

Ecole Normale Supérieure de Paris-Saclay
Année scolaire 2021-2022

Éléments de Mécanique Quantique avancés

Olivier POUJADE^{1, 2}

¹CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

²Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, F-91297 Arpajon, France

27 novembre 2021

Table des matières

| | | |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Cours #1 : Bref historique de la mécanique quantique et première quantification | 5 |
| 1.1 | Quelques éléments historiques | 5 |
| 1.1.1 | Planck et le rayonnement du corps noir | 5 |
| 1.1.2 | Einstein et Compton et la mise en évidence du photon | 8 |
| 1.1.3 | Bohr et les niveaux atomiques | 9 |
| 1.1.4 | De Broglie, Davisson et Germer et la dualité onde-corpuscule | 10 |
| 1.1.5 | Équation de Schrödinger et interprétation probabiliste de Born | 11 |
| 1.2 | Interprétation orthodoxe de la mécanique quantique et première quantification | 15 |
| 1.2.1 | Définition d'un système : l'espace de Hilbert | 16 |
| 1.2.2 | État pur d'un système et principe de superposition | 17 |
| 1.2.3 | Mesure probabiliste et réduction du paquet d'onde | 17 |
| 1.2.4 | Équation de Schrödinger : évolution déterministe de l'état quantique | 18 |
| 1.2.5 | Moyennes et Principe d'incertitude de Heisenberg | 19 |
| 2 | Cours #2 : états purs et intrication, matrice densité et état de mélange, décohérence | 22 |
| 2.1 | La notion de vecteur dans un espace de Hilbert a ses limites | 22 |
| 2.2 | On peut définir un état plus général à l'aide du concept de matrice densité | 24 |
| 2.2.1 | Motivation : état quantique plus général qu'un état pur pour faire de la | 24 |
| 2.2.2 | Propriétés de la matrice densité d'un état pur | 25 |
| 2.3 | Matrice densité réduite | 26 |
| 2.3.1 | Motivation : définition de l'état d'un sous-système quantique | 26 |
| 2.3.2 | Exemple simple : l'état d'un des spins 1/2 dans un système de deux spins intriqués | 27 |
| 2.4 | Évolution temporelle de la matrice densité | 29 |
| 2.4.1 | L'équation d'évolution | 29 |
| 2.4.2 | Décohérence : exemple du chat de Schrödinger | 29 |
| 3 | Cours #3 : symétries continues et discrètes | 31 |
| 3.1 | Symétrie en mécanique quantique | 31 |
| 3.1.1 | Une symétrie est une transformation unitaire | 31 |
| 3.1.2 | Les générateurs d'une symétrie continue | 32 |
| 3.1.3 | Effet d'une symétrie sur la moyenne d'une observable | 33 |

| | | |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.2 | Symétrie par translation dans l'espace : quantité de mouvement | 34 |
| 3.3 | Symétrie par translation dans le temps : énergie | 35 |
| 3.4 | Symétrie par rotation | 37 |
| 3.4.1 | Moment cinétique | 37 |
| 3.4.2 | Spin | 39 |
| 3.5 | Symétries discrètes | 42 |
| 3.5.1 | Parité-Renversement temporel | 42 |
| 3.6 | Symétrie d'indiscernabilité | 43 |
| 3.6.1 | Bosons, fermions et anyons | 43 |
| 3.6.2 | Système à deux niveaux peuplé par deux fermions de même projec- tion de spin | 45 |
| 3.6.3 | Système à trois niveaux peuplé par deux fermions de même projec- tion de spin | 45 |
| 4 | Cours #4 : oscillateur harmonique, perturbations, deuxième quantifica- tion (exemple du champ électromagnétique) | 47 |
| 4.1 | Oscillateur harmonique en mécanique quantique et énergie du vide | 47 |
| 4.1.1 | Oscillateur harmonique et son spectre | 47 |
| 4.1.2 | Origine de l'énergie du vide avec les mains | 50 |
| 4.2 | Quantification du champ électromagnétique | 51 |
| 4.2.1 | Le champ électromagnétique classique dans le vide | 51 |
| 4.2.2 | Seconde quantification et espace de Fock : application au champ électromagnétique | 54 |
| 4.2.3 | Exemple de l'émission spontanée et stimulée et spectre du corps noir retrouvé | 55 |
| 5 | Cours #5 : Bizarries de la mécanique quantique et quelques unes de leurs applications | 59 |
| 5.1 | Comment fabrique-t-on des photons intriqués ou des photons uniques ex- périmentalement ? | 59 |
| 5.2 | Expérience de Wheeler à choix retardé | 60 |
| 5.3 | Le paradoxe EPR | 61 |
| 5.3.1 | Le vocabulaire du problème | 61 |
| 5.3.2 | Les inégalités de Bell | 62 |
| 5.3.3 | Interprétation de Bell par une théorie à variables cachées | 63 |
| 5.3.4 | Interprétation de Bell par la mécanique quantique | 64 |
| 5.4 | Théorème de non-clonage et cryptographie quantique | 65 |
| 5.5 | Principe de la téléportation quantique | 66 |
| 6 | Systèmes instationnaires | 69 |
| 6.1 | Règle d'or de Fermi | 69 |
| 6.1.1 | Apparition soudaine d'un autre effet stationnaire | 70 |
| 6.1.2 | Perturbation oscillante | 71 |
| 6.2 | Equation de Lindblad | 71 |

Avant propos

Ces notes de cours de mécanique quantique sont destinées aux étudiants en préparation à l'agrégation à L'École Normale Supérieure de Paris-Saclay. Les pré-requis sont assez nombreux et puisque ce cours s'adresse à des agrégatifs, je pars de l'hypothèse que le lecteur a déjà un niveau L3 de mécanique quantique. On aborde ici des éléments qui sont souvent laissés de côté dans une première approche de la mécanique quantique. Les cinq chapitres qui divisent ces notes correspondent aux cinq cours de 2h dispensés à l'ENS de Paris-Saclay (2021-2022).

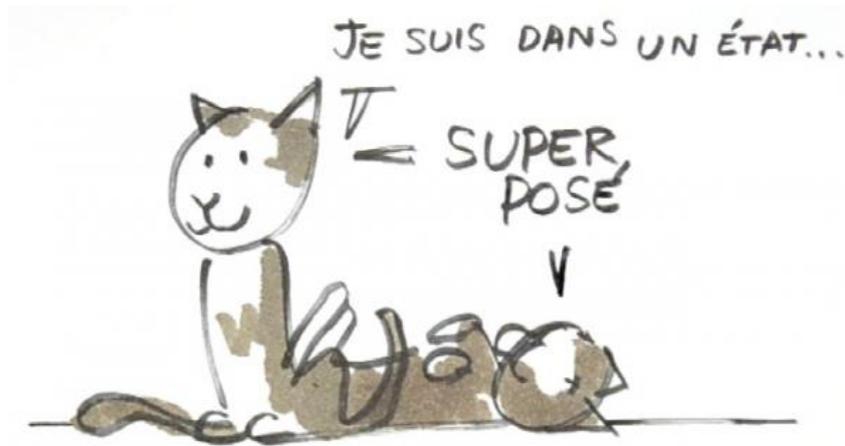


FIGURE 1 – Le chat de Schrödinger (source : planetanimal.com)

Après un rappel de quelques éléments historiques qui ont mené à l'élaboration de cette théorie singulière (le rayonnement de corps noir, l'effet photoélectrique, l'effet Compton et les raies atomiques) et après un rappel des postulats standards sur les états dit *purs* (cours #1), nous verrons une catégorie d'états purs particuliers, les états *intriqués*, à la base de nombreuses applications modernes et de paradoxes (chat de Schrödinger, etc) et nous verrons comment faire apparaître une notion d'états bien plus générale, les états de *mélange* (cours #2) indispensables pour comprendre la décohérence d'un état quantique.

Nous ferons ensuite (cours #3) une incursion dans le domaine des symétries physiques qui permettent de faire apparaître plus naturellement la forme des équations de la mécanique quantique et la notion de spin par exemple. Nous verrons notamment comment le spin $1/2$ apparaît naturellement dans le cadre quantique relativiste (équation de Dirac) mais qu'il n'est pas indispensable de se placer dans le domaine relativiste pour développer la notion de spin.

Nous revisiterons l'oscillateur harmonique en mécanique quantique (cours #4) pour traiter divers problèmes au voisinage d'un état d'équilibre et pour montrer le principe de la quantification du champ électromagnétique (seconde quantification) et divers applications (l'émission spontanée, qui ne peut être traitée dans l'approche semi-classique ; l'effet Casimir ; l'énergie du vide ; etc).

Enfin (cours #5), nous détaillerons quelques applications de la physique quantique qui utilisent des états purs intriqués. Nous partirons des expériences d'Alain Aspect (qui est

un ancien de l'École) et de ses collaborateurs qui ont montré la violation des inégalités de Bell confirmant la *non-séparabilité* de la mécanique quantique. Cette démonstration expérimentale a été à l'origine d'une vague d'applications de ces états intriqués, comme la cryptographie quantique, les ordinateurs quantiques, la téléportation et bien d'autres encore, et marque l'entrée dans ce que l'on appelle communément la *deuxième révolution quantique*.

Je remercie chaleureusement Renaud Zkrypek (professeur de physique en math-spé MP* au lycée Hoche) et Florence Vivicorsi (professeur de physique en math-spé MP au lycée Lakanal) pour leurs relectures attentives.

Si vous avez la moindre remarque sur ces notes de cours, n'hésitez pas à me contacter :

- email perso : poujade@gmail.com
- email CEA : olivier.poujade@cea.fr
- tél CEA : 01 69 26 53 43

Olivier POUJADE, octobre 2021.

