-separability of quantum mechanics. *Physical review D*, 14 :1944–1951, 1976.
- [Bac] H. Bacry. *Lessons on group theory*.
- [Bas86] J.L. Basvedant. *Mécanique quantique*. Ellipses, 1986.
- [BC89] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Introduction to quantum mechanics*. Longman, 1989.
- [Bel64] Bell J. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. *Physics*, 1 :195–200, 1964.
- [CB73] Y. Choquet-Bruhat. *Distributions : théorie et problèmes*. 1973.
- [CBF] C. Cohen-Tannoudji, B. Du, and F. Lalo. *Mécanique quantique*.
- [Cla88] Claude Cohen-Tannoudji. *Cours 1988-89-90 : Cohérences quantiques et dissipation*. Cours de Claude Cohen-Tannoudji au Collège de France. [http ://www.lkb.ens.fr/users/laloe/public\\_html/PHYS/cours/college-de-france/](http://www.lkb.ens.fr/users/laloe/public_html/PHYS/cours/college-de-france/), 1988.
- [CTDRG88] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Processus d'interaction entre photons et atomes*. 1988.
- [DEC<sup>+</sup>96] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.O. Stamatescu, and H.D. Zeh. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer-Verlag, 1996.
- [DGLR89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Physique statistique*. 1989.
- [DMWM] Dietrich Dehlinger and journal = American Journal of Physics year = 2002 volume = 70 pages = 898-902 M. W. Mitchell, title = Entangled photon apparatus for the undergraduate laboratory.
- [dV02] Yves Colin de Verdière. *Méthodes semi-classiques et théorie spectrale*. 2002.
- [F. 00] F. Faure. Exposé sur la quantification géométrique. [http ://lpm2c.polycnrs-gre.fr/faure/](http://lpm2c.polycnrs-gre.fr/faure/), pages 1–12, 2000.

- [Fey63] Feynman. *Le cours de physique de Feynman, Mécanique quantique*. 1963.
- [Gut91] M. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*. Springer-Verlag, 1991.
- [HB] Michel Hulin and Odile Betbeder. *Théorie des groupes appliquée à la physique*.
- [HTS<sup>+</sup>01] R. Hennino, N. Tregoures, M Shapiro, L. Margerin, M Campillo, B. van Tiggelen, and R. Weaver. Observation of equipartition of seismic waves. *Phys. Rev. Letters*, 86 :3447–3450, 2001.
- [Jac75] J.D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, 1975.
- [J.J85] J.J. Sakurai. *Modern Quantum mechanics*. Benjamin Cummings Publishing Company, 1985.
- [L.E90] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics*. 1990.
- [lS02] Dossier Pour la Science. *L'art du Secret. La cryptographie*. Dossier hors Série, juillet/oct 2002.
- [Mes64] A. Messiah. *mécanique quantique*. 1964.
- [Mil94] P. Milonni. *The Quantum Vacuum, an introduction to quantum electrodynamics*. Academic Press, 1994.
- [Nak] M. Nakahara. *Geometry, topology and physics*. graduate students series in physics, Adam Hilger, Bristol and N.Y.
- [NGWH01] Nicolas Gisin, Grégoire Ribordy, Wolfgang Tittel, and Hugo Zbinden. Quantum Cryptography. to appear in *Reviews of Modern Physics*, e-print : *quant-ph/0101098*, 2001.
- [Omn00] R. Omnes. *Comprendre la mécanique quantique*. EDP Sciences, 2000.
- [Per86] Perelomov, A. . *Generalized coherent states and their applications*. Springer-Verlag., 1986.
- [PRJK] G. Papanicolaou, L. Ryzhik, and journal = year = 1995 volume = pages = J. Keller, title = Stability of the P to S energy ratio in the diffusive regime.
- [RS78] M. Reed and B. Simon. *Mathematical methods in physics, vol I : Functional Analysis*. Academic press, New York, 1978.
- [Sak67] J.J. Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. 1967.
- [Sch66] L. Schwartz. *Theorie des distributions*. 1966.
- [Seg95] Carter Segal. *Lectures on Lie groups and Lie Algebras*. 1995.
- [Ste94] S. Sternberg. *Group theory and physics*. Cambridge University Press, 1994.
- [WDG90] W. M. Zhang, D. H. Feng, and R. Gilmore. Coherent states : theory and some applications. *Rev. Mod. Phys.*, 62, 1990.
- [Woo92] Woodhouse. *Geometric quantization*. 1992.
- [YCB82] M. Dillard-Bleick Y. Choquet-Bruhat, C. Dewitt-Morette. *Analysis, manifolds and physics*. 1982.
- [Zur91] W.H. Zureck. *Phys. Today*, 44, 1991.