Chapitre 1

Cours #1 : Bref historique de la mécanique quantique et première quantification

1.1 Quelques éléments historiques

1.1.1 Planck et le rayonnement du corps noir

Le problème de Kirchhoff

En 1859, Gustav Kirchhoff prouve un théorème surprenant sur la nature du rayonnement du corps noir. Un tel corps absorbe toute la lumière qu'il reçoit et il est en même temps un émetteur parfait. Il prouve que l'énergie émise à la fréquence ν , dans une bande $d\nu$, ne dépend que de la température (et de ν)

$$dE = J(\nu, T) d\nu. \quad (1.1)$$

Ce résultat n'est pas trivial. Kirchhoff est joueur et il décide de défier la communauté scientifique de l'époque en proposant le problème de la détermination de l'expression de $J(\nu, T)$.

C'est en 1879 qu'arrive le premier élément de réponse proposé par Josef Stefan. A l'aide d'expériences qu'il a réalisées, il affirme que l'énergie totale émise,

$$E_{\text{tot}} = \int dE = \int_0^{\infty} J(\nu, T) d\nu \propto T^4, \quad (1.2)$$

est proportionnelle à la puissance quatrième de la température. Ce résultat est confirmé par son élève, Ludwig Boltzmann, en 1884 sur la base d'arguments théoriques cette fois-ci. Cette loi, maintenant connue sous le nom de Stefan-Boltzmann, ne répond bien évidemment pas à la question de Kirchhoff.

En 1896, Wilhelm Wien propose une solution au problème de Kirchhoff en très bon accord avec l'expérience pour des petites valeurs de la longueur d'onde (grandes fréquences)

$$J(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} h \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{kT}}. \quad (1.3)$$

En revanche, à grande longueur d'onde, comme l'ont montré Rubben et Kurlbaum, cette solution ne tient plus vis-à-vis de l'expérience.

En 1900, Lord Rayleigh (alias John William Strutt), corrigé quelques années plus tard par James Jeans (1905), montre qu'en utilisant les lois classiques de la physique,

$$J(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T, \quad (1.4)$$

qui colle bien aux résultats expérimentaux pour de petites fréquences mais diverge pour les grandes fréquences (ce que l'on a appelé à l'époque la *catastrophe ultra-violette*).

A peu près au même moment, Kirchhoff qui est professeur à Heidelberg, déménage à Berlin. Pour le remplacer, la chaire est proposée d'abord à Boltzmann puis à Hertz qui déclinent tous les deux. C'est Planck qui accepte. Le corps noir est finalement intimement lié à la ville de Heidelberg puisque Planck, maintenant installé, découvre en quelques heures, après une visite de Rubbens en octobre 1900 qui lui explique ses avancées, la formule exacte de $J(\nu, T)$. Dans un premier temps, juste après la visite de Rubbens, il s'attèle à extrapoler la formule de la fonction qui se superpose le mieux aux résultats expérimentaux. On sait déjà que supposer que la lumière n'est qu'une onde, et utiliser les équations de Maxwell et la théorie de Boltzmann, ne permettent pas de trouver cette formule. Des hypothèses sont donc fausses.

Les équations de Maxwell suggèrent que l'énergie des différents modes d'une onde électromagnétique est continue. Cette hypothèse mène à la formule de Rayleigh qui est fautive dans le domaine ultra-violet (domaines des courtes longueurs d'onde). C'est cette hypothèse que Planck remet en cause. L'idée audacieuse et révolutionnaire de Planck consiste à dire que l'énergie des différents modes d'une onde électromagnétique n'est pas une quantité continue (si on a un détecteur suffisamment précis) mais qu'elle ne peut prendre que des valeurs discrètes fonction de la fréquence de la lumière. Celle-ci se propage par paquets d'énergie de valeur bien déterminée,

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad (1.5)$$

proportionnel à la fréquence de la lumière.

C'est en faisant cette hypothèse, qu'il passe à la moulinette de la physique statistique de Boltzmann, que Planck arrive à prouver la formule qu'il a conjecturé. Selon les dires de Planck lui-même, *l'expérience montrera si cette hypothèse est réalisée dans la nature ou pas*. Planck remporte le prix Nobel de physique en 1918 pour ce travail.

Solution de Lord Rayleigh et solution de Planck

On savait à la fin du XIXème siècle que l'on pouvait appréhender le rayonnement comme une somme de modes normaux (Fourier dans *Théorie analytique de la chaleur* en 1822). Ainsi, les champs électriques \mathbf{E} et magnétiques \mathbf{B} , qui modélisent le rayonnement, contenus dans une boîte cubique de taille L , peuvent être écrits sous la forme d'une somme infinie du type $\sum a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ où

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad (1.6)$$

avec $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3$.

De cette description, on peut facilement dénombrer les modes normaux qui ont une fréquence comprise entre ν et $\nu + d\nu$ que l'on va appeler $N(\nu) d\nu$. Puisque $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ et donc $\nu = |\mathbf{n}|c/L$, ce dénombrement revient, dans l'espace des \mathbf{n} , à compter le nombre de modes qui sont contenus dans une coquille de rayon $n = |\mathbf{n}| = L\nu/c$ et d'épaisseur $dn = Ld\nu/c$.

Dans l'espace des \mathbf{n} il est clair que les modes sont uniformément répartis avec une densité de 1, c'est à dire 1 mode pour chaque cube de longueur unité. Ainsi,

$$N(\nu) d\nu = 2 \times 1 \times 4\pi n^2 dn, \quad (1.7)$$

où le facteur 2 prend en compte les deux degrés de polarisation possible pour le rayonnement EM, le facteur 1 correspond à la densité d'état dans l'espace des \mathbf{n} et le troisième facteur correspond au volume de la coquille. Puisque $n = \nu L/c$ on en déduit donc que

$$N(\nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} L^3 \nu^2 d\nu. \quad (1.8)$$

Jusque là, Rayleigh et Planck sont d'accord!

C'est à partir d'ici que les solutions proposées divergent. Commençons par Lord Rayleigh. Il suppose, classiquement, que l'énergie $\varepsilon_{\mathbf{n}}$ qui peut remplir chaque micro-état $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ est continue et peut donc prendre n'importe quelle valeur. Or, depuis Boltzmann, on sait que la probabilité pour qu'un micro-état d'un système quelconque thermostaté (à température T), contenant un grand nombre de particules, soit à une énergie $\varepsilon_{\mathbf{n}}$ donnée est proportionnelle à

$$e^{-\frac{\varepsilon_{\mathbf{n}}}{kT}}. \quad (1.9)$$

Lord Rayleigh en déduit donc que l'énergie moyenne dans chaque micro-état est

$$\langle \varepsilon_{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\int \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon}{\int e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon} = kT, \quad (1.10)$$

car ε est une variable continue. On voit que le résultat est le même pour tous les micro-états (équipartition de l'énergie). Ainsi, il en déduit que

$$J(\nu, T) = \langle \varepsilon_{\mathbf{n}} \rangle \times \frac{N(\nu)}{L^3} = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \quad (1.11)$$

où l'on reconnaît bien la formule de Rayleigh-Jeans ... qui ne colle pas à l'expérience pour les hautes fréquences (mais marche bien pour les basses fréquences ou les grandes longueurs d'onde)!

C'est là que Planck fait le premier saut dans le monde quantique en supposant – ce qui est une idée vraiment folle à l'époque – que l'énergie des photons de fréquence ν n'est pas continue mais qu'elle ne peut se manifester que par morceau d'énergie minimum $h\nu$.

Il faut bien remarquer ici que l'hypothèse faite n'est pas que ν prend des valeurs discrètes (ce qui est lié à un effet géométrique, taille de boîte finie) mais que l'énergie d'un mode de fréquence donné ν ne peut pas prendre toutes les valeurs de 0 à l'infini (comme

l'avait supposé Lord Rayleigh puisqu'il n'avait pas de raison de croire qu'il en été autrement). L'hypothèse forte est de supposer que l'énergie d'un mode de fréquence ν est quantifiée et qu'elle ne peut être qu'un multiple de $h\nu$. Dans un des micro-états compatibles avec une fréquence comprise entre ν et $\nu + d\nu$, l'énergie contenue peut être nulle, elle peut être égale à $h\nu$, à $2h\nu$, à $3h\nu$ ou à $m h\nu$ (où $m \in \mathbb{N}$) mais rien d'intermédiaire.

En faisant cette hypothèse, Planck réalise que l'énergie moyenne dans un micro-état, contrairement à Lord Rayleigh, est donnée par

$$\langle \varepsilon_{\mathbf{n}} \rangle = \frac{\sum_{m=0}^{\infty} m h\nu e^{-\frac{m h\nu}{kT}}}{\sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{m h\nu}{kT}}} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (1.12)$$

et il en déduit donc que

$$J(\nu, T) = \langle \varepsilon_{\mathbf{n}} \rangle \times \frac{N(\nu)}{L^3} = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (1.13)$$

qui, cette fois, est en parfait accord avec l'expérience et les limites basses fréquences de Rayleigh et hautes fréquences de Wien.

1.1.2 Einstein et Compton et la mise en évidence du photon

En 1905, Albert Einstein s'intéresse à l'effet photoélectrique qui correspond au mécanisme d'éjection d'électrons par un métal irradié par de la lumière UV. Encore une fois, la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell était incapable d'expliquer ce phénomène.

En effet, expérimentalement, le déclenchement de cet effet ne dépend pas de l'intensité lumineuse. Pour que l'effet photoélectrique puisse se produire, il faut éclairer un métal avec une source lumineuse de fréquence suffisamment grande. En deçà de cette fréquence critique, pas d'effet. Au delà, on constate expérimentalement que l'énergie des électrons ainsi créés varie linéairement avec la fréquence et leur nombre dépend lui de l'intensité de la lumière.

Einstein propose une théorie quantifiée de la lumière. Il émet l'hypothèse que la lumière doit être constituée de grains dont l'énergie doit être proportionnelle à la fréquence ν du rayonnement incident. C'est alors qu'il fait le rapprochement avec l'hypothèse de Planck quelques années plus tôt. La boucle était bouclée, ou *presque*! Einstein remporte le prix Nobel 1921 pour ce travail sur l'effet photoélectrique (et non sur la relativité restreinte ou générale). Les quantas de lumière de Einstein sont appelés *photons* par le physicien et chimiste Gilbert Newton Lewis vingt ans plus tard en 1926.

Même après l'explication de l'effet photoélectrique par Einstein, des sceptiques doutent encore de l'existence de ces *photons*. L'expérience qui les convainc définitivement est celle d'Arthur Compton en 1922. En envoyant un rayonnement X suffisamment énergétique sur un matériau, une quantité non négligeable de ces photons interagissent avec des électrons et ne sont pas totalement absorbés (par effet photoélectrique). Ils subissent une diffusion inélastique (changement d'énergie).

La relativité restreinte ($E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$) impose à une particule de masse nulle que

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.14)$$

où λ est la longueur d'onde du rayonnement. La conservation de la quantité de mouvement du système photon-électron force la relation

$$\frac{h}{\lambda} = -\frac{h}{\lambda'} + p_e, \quad (1.15)$$

ce qui montre que l'électron Compton a pris une quantité de mouvement $p_e = h(1/\lambda + 1/\lambda')$. La conservation de l'énergie oblige

$$m_e c^2 + hc/\lambda = \sqrt{m_e^2 c^4 + h^2 c^2 (1/\lambda + 1/\lambda')^2} + hc/\lambda', \quad (1.16)$$

qui implique que la longueur d'onde des photons rétrodiffusés dans l'expérience de Compton doit être

$$\lambda' = \lambda + \frac{2h}{m_e c}, \quad (1.17)$$

où la grandeur $2h/m_e c$ est appelée longueur d'onde Compton qui vaut 2.4×10^{-10} m (un photon qui aurait cette longueur d'onde aurait une énergie de ~ 5 keV).

Cette longueur d'onde (1.17) des photons rétrodiffusés est exactement celle observée dans l'expérience de Compton et c'est cette observation qui met fin à toutes les polémiques et assoit de façon définitive le statut singulier de la lumière.

1.1.3 Bohr et les niveaux atomiques

En 1913, Neils Bohr publie un article fondamental sur l'atome d'hydrogène [Boh13].

Il y décrit en introduction le modèle atomique de Rutherford (un noyau et des électrons qui gravitent autour : le modèle planétaire) qui permet de comprendre les expériences de déflexion des particules α (qui sont des atomes d'hélium 4 ionisés et donc chargés – c'est ce qui est important dans l'expérience) [Rut11]. La déflexion des α ne peut pas se comprendre avec des atomes faits de matière neutre. Il faut donc des particules chargées dans la mélasse atomique : le noyau, chargé positivement, et les électrons chargé négativement pour que le tout soit globalement neutre.

Bohr fait remarquer ensuite que l'article de Rutherford omet, à dessein (*purposedly* dans [Boh13]), de parler d'un point très gênant : la stabilité de son modèle atomique. En effet, on sait depuis quelques années à l'époque, qu'une particule chargée accélérée émet du rayonnement et perd donc de l'énergie. Comment, donc, expliquer que les électrons qui gravitent autour d'un noyau chargé positivement (qui subissent une accélération puisqu'ils tournent) ne s'effondrent pas rapidement sur le noyau ?

Bohr fait alors référence aux travaux de Planck et d'Einstein que nous venons d'évoquer. Ces travaux abordent le rayonnement de façon radicalement nouvelle, non plus comme un objet continu – c'est à dire comme une onde décrite par les équations de Maxwell (qui prévoit l'instabilité atomique qui n'est clairement pas observée expérimentalement) – mais comme un ensemble d'objets discrets, des photons, qui transportent une quantité bien calibrée d'énergie ($h\nu$), ni plus, ni moins. Cela peut sans doute résoudre le problème de la stabilité ! C'est du moins ce qu'espère Bohr dans son article de 1913.

Il émet deux hypothèses (qu'il ne peut alors pas justifier) sur lesquels il va baser son raisonnement :

- (i) l'équilibre d'un système atomique dans l'état stationnaire peut être traité à l'aide de la mécanique classique alors que le passage d'un état d'équilibre stationnaire à l'autre (transition) ne peut pas l'être.
- (ii) La transition est responsable de l'émission d'une *radiation homogène* (*homogeneous radiation* dans l'article original) pour laquelle la relation entre la fréquence et l'énergie émise est donnée par la relation de Planck (en langage moderne, la transition électronique entre deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 s'accompagne de l'émission d'un photon d'énergie $E = E_2 - E_1$ et de fréquence $\nu = E/h$).

La première hypothèse permet de garder ce qui est bon dans les calculs classiques, c'est à dire les valeurs des niveaux d'énergie électroniques (qui ne fonctionne bien, en fait, que pour l'atome d'hydrogène, ce que l'on ne savait pas à l'époque). La deuxième hypothèse permet de se défaire du problème de l'instabilité. Elle n'explique pas pourquoi une transition entre deux niveaux est discontinue (c'est une hypothèse) mais on comprend qu'elle doit se faire par l'émission de photons dont les énergies sont quantifiées (d'après Planck-Einstein) ce qui exclut l'utilisation des équations de Maxwell au niveau atomique.

1.1.4 De Broglie, Davisson et Germer et la dualité onde-corpuscule

En 1925, le génie de de Broglie se manifeste dans l'audace d'un saut conceptuel : les photons (particules de masse nulle) ont un comportement ondulatoire et particulaire. Pourquoi les particules de matière (de masse non nulle) n'auraient pas le même comportement ?

Admettons que la formule de Planck-Einstein soit correcte pour les photons, et que leur énergie dans un référentiel inertiel donné soit $E = h\nu = \hbar\omega$. Dans un changement de référentiel inertiel, il est connu que la fréquence du rayonnement change (effet Doppler) ce qui signifie que l'énergie des photons change.

La récente relativité restreinte (1905) affirme que le changement d'énergie, E , d'une particule (massive ou non) au passage à un autre référentiel inertiel, se fait en même temps qu'une modification de son impulsion, \mathbf{p} , car la quantité quadridimensionnelle qui se transforme naturellement (selon les lois de Lorentz) lors de ce changement, est le quadri-vecteur énergie-impulsion : $(E, \mathbf{p}c)$ où E est la composante temporelle et \mathbf{p} la composante spatiale. Selon la relativité restreinte, la quantité qui est invariante par changement de référentiel est le module (au sens de Lorentz) de ce quadri-vecteur, c'est à dire $E^2 - p^2 c^2$. Cette quantité étant constante dans tous les référentiels inertiels, elle est en particulier égale au carré de l'énergie dans le référentiel au repos où $\mathbf{p} = 0$, dans lequel $E = mc^2$.
Donc

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4. \quad (1.18)$$

Dans le cas d'un photon, $m = 0$, et ainsi $E = |\mathbf{p}| c$ donc

$$|\mathbf{p}| = \frac{E}{c}, \quad (1.19)$$

$$= h \frac{\nu}{c} = h/\lambda, \quad (1.20)$$

$$= \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k. \quad (1.21)$$

On voit donc que le changement d'énergie entraîne un changement de fréquence, de pulsation, d'impulsion, de longueur d'onde et de vecteur d'onde.

Si l'on suppose *l'existence d'un phénomène périodique d'une nature encore à préciser* (expression tirée du sommaire de la thèse de Louis de Broglie 1925 [dB25]) associé au déplacement de particules (massives ou non), il faut se résoudre, pour des raisons d'invariance relativiste (comme cela est démontré dans la thèse de de Broglie), à associer une fréquence et une longueur d'onde, qui sont les composantes d'un quadrivecteur d'onde, $(\omega, \mathbf{k} c)$, reliés au quadrivecteur énergie-impulsion des particules $(E, \mathbf{p} c)$ par les relations de Planck-Einstein et de de Broglie :

$$E = \hbar \omega, \quad \text{relation de Planck – Einstein,} \quad (1.22)$$

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad \text{relation de de Broglie.} \quad (1.23)$$

C'est à partir de ces relations que Schrödinger détermine son équation éponyme qui régit l'évolution de cette *onde pilote* (cf. §1.1.5).

Pour la petite histoire, le directeur de thèse de Louis de Broglie, Jean Perrin, lui aurait demandé durant sa soutenance comment montrer expérimentalement l'existence de cette onde pilote. Louis de Broglie suggère aussitôt de diffracter des électrons. C'est ce que font Davisson et Germer deux ans plus tard en 1927 en diffractant un faisceau d'électrons sur un cristal de Nickel. En fait, Davisson a déjà réalisé cette même expérience en 1921 (il aurait donc pu trouver ce résultat expérimental 3 ans avant que de Broglie n'en fasse l'hypothèse théorique) mais il n'a rien trouvé de concluant car la diffraction se faisait sur un bloc de Nickel constitué d'une multitude de petits cristaux. En avril 1925, grâce à un accident qui "endommage" le bloc de Nickel et qui lui fait subir différentes phases de chauffe, celui-ci se recristallise pour former de plus gros mono-cristaux sur lesquels peuvent enfin se diffracter les électrons. Le résultat est sans appel ! Des pics de diffraction bien nets apparaissent confirmant le caractère ondulatoire¹ de la matière et enracinant pour de nombreuses années un des premiers casse-tête de la mécanique quantique : la *dualité onde-corpuscule*.

1.1.5 Équation de Schrödinger et interprétation probabiliste de Born

Équation de Schrödinger

Pour trouver l'équation de *l'onde pilote*, après de nombreux essais infructueux, car il en cherchait une équation relativiste, Schrödinger [Sch26] cherche l'opérateur différentiel

1. Cela a depuis été confirmé sur des particules plus lourdes, neutrons, sur des atomes et même sur des macro-molécules.

qui va donner la bonne relation de dispersion entre ω et \mathbf{k} dans le cas d'un mouvement classique.

Pour faire simple, on traite le cas d'une particule isolée en mécanique quantique. Puisque $E = \hbar\omega$ et $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, il découle de la conservation de l'énergie en mécanique classique (pour une particule isolée, l'énergie se réduit à l'énergie cinétique), la relation de dispersion suivante

$$E - p^2/2m = \hbar\omega - \hbar^2 k^2/2m = 0, \quad (1.24)$$

dans l'espace de Fourier. L'opérateur différentiel, dans l'espace réel (par opposition à l'espace de Fourier), qui aboutit à cette relation de dispersion est :

$$\hat{\mathcal{L}} = i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta = 0. \quad (1.25)$$

Mais à quoi appliquer cet opérateur? Forcément une fonction de \mathbf{x} et de t pour quelle ne devienne pas une tautologie du type $0 = 0$. Cette fonction peut être une fonction scalaire, mais elle peut tout aussi bien être une fonction vectorielle. Le plus simple est de commencer par voir si une fonction scalaire pourrait faire l'affaire.

Appelons Ψ cette fonction (fonction dans \mathbb{C} puisqu'il y a des i qui traînent). Que représente Ψ ? Cette fonction, vérifie

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{x}, t), \quad (1.26)$$

qui est l'équation de Schrödinger pour un mouvement libre. Dans le cas d'un mouvement influencé par un potentiel extérieur $V(\mathbf{x}, t)$, l'équation de Schrödinger prend la forme

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.27)$$

La fonction d'onde Ψ évolue dans un espace vectoriel abstrait

Concentrons nous d'abord sur l'équation (1.26). Pour trouver la solution générale d'une telle équation aux dérivées partielles linéaire, on résout d'abord ce que l'on appelle le problème stationnaire aux valeurs propres (dont on connaît l'importance dans les postulats de base de la mécanique quantique comme on le rappellera dans la partie suivante §1.2)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (1.28)$$

Ce problème, purement mathématique, consiste à déterminer toutes les fonctions $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ (labellisées par \mathbf{k} pour les distinguer les unes des autres), indépendantes du temps, pour lesquels il existe une constante $E_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$ (que l'on appelle *valeur propre*, ou *eigenstate* en anglais, elle aussi labellisées par \mathbf{k}) qui vérifient (1.28). Connaissant l'ensemble de ces solutions $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ (appelées alors *vecteurs propres*, ou *eigenvector* en anglais), il existe un théorème mathématique (théorème spectral) qui stipule alors qu'une solution générale de

(1.26) est une combinaison linéaire (encore un terme d'importance que l'on reverra au §1.2) de ces solutions stationnaires

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (1.29)$$

où les $c_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$. On voit donc, juste pour des raisons mathématiques (à cause du théorème spectral), que la fonction Ψ peut être vu comme un vecteur dans un espace abstrait dont les vecteurs de base sont ces $\Psi_{\mathbf{k}}$. Un tel espace vectoriel constitue un espace de Hilbert (notion importante des postulats de la mécanique quantique §1.2).

Dans le cas présent, les solutions du problème aux valeurs propres (1.28) de l'équation de Schrödinger d'une particule libre (1.26) dans un domaine illimité sont

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (1.30)$$

avec $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ où $k = |\mathbf{k}|$ (bien remarquer que ces fonctions ne sont pas normalisées puisque $\int \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = +\infty$, cf. §??). L'état le plus général d'une particule libre est donc

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i(\omega_{\mathbf{k}} t + \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}, \quad (1.31)$$

avec $\omega_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}/\hbar$ soit

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.32)$$

Les équations (1.30) et (1.32) représentent la solution du problème aux valeurs propres (1.28). Les valeurs propres sont ici continues car le vecteur \mathbf{k} , qui représente la quantité de mouvement de la particule libre considérée, peut être absolument quelconque. En revanche, si on résout le même problème dans une boîte de dimension finie $L \times L \times L$ (au lieu d'un domaine infini), on peut montrer que les \mathbf{k} ne peuvent plus prendre que des valeurs discrètes [à montrer en exercice]

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad (1.33)$$

où $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{Z}^3$. Les vecteurs propres $\Psi_{\mathbf{n}}$ ont aussi une forme différente [à montrer en exercice].

Pendant quelques temps après la découverte de l'équation de Schrödinger, on ne se soucie pas trop de la signification de Ψ . Les seuls résultats des problèmes aux valeurs propres (dans des situation plus complexes que celle que l'on vient juste de décrire, par exemple, avec un potentiel V en $1/r$ pour décrire un atome) suffisent à combler les physiciens de l'époque puisque les résultats théoriques sont en accord parfait avec les résultats expérimentaux (raies atomiques en particulier). Mais rapidement, des voix importantes s'élèvent, et notamment celle d'un certain Max Born, qui se demandent s'il y a une forme de réalité derrière cette étrange fonction Ψ .

Interprétation probabiliste

Si l'on considère à nouveau l'équation de Schrödinger (1.26) d'une particule libre (pour faire simple) et que l'on multiplie cette équation par Ψ^* ,

$$i\hbar \Psi^* \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \Delta \Psi, \quad (1.34)$$

et on multiplie l'équation complexe conjuguée par Ψ ,

$$-i\hbar \Psi \partial_t \Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi \Delta \Psi^*, \quad (1.35)$$

on fait la différence et on obtient

$$i\hbar \partial_t (\Psi \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*), \quad (1.36)$$

qui se transforme facilement [à montrer en exercice] en

$$\partial_t (\Psi \Psi^*) = i \frac{\hbar}{2m} \partial_i (\Psi^* \partial_i \Psi - \Psi \partial_i \Psi^*). \quad (1.37)$$

On peut poser

$$\rho = \Psi \Psi^*, \quad (1.38)$$

$$\mathbf{J} = -i \frac{\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (1.39)$$

et la précédente équation prend la forme d'une équation de conservation

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.40)$$

Mais conservation de quoi? Cette équation (1.40) peut laisser penser qu'une particule, en tant qu'objet ponctuel, n'existe pas en mécanique quantique mais qu'elle se présente sous la forme d'une sorte de fluide [Omn00] dont la densité $\rho = \Psi \Psi^*$ est conservée. Cette densité vérifie en effet que

$$P = \int \rho(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = \int \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} \quad (1.41)$$

est une quantité indépendante du temps.

Max Born n'est pas satisfait de cette interprétation "fluide" car expérimentalement on mesure bien l'impact de particules ponctuelles (dont l'extension, du moins, est bien inférieur à celle de Ψ). Born propose donc une autre interprétation qui lui vient d'une réflexion sur les processus de collision en mécanique quantique [Bor27].

Il y considère une particule de masse m libre qui interagit avec un centre diffuseur représenté par un potentiel $V(r)$ à symétrie sphérique (un noyau atomique par exemple). Avant interaction, $t < 0$, il suppose que la particule de masse m a une quantité de mouvement $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}_0$ bien définie. Elle évolue donc suivant

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i \frac{E_{\mathbf{k}_0}}{\hbar} t} \Psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}), \quad (1.42)$$

comme on peut le voir dans (1.31). La quantité $P = \int \rho(\mathbf{x}, t) = \int \Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t) = \Psi_{\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{x})\Psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x})$ est bien indépendante du temps. A $t = 0$ on rajoute l'interaction (on rajoute artificiellement $V(\mathbf{x}) \neq 0$) et Max Born se demande ce que devient Ψ après un temps suffisamment long. Dans son article [Bor27], il détaille les longs calculs pour déterminer l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps mais le point important est de remarquer, qu'après interaction, la solution $\Psi'(\mathbf{x}, t)$ reste une combinaison linéaire des $\Psi_{\mathbf{k}}$ et à la forme

$$\Psi'(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar} t} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (1.43)$$

On peut alors calculer $P' = \int \Psi'^*(\mathbf{x}, t)\Psi'(\mathbf{x}, t)$ qui est aussi indépendante du temps. On voit que $P' = \sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2 P = P$ ce qui signifie que

$$\sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.44)$$

C'est cette relation qui donne l'idée à Max Born d'interpréter les $|c_{\mathbf{k}}|^2$ comme des probabilités pour la particule qui avait initialement la quantité de mouvement \mathbf{k}_0 d'être diffusée dans une direction particulière \mathbf{k} .

Pour le comprendre, faisons deux constats : (i) expérimentalement on observe bien une particule diffuser dans une direction définie (à l'erreur de mesure près) mais (ii) la mécanique quantique semble suggérer que la particule est diffusée dans toutes les directions en même temps car Ψ' est une combinaison linéaire des $\Psi_{\mathbf{k}}$, cf. eq.(1.43), c'est à dire une superposition de tous les différents états finaux de particules libres possibles (i.e. compatibles avec la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement avant et après diffusion).

D'où l'idée de dire que tant que l'on ne fait pas de mesure, cette superposition d'état Ψ' caractérise l'état de la particule, mais que si une mesure est faite (on voit un impact de la particule sur un écran par exemple) alors l'état de la particule après diffusion, Ψ' , prend la valeur $\Psi_{\mathbf{k}}$ (où \mathbf{k} correspondant à la direction de diffusion observée) avec une probabilité $|c_{\mathbf{k}}|^2$. Cela est extrêmement bien résumé par Max Born dans son article : *only a probability that a certain path will be followed will be determined by the function Ψ . One can perhaps summarize this, somewhat paradoxically, as : The motion of the particle follows the laws of probability, but the probability itself propagates in accord with causal laws* (traduction de l'allemand à l'anglais par D. H. Delphenich).

1.2 Interprétation orthodoxe de la mécanique quantique et première quantification

Cette interprétation de la mécanique quantique est la plus répandue mais il est instructif de savoir qu'il en existe bien d'autres. C'est la raison pour laquelle je vous renvoie à ce lien, *The Interpretation of Quantum Mechanics: Many Worlds or Many Words?* (arxiv : quant-ph/9709032), qui montre, en substance, que, même parmi les spécialistes, il y a beaucoup de questions liées aux fondements qui n'admettent pas de réponses bien claires.

A la cinquième conférence de Solvay en 1927, trois visions de la mécanique quantique s'affrontent : il y a la mécanique ondulatoire de Schrödinger, la mécanique des matrices de Heisenberg et Born et la théorie des ondes-pilotes de de Broglie. Cette conférence est donc l'occasion d'unifier les différents points de vue.

1.2.1 Définition d'un système : l'espace de Hilbert

C'est un espace vectoriel complexe \mathcal{H} dans lequel on définit les états $|\Psi\rangle$ du système. Il est muni d'un produit scalaire tel que $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ et on a

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = (\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle)^*, \quad (1.45)$$

où $*$ désigne le complexe conjugué.

Le choix de l'espace de Hilbert est dicté par l'expérience.

Dans le cas de l'expérience de Stern et Gerlach (SG) par exemple, une description de l'état des atomes dans le seul espace des moments $|\mathbf{p}\rangle$, espace de Hilbert que l'on note \mathcal{H}_p , est suffisante pour décrire le résultat de l'expérience dans le cas où l'écran d'observation est proche de l'entrefer générant le champ magnétique. En effet, on observe une seule tâche qui correspond à la déviation de l'ion, ou à l'absence de déviation d'un atome neutre, dans un champ magnétique.

Si on éloigne l'écran, on est capable de visualiser des déviations beaucoup plus ténues et on observe alors deux tâches que ne peut expliquer la simple prise en compte de la quantité de mouvement. Il faut alors postuler l'existence d'une nouvelle propriété sensible au champ magnétique et qui comporte deux états propres (correspondants aux deux tâches distinctes observées). Dans le cas de l'expérience de SG, cette nouvelle propriété est la *spin*² associée à un autre espace de Hilbert \mathcal{H}_s .

C'est comme cela que l'on peut se rendre compte que l'espace de Hilbert est finalement plus vaste que ce que l'on avait imaginé dans un premier temps. Dans le cas de l'expérience de SG, l'espace de Hilbert est donc $\mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_s$. C'est donc bien l'expérience qui dicte le choix de l'espace de Hilbert (cf. TD sur la "structure hyperfine" et la prise en compte de l'état du noyau pour décrire ces états hyperfins). Il se peut très bien que l'on découvre de nouvelles propriétés très fines dans le futur qui augmenteront la taille des espaces de Hilbert dans lesquels on traite les problèmes actuellement.

La notion d'espace de Hilbert n'est pas spécifique à la mécanique quantique. Dès qu'un phénomène physique est décrit par des équations aux dérivées partielles (EDP) – que ce soit l'équation de la chaleur, l'équation d'onde, les équations de Maxwell (dans l'espace infini ou contraintes par des conditions aux limites), les équations de la mécanique des fluides – l'ensemble de ces solutions (dans l'approximation linéaire) peut être décrit comme un vecteur dans un espace de Hilbert dont les vecteurs de base sont les modes propres de l'EDP stationnaire.

2. On verra plus loin dans le cours que cette propriété intrinsèque de la matière émerge de façon naturelle dans le cadre relativiste alors qu'elle semble sorti du chapeau lorsque l'on reste dans le cadre quantique classique (non relativiste).

1.2.2 État pur d'un système et principe de superposition

Un état pur est l'état particulier d'un système qui n'interagit pas avec l'extérieur. C'est un état idéal qui n'existe expérimentalement que de façon approximative et au prix de précautions drastiques³. Un vrai état pur pourrait être l'état de l'univers tout entier.

L'apprentissage de la mécanique quantique des états purs est juste plus simple que celui d'états plus réalistes que l'on décrira plus loin dans le cours : les *états de mélange*.

Un état pur est défini par un vecteur $|\Psi\rangle$ dans un espace de Hilbert \mathcal{H} . Mais puisque l'espace de Hilbert est un espace vectoriel, alors, quelque soient deux états de cet espace ($|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ qui sont des états possibles du système étudié), une combinaison linéaire quelconque des deux est aussi un état possible du système. Ainsi

$$\begin{aligned} \forall |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \mathcal{H}, \forall a, b \in \mathbb{C}, \\ |\Psi\rangle = a |\Psi_1\rangle + b |\Psi_2\rangle \in \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Là aussi, il ne faut pas croire que le principe de superposition est spécifique à la mécanique quantique. Dès lors qu'un phénomène physique, classique, est décrit par une EDP linéaire (équation de la chaleur, fluide dans l'approximation linéaire, etc), la solution générale peut être décrite comme une combinaison linéaire des modes propres stationnaires du problème.

En revanche, si on applique le principe de superposition aux états possibles d'un phénomène physique classique qui n'est pas décrit par une EDP, comme le mouvement d'un solide, décrit par les lois de Newton qui sont des équations différentielles ordinaires, on aboutit invariablement à des états qui n'ont pas de sens. En effet, prenons l'exemple d'une voiture sur la route dont l'état classique est caractérisé par la vitesse. Cette voiture peut rouler à 50 km/h, elle peut aussi rouler à 120 km/h, qui sont deux états tout à fait acceptables d'un point de vue classique. Le principe de superposition, s'il était valable en mécanique classique, voudrait dire que l'on peut aussi trouver une voiture dans une superposition de ces deux états ce qui n'a aucun sens.

La vraie différence entre un système classique linéaire et un système quantique réside dans le processus de mesure que l'on décrit dans la section suivante. L'état d'un système quantique isolé est décrit par $|\Psi\rangle$ avant une mesure. Avant la mesure, le système n'a aucun attribut classique (vitesse, moment cinétique, etc). Ceux-ci seront figés au moment de la mesure mais ils ne sont pas préexistants à la mesure. Cela n'est bien sûr pas le cas d'un système classique pour lequel ses attributs sont déjà fixés et existants avant la mesure qui ne fait que révéler leur valeur.

1.2.3 Mesure probabiliste et réduction du paquet d'onde

Mesure d'une grandeur

À une grandeur classique G on associe un opérateur $\hat{G} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ (que l'on appelle aussi *observable*) en mécanique quantique. Les seuls résultats de mesure possibles sur G sont les valeurs propres de l'opérateur \hat{G} que l'on va désigner par $\{g_\alpha \in \mathbb{R}\}$ associées aux

3. Voir la décohérence pour plus de détail

vecteurs propres $|g_\alpha\rangle$ où α permet d'inventorier ces valeurs propres. Cet ensemble peut être discret ou continu et on parlera alors de spectre discret ou continu.

L'opérateur \hat{G} est auto-adjoint⁴ pour garantir que ses valeurs propres sont réelles. La probabilité de mesurer g_α , lorsque l'état du système quantique est caractérisé par l'état $|\Psi\rangle$, est donnée par

$$\mathcal{P}(g_\alpha) = |\langle \Psi | g_\alpha \rangle|^2. \quad (1.47)$$

Juste après la mesure, l'état du système est $|\Psi\rangle = |g_\alpha\rangle$ (réduction du paquet d'onde). Dans le cas où on mesure une valeur propre dégénérée g_α , l'état après la mesure est la projection de $|\Psi\rangle$ sur le sous espace propre de g_α (de dimension > 1 puisque la valeur propre est dégénérée).

Mesure de deux grandeurs

Deux observables, \hat{A} et \hat{B} , qui commutent peuvent être, dans le principe, mesurées simultanément au cours de la même réalisation car le vecteur propre résultant de la mesure de \hat{A} , appelons le $|a_\alpha\rangle$, est aussi un vecteur propre de \hat{B} . Il existe en effet un $|b_\beta\rangle = |a_\alpha\rangle$.

Cela serait impossible avec deux observables qui ne commutent pas et qui n'ont donc pas la même base de vecteurs propres. Dans ce cas, une mesure de \hat{A} qui donnerait un état $|a_\alpha\rangle$ après mesure ne correspondrait à aucun état $|b_\beta\rangle$ issu d'une mesure de \hat{B} .

Dans le cas de deux observables qui ne commutent pas, on verra à la section §1.2.5 (Principe d'incertitude de Heisenberg) que l'on peut mesurer les deux grandeurs avec une précision extrême mais pas simultanément. On verra comment on mesure la position et la quantité de mouvement et que les deux peuvent être mesuré séparément (dans deux réalisations différentes d'un même état quantique) avec une précision extrême mais ils ne peuvent pas être mesurés simultanément avec une précision aussi extrême.

1.2.4 Équation de Schrödinger : évolution déterministe de l'état quantique

Si l'état du système est défini initialement par $|\Psi(t=0)\rangle$, alors les états ultérieurs $|\Psi(t)\rangle$ ont une évolution déterministe qui est régit par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (1.48)$$

où \hat{H} est le hamiltonien du système.

Ainsi, l'évolution de $|\Psi(t)\rangle$ est parfaitement déterministe. En revanche, l'issue d'une mesure de cet état reste fondamentalement probabiliste.

En effet, il est impossible de prévoir le résultat d'une réalisation de la mesure de l'observable \hat{G} pour un système dans un état $|\Psi\rangle$ donné. La probabilité de trouver la valeur g_α est donnée par (1.47). En revanche, plus on réalise de mesures de \hat{G} sur un système préparé dans le même état $|\Psi\rangle$ et plus on va se rapprocher du spectre théorique (1.47) prévu par la mécanique quantique.

4. Auto-adjoint est équivalent à hermitien en dimension finie. Ca n'est pas le cas en dimension infinie.

1.2.5 Moyennes et Principe d'incertitude de Heisenberg

Les inégalités de Heisenberg

Soit \hat{A} une observable. La valeur moyenne de \hat{A} pour un état quantique $|\Psi\rangle$ est donné par

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \sum_{\alpha} \mathcal{P}(a_{\alpha}) a_{\alpha}, \\ &= \sum_{\alpha} |\langle \Psi | a_{\alpha} \rangle|^2 a_{\alpha}, \\ &= \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle.\end{aligned}\tag{1.49}$$

Cela signifie concrètement que si l'on réalise un grand nombre $N \gg 1$ d'expériences où l'on prépare le système dans le même état quantique $|\Psi\rangle$ et que l'on mesure \hat{A} à chaque fois, on va obtenir, pour chacune des N réalisations, des valeurs a_{α} différentes, avec probabilité $|\langle \Psi | a_{\alpha} \rangle|^2$. Lorsque l'on effectue la moyenne de toutes les valeurs obtenues, on se rapproche de plus en plus de la valeur théorique $\langle \hat{A} \rangle$ à mesure que l'on augmente le nombre N d'expériences.

Il est possible de calculer l'écart quadratique moyen de toutes ces mesures sur \hat{A} , c'est à dire, la dispersion moyenne de tous les résultats de mesure individuels autour de cette valeur moyenne $\langle \hat{A} \rangle$. On notera cette écart quadratique moyen ΔA . Il est tel que

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle, \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2.\end{aligned}\tag{1.50}$$

ΔA est donc la dispersion fondamentale qu'il existe sur les mesures de l'observable \hat{A} dans un état prescrit $|\Psi\rangle$. Cette quantité n'a rien à voir avec une quelconque incertitude de mesure comme on va le voir.

Considérons deux observables \hat{A} et \hat{B} quelconques. Sans perte de généralité, on peut tout à fait supposer que la moyenne de A et de B dans un état quantique $|\Psi\rangle$ donné est nulle ($\langle A \rangle = 0$ et $\langle B \rangle = 0$). Puisque

$$(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle,\tag{1.51}$$

$$(\Delta B)^2 = \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle,\tag{1.52}$$

on en déduit que

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{B}^2 | \Psi \rangle = \|\hat{A} | \Psi \rangle\|^2 \|\hat{B} | \Psi \rangle\|^2 \geq |\langle \Psi | \hat{A} \hat{B} | \Psi \rangle|^2,$$

où la dernière relation correspond à l'usage de l'inégalité de Schwarz. Puisque le produit de deux opérateurs hermitiens n'est pas forcément hermitien, on peut décomposer $\hat{A} \hat{B}$ en sa partie hermitienne et sa partie antihermitienne. Ainsi

$$\begin{aligned}\hat{A} \hat{B} &= \frac{1}{2}(\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}) + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}], \\ \hat{A} \hat{B} &= \hat{D} + i \frac{\hat{C}}{2},\end{aligned}$$

où $\hat{D} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ et \hat{C} (le commutateur de \hat{A} et \hat{B}) sont des opérateurs hermitiens. De là, on en déduit que

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle \Psi | \hat{A}\hat{B} | \Psi \rangle|^2 = \langle \hat{D} \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle^2 \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle^2,$$

qui aboutit à l'énoncé très général du principe d'incertitude de Heisenberg pour deux observables quelconques

$$(\Delta A) (\Delta B) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|. \quad (1.53)$$

L'interprétation est la suivante : sur un grand nombre de réalisations de l'expérience où le système est préparé dans le même état $|\Psi\rangle$, on fait des mesures sur \hat{A} et sur \hat{B} . Supposons que \hat{A} et \hat{B} ne commutent pas de sorte que le produit $(\Delta A) (\Delta B)$ ne puisse pas être nul (cf. équation 1.53). Expérimentalement, lors d'une réalisation particulière de l'expérience, une mesure sur A ou sur B peut être réalisé avec autant de précision qu'on le souhaite en théorie (la limitation est juste technologique). La précision peut être très inférieure à ΔA ou ΔB . A la fin de ce grand nombre d'expériences, on peut reporter dans un histogramme, la distribution des résultats de mesure de A et de B . On peut donc en calculer les écarts type ΔA et ΔB . Ce que nous dit le principe d'incertitude c'est que le produit des largeurs de la distribution de A et de la distribution de B à une valeur minimale non-nulle donnée par (1.53). La moyenne de A (resp. B) par exemple peut être connues avec une précision bien meilleur que ΔA (resp. ΔB) mais l'étalement des mesures autour de cette moyenne connue très précisément est lui fondamentalement inaltérable. C'est une limite physique fondamentale indépendante de toute amélioration du protocole expérimental.

De plus en plus d'énergie pour sonder des détails de plus en plus petits. Mesure de position.

Pour illustrer cela, supposons que l'on veuille faire l'image d'un atome dans une molécule ou sur un réseau cristallin à l'aide d'un faisceau d'électrons (principe du microscope électronique à balayage) dirigé suivant z . On souhaite que l'étalement du faisceau soit $\Delta X \ll L$ (où L est la dimension inter-atomique dans la molécule ou dans le réseau) afin de distinguer les atomes individuels. Grâce au principe d'incertitude (appliqué au faisceau électronique)

$$(\Delta X) (\Delta P_x) \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.54)$$

il faut donc que $\Delta P_x \gg \frac{\hbar}{2L}$, soit $\Delta P_x^2 \gg \frac{\hbar^2}{4L^2}$. Or puisque $\langle \hat{P}_x^2 \rangle = (\Delta P_x)^2$ (car le faisceau est dirigé suivant z et donc, forcément, $\langle \hat{P}_x \rangle = 0$), cela signifie qu'il faut que $\langle \hat{\mathbf{P}}^2 \rangle = \langle \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 \rangle \geq \langle \hat{P}_x^2 \rangle \gg \frac{\hbar^2}{4L^2}$, c'est à dire,

$$E = \frac{\langle \hat{\mathbf{P}}^2 \rangle}{2m} \gg \frac{\hbar^2}{8mL^2}. \quad (1.55)$$

Ainsi, pour faire une image avec une précision $\ll L$, il faut un faisceau d'électrons dont les énergies sont $\gg \frac{\hbar^2}{8mL^2}$, c'est à dire, d'autant plus grandes que L est petit.

Mesure de quantité de mouvement

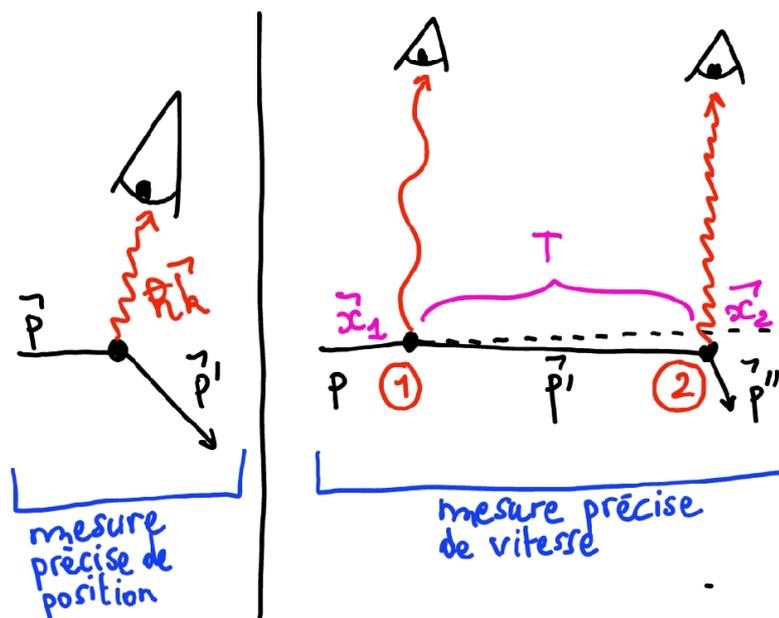


FIGURE 1.1 – La mesure de vitesse par la mesure de positions

On a vu dans la partie précédente comment on mesure une position avec une précision aussi grande qu'on le souhaite. Pour mesurer une vitesse v , ou une quantité de mouvement mv , on a besoin de deux positions, x_1 et x_2 et d'une durée T de sorte que $v = (x_2 - x_1)/T$. C'est exactement ce qui est fait dans la chambre à fils d'un détecteur de particules. Mais le diable est dans les détails que sont les incertitudes de mesure.

Si on mesure x_1 avec une grande précision, on va forcément altérer la quantité de mouvement et donc la trajectoire de la particule et la deuxième mesure de position x_2 , sur la nouvelle trajectoire donnera une vitesse qui ne correspondra pas à la vitesse cherchée. Il faut donc faire une mesure de x_1 assez peu précise, à δx près suffisamment grand, de sorte que la vitesse est altérée d'une faible valeur $\delta v \approx \hbar/(m \delta x)$. On peut alors faire une deuxième mesure de position, x_2 , au bout d'une durée T , suffisamment grande, avec une précision aussi grande que l'on souhaite cette fois-ci. La mesure de la vitesse est alors $v = (x_2 - x_1)/T \pm (\delta x/T + \delta v)$.

Si l'on souhaite faire une mesure de v à Δv près, il faut donc que $\delta v < \Delta v$, c'est à dire $\delta x > \hbar/(m \Delta v)$ (d'où le fait que la mesure de la première position ne peut se faire qu'avec une imprécision suffisamment grande) et aussi que $\delta x/T < \Delta v$ c'est à dire $T > \delta x/\Delta v > \hbar/(m \Delta v^2)$ (d'où le fait que la durée entre les deux mesures de position doit être suffisamment grande).

Chapitre 2

Cours #2 : états purs et intrication, matrice densité et état de mélange, décohérence

2.1 La notion de vecteur dans un espace de Hilbert a ses limites

Supposons qu'un atome se situe dans une boîte fermée et isolée dans laquelle on a fait le vide. On suppose que cet atome se trouve à l'instant initial préparé dans un état pur d'énergie $|E_p\rangle$ parmi tous les états possible $|E_n\rangle_{n \in \mathbb{N}}$. On sait que le vide n'existe pas vraiment et que, à une température donnée T de l'enceinte, il y a au moins le rayonnement du corps noir de l'enceinte qui peuple l'intérieur de la cavité. Ce rayonnement électromagnétique interagit instantanément avec l'atome et tant qu'une mesure de l'état de l'atome n'est pas réalisée, l'état de l'atome est une superposition de tous les états possibles

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n(t) |E_n\rangle, \quad (2.1)$$

dans une vision semi-classique où les atomes que l'on décrit sont traités de façon quantique alors que le champ électromagnétique est traité classiquement. Le couplage à tous les états d'énergie est dû à l'interaction dipolaire. Cet état n'en reste pas moins un état pur.

Maintenant, imaginons que l'on a deux particules dans la boîte au lieu d'une. On les suppose suffisamment éloignées initialement pour qu'elles n'interagissent pas. Instantanément, pour les raisons invoquées plus haut, le champ électromagnétique ambiant en fait une superposition d'état

$$|\Psi_1(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_{1n}(t) |E_{1n}\rangle, \quad (2.2)$$

$$|\Psi_2(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_{2n}(t) |E_{2n}\rangle. \quad (2.3)$$

Ainsi, tant qu'il n'y a pas d'interaction entre l'atome 1 et l'atome 2, l'état du système des deux particules est, encore une fois, défini par un état pur et *séparable*

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_1(t)\rangle \otimes |\Psi_2(t)\rangle = \sum_{i,j} c_{1i}(t) c_{2j}(t) |E_{1i}\rangle \otimes |E_{2j}\rangle. \quad (2.4)$$

Si maintenant, l'atome 1 et 2 arrivent suffisamment proches pour que le champ électrostatique de l'un agisse sur l'autre des couplages vont apparaître et l'évolution de la fonction d'onde totale sera de la forme

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i,j} c_{ij}(t) |E_{1i}\rangle \otimes |E_{2j}\rangle, \quad (2.5)$$

où c_{ij} n'a aucune raison d'être égal à $c_{1i}(t)c_{2j}(t)$. Ainsi $|\Psi(t)\rangle$ n'est plus de la forme $|\Psi_1(t)\rangle \otimes |\Psi_2(t)\rangle$. Ce nouvel état est alors appelé état *intriqué*. C'est un état pur mais non-séparable. Il y a intrication entre les états des deux atomes qui ne vivent plus, d'un point de vue quantique, comme deux particules indépendante mais sont à jamais (jusqu'à une éventuelle mesure) liées l'une à l'autre.

Le terme d'intrication (*Verschränkung* en allemand) a été introduit par E. Schrödinger en 1935 [Sch35]. Un système composite (constitué d'au moins deux parties), dont les sous systèmes sont éloignés les uns des autres, est dit *intriqué* si le système total est bien défini mais les sous systèmes ne le sont pas.

On peut généraliser cela à N atomes, chacun initialement dans un état propre d'énergie, que l'on enferme dans une boîte vide et thermostatée. Si ces N atomes ont un libre parcours de collision très grand par rapport à la taille de la boîte (limite cinétique), l'état quantique du système entier restera un produit tensoriel des états des N atomes

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_1(t)\rangle \otimes |\Psi_2(t)\rangle \otimes \cdots \otimes |\Psi_N(t)\rangle. \quad (2.6)$$

En revanche, si le libre parcours moyen de collision est faible devant la taille de la boîte (limite fluide), au bout de quelques temps de collision, les N atomes seront intriqués dans un état de la forme

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} c_{i_1 i_2 \dots i_N}(t) |E_{1i_1}\rangle \otimes |E_{2i_2}\rangle \otimes \cdots \otimes |E_{Ni_N}\rangle, \quad (2.7)$$

où il faut garder en mémoire que N peut être de l'ordre de 10^{23} (ou plus) pour une quantité macroscopique d'atomes (ou de molécules) de gaz. Cette cascade d'intrications ne s'arrête pas là. En effet, les particules du gaz interagissent aussi avec les particules constituant les parois du contenant, qui interagissent entre elles et qui interagissent avec les particules extérieures et avec tout l'univers.

On est parti de l'hypothèse selon laquelle on peut préparer le gaz de $N \sim 10^{23}$ atomes dans un état pur séparable pour arriver à la conclusion qu'en quelques temps de collision les $N \sim 10^{23}$ atomes deviennent intriqués. Or, cette description est totalement inaccessible expérimentalement car même dans l'hypothèse où chaque atome aurait seulement deux niveaux d'énergie, le nombre des $c_{i_1 i_2 \dots i_N}$ à renseigner serait de l'ordre de $2^{10^{23}}$! Il est donc parfaitement impossible de préparer expérimentalement un gaz macroscopique dans un état pur prédéfini.

Difficile de faire des prédictions avec une théorie qui nécessite une connaissance aussi précise de l'état initial. C'est le même problème avec une description classique si ce n'est qu'en mécanique classique, l'état précis d'un gaz de N atomes est donné par $6N$ quantités ($3N$ coordonnées de positions et $3N$ coordonnées de vitesses) alors que l'état quantique (en supposant que chacune des particules a n états possibles) est donné par n^N quantités

(Cette différence est aussi à la base de l'intérêt que l'on porte actuellement à la réalisation d'ordinateurs quantiques). Pour pallier ce problème de méconnaissance de l'état microscopique d'un système classique, on recourt à la physique statistique qui cherche à déterminer la probabilité d'occurrence d'un macro-état en dénombrant les micro-états compatibles. Mais comment intégrer cette notion de probabilité statistique au formalisme quantique des états purs (intriqués ou pas) ? Ca n'est pas possible ! Il faut un état quantique plus général, qui englobe les états purs, pour y arriver : l'état de mélange décrit par une matrice densité.

2.2 On peut définir un état plus général à l'aide du concept de matrice densité

2.2.1 Motivation : état quantique plus général qu'un état pur pour faire de la

Il faut toujours se ramener à l'expérience et ce qu'elle est capable de nous fournir comme mesure. Dans les expériences quantiques on ne mesure que des quantités moyennes sur un grand nombre de réalisations. Une quantité physique observable générique, que l'on notera A , se traduit en mécanique quantique par l'existence d'un opérateur \hat{A} autoadjoint (comme on l'a déjà rappelé) pour assurer que les valeurs mesurées (les valeurs propres de \hat{A}) sont réelles. Cette condition est fondamentale puisqu'expérimentalement on ne mesure que des quantités scalaires réelles, des nombres¹.

Pour un système quantique aussi complexe qu'un gaz dans un état pur $|\Psi\rangle$, intriqué ou pas, du type (2.7), une mesure répétée de A pour un grand nombre de réalisations du gaz dans le même état quantique $|\Psi\rangle$ (ce qui est juste irréalisable pour un système macroscopique), donnera une moyenne

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle. \quad (2.8)$$

L'idée du nouveau formalisme est de partir de cette constatation que les seules quantités d'importance sont des mesures du type (2.8). Il faut alors réécrire cette relation de façon à faire apparaître une autre manière de caractériser un état quantique que par un vecteur (bra ou ket) dans un espace de Hilbert.

Soit $|\Psi_i\rangle$ une base de l'espace de Hilbert qui permet de décrire (en théorie) tous les états purs (exact) $|\Psi\rangle$ du système. Cette base peut être une base propre d'un opérateur (la base des $|E_i\rangle$ est la base propre de l'hamiltonien par exemple) ou une base très générale qui n'est la base propre d'aucun opérateur. Il faut juste que ce soit une base au sens mathématique du terme. On a donc

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\Psi_i\rangle, \quad \langle \Psi | = \sum_i c_i^* \langle \Psi_i |, \quad (2.9)$$

1. Même lorsque l'on cherche à mesurer un vecteur en mécanique classique, la vitesse par exemple, on mesure 3 quantités scalaires (v_x, v_y, v_z) ou $(|\mathbf{v}|, \theta, \Phi)$

où chacun des $|\Psi_i\rangle$ peut être aussi compliqué que l'état $|E_{1i_1}\rangle \otimes |E_{2i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |E_{Ni_N}\rangle$ dans (2.7). La moyenne dans (2.8) peut donc se réécrire

$$\langle A \rangle = \sum_{i,j} c_i c_j^* \langle \Psi_j | \hat{A} | \Psi_i \rangle. \quad (2.10)$$

Mais puisque les nombres complexes c_i sont les composantes de $|\Psi\rangle$ dans la base des $|\Psi_i\rangle$, on peut aussi les interpréter comme un produit scalaire de sorte que

$$c_i = \langle \Psi_i | \Psi \rangle, \quad c_j^* = \langle \Psi | \Psi_j \rangle, \quad (2.11)$$

qui rentre dans l'expression de la moyenne de la façon suivante

$$\langle A \rangle = \sum_{i,j} \langle \Psi_i | \Psi \rangle \langle \Psi | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | \hat{A} | \Psi_i \rangle. \quad (2.12)$$

On voit ainsi apparaître une quantité, $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ (l'ordre est important), qui ne dépend que de l'état quantique du système (et qui ne dépend absolument pas de la grandeur mesurée que l'on a choisie pour dérouler cette manipulation algébrique, ici A) qui est tensoriellement une matrice.

C'est John Von-Neumann qui a fait cette identification en 1927 pour la première fois et qui a appelé cette matrice, la matrice densité définie par

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|. \quad (2.13)$$

Ainsi, au lieu de caractériser des états quantiques avec des vecteurs, on peut le faire avec des matrices (densité).

Cette dualité a ses avantages et ses inconvénients. Parmi les inconvénients figure en bonne place le fait que l'on se retrouve avec un objet mathématique qui comprend beaucoup plus de cases à renseigner qu'avant. En effet, si le vecteur de Hilbert $|\Psi\rangle$ a N composantes, la matrice densité associée, $\hat{\rho}$, en a $N(N+1)/2$ (car elle est hermitienne). Mais cet inconvénient devient aussi un avantage puisque cela signifie aussi que $\hat{\rho}$ peut contenir beaucoup plus d'information que $|\Psi\rangle$ et de l'information que $|\Psi\rangle$ ne peut pas contenir². Un autre avantage est que $\hat{\rho}$ n'est pas défini à une phase complexe près comme l'est le vecteur d'état $|\Psi\rangle$.

2.2.2 Propriétés de la matrice densité d'un état pur

La matrice densité d'un état pur vérifie quelques propriétés essentielles pour caractériser l'état d'un système quantique. Elle est hermitienne, ce qui assure qu'elle a des valeurs propres réelles. Un vecteur propre trivial est $|\Psi\rangle$ lui-même puisque

$$\hat{\rho} |\Psi\rangle = (|\Psi\rangle\langle\Psi|) |\Psi\rangle = |\Psi\rangle (\langle\Psi|\Psi\rangle) = |\Psi\rangle. \quad (2.14)$$

La valeur propre associée est 1. On a aussi $\hat{\rho}\hat{\rho} = \hat{\rho}$, donc $\hat{\rho}$ est un opérateur de projection dans le cas d'un état pur et la seule autre valeur propre possible est donc 0. Ainsi, dans

2. C'est dans le cadre du formalisme des matrices densité que l'on peut caractériser les états de mélange (*mixed state* en anglais) ce que l'on ne peut pas faire dans le cadre du formalisme des vecteurs dans l'espace de Hilbert.

une base faite de $|\Psi\rangle$ et d'autres vecteur de l'espace de Hilbert (non colinéaires à $|\Psi\rangle$) qui complètent la base, la matrice densité pour un état pur est une matrice très simple avec un 1 sur la diagonale et des 0 partout ailleurs. Ainsi,

$$\det(\hat{\rho}) = 0, \quad (2.15)$$

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1, \quad (2.16)$$

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \quad (2.17)$$

Jusque là, on a bien un autre formalisme mais on ne voit pas très bien en quoi il va pouvoir être très utile. Pour connaître la matrice densité d'un état pur, il faut connaître $|\Psi\rangle$ qui est en général inaccessible pour les raisons invoquées au §2.1.

2.3 Matrice densité réduite

2.3.1 Motivation : définition de l'état d'un sous-système quantique

Un système expérimental \mathcal{S}_X (l'atome que l'on veut étudier par exemple) n'est jamais isolé. Il est forcément perturbé par ce qui l'entoure, le rayonnement de corps noir, les collisions, etc. De proche en proche, on voit que toutes les particules de l'univers doivent être intégrées à l'état du système. Le seul état pur est l'état de l'univers tout entier \mathcal{S} .

Le système expérimental \mathcal{S}_X peut donc être vu comme un sous-système de l'univers. L'univers est donc composé de deux sous-systèmes : le système expérimental, \mathcal{S}_X , et le reste de l'univers \mathcal{S}_E que l'on appelle pudiquement l'environnement de sorte que $\mathcal{S} = \mathcal{S}_X \cup \mathcal{S}_E$.

L'état pur $|\Psi\rangle$ est l'état de \mathcal{S} que l'on peut aussi écrire sous forme de matrice densité $\rho[\mathcal{S}] = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ mais, dans la réalité, on ne connaît rien sur l'état de l'environnement \mathcal{S}_E . Comment, alors, décrire l'état du système expérimental \mathcal{S}_X , sous-système de \mathcal{S} ?

Encore une fois, on se ramène à l'expérience. L'espace de Hilbert est défini par $\mathcal{H} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_E$. L'état le plus général est de la forme

$$|\Psi_{XE}\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |X_i\rangle \otimes |E_j\rangle, \quad (2.18)$$

avec $\sum_{ij} |c_{ij}|^2 = 1$. Il s'agit d'un état intriqué entre l'environnement et le système expérimental pour les raisons que l'on a évoquées au début de ce chapitre.

On souhaite mesurer la moyenne d'une observable \hat{O} sur \mathcal{S}_X . Il s'agit d'un opérateur qui n'agit que sur \mathcal{H}_X . Il s'écrit donc de façon précise de la façon suivante

$$\hat{O} \otimes \mathbb{I} \quad (2.19)$$

comme opérateur qui agit sur $\mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_E$. Son action sur $|\Psi_{XE}\rangle$ est donc

$$\hat{O} \otimes \mathbb{I} |\Psi_{XE}\rangle = \sum_{ij} c_{ij} (\hat{O} |X_i\rangle) \otimes |E_j\rangle. \quad (2.20)$$

Ainsi, la moyenne de \hat{O} sur l'état $|\Psi_{XE}\rangle$ est donnée par

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi_{XE} | \hat{O} \otimes \mathbb{I} | \Psi_{XE} \rangle = \sum_{i_1 j_1} \sum_{i_2 j_2} c_{i_1 j_1}^* c_{i_2 j_2} \langle E_{j_1} | \otimes \langle X_{i_1} | \hat{O} | X_{i_2} \rangle \otimes | E_{j_2} \rangle, \quad (2.21)$$

$$= \sum_{i_1 j_1} \sum_{i_2 j_2} c_{i_1 j_1}^* c_{i_2 j_2} \langle X_{i_1} | \hat{O} | X_{i_2} \rangle \delta_{j_1 j_2}, \quad (2.22)$$

$$= \sum_{i_1 i_2} \left(\sum_j c_{i_1 j}^* c_{i_2 j} \right) \langle X_{i_1} | \hat{O} | X_{i_2} \rangle, \quad (2.23)$$

$$= \sum_{i_1 i_2} \rho_{i_1 i_2}^{(X)} \hat{O}_{i_1 i_2}, \quad (2.24)$$

$$= \text{Tr}(\rho^{(X)} \hat{O}). \quad (2.25)$$

On voit donc que l'état de \mathcal{S}_X est caractérisé par une matrice densité "réduite", que l'on appelle $\rho^{(X)}$, qui correspond à la trace de la matrice densité totale sur l'état inconnu (\mathcal{S}_E)

$$\rho^{(X)} = \text{Tr}_{\mathcal{S}_E}(\rho), \quad (2.26)$$

qui est un état de mélange.

2.3.2 Exemple simple : l'état d'un des spins 1/2 dans un système de deux spin intriqués

Un exemple correspond à l'état pur, intrication du spin d'un électron et du spin d'un proton

$$\frac{|+e -p\rangle - |-e +p\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.27)$$

que l'on verra en TD1. Cet état est un état pur dont on peut calculer la matrice densité qui est une matrice 4×4 car il faut prendre en compte les états de base $|+e +p\rangle$ et $|-e -p\rangle$. Les deux écritures sont équivalentes. Quel est l'état de l'électron dans ce système s'il est le seul système accessible à l'expérience? On prend la trace de la matrice densité sur les états de p et on trouve au final une matrice densité 2×2 qui caractérise l'état de l'électron qui est un mélange maximum.

La matrice densité de ce système est déterminée par

$$\rho = \left(\frac{|+e -p\rangle - |-e +p\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{\langle +e -p| - \langle -e +p|}{\sqrt{2}} \right), \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{2} (|+e -p\rangle \langle +e -p| - |+e -p\rangle \langle -e +p| + |-e +p\rangle \langle -e +p| - |-e +p\rangle \langle +e -p|) \quad (2.29)$$

La matrice densité de ce système est une matrice 4×4 de nombres complexes mais il vaut mieux la voir comme une matrice 2×2 (de \mathcal{H}_e) de matrices 2×2 (dans \mathcal{H}_p). En

effet, on peut l'écrire sous les deux formes équivalentes suivantes :

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

où l'ordre des colonnes est $\{ \langle +_e +_p |, \langle +_e -_p |, \langle -_e +_p |, \langle -_e -_p | \}$ (on regroupe les e de même signe et $+p$ d'abord et $-p$ ensuite) et l'ordre des rangées est $\{ |+_e +_p\rangle, |+_e -_p\rangle, | -_e +_p\rangle, | -_e -_p\rangle \}$. Ainsi, à titre d'exemple, le terme $-\frac{1}{2} |+_e -_p\rangle \langle -_e +_p |$ dans (2.29) se retrouve, dans l'expression matricielle (2.30), à la deuxième colonne et troisième rangée. Sous sa forme matricielle, tout à droite dans (2.30), faire la trace de la matrice densité sur \mathcal{H}_p , pour obtenir la densité partielle, consiste à prendre la trace de chacune des matrices 2×2 qui sont des éléments de matrice de ρ . Ainsi

$$\rho_e = \text{Tr}_{\mathcal{H}_p}(\rho) = \begin{pmatrix} \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ \text{Tr} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

où l'on constate que l'état de l'électron est défini par la densité partielle que l'on vient de calculer, sachant que l'on ne connaît pas l'état quantique du proton. Cet état, comme on peut le voir est un état de mélange maximal : il y a une chance (classique) sur deux de trouver l'électron dans l'état up ou down.

Il y a une différence fondamentale entre les états de mélange maximal et les états purs. Prenons l'exemple d'un électron dans l'état

$$\frac{|+_z\rangle + |-_z\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.32)$$

qui va passer à travers un dispositif de Stern-Gerlach. Si le polariseur de SG est suivant z , alors avec 50% de chance on obtient la mesure $|+\rangle$ et avec 50% de chance on obtient $|-\rangle$. Mais puisque

$$\frac{|+_z\rangle + |-_z\rangle}{\sqrt{2}} = |+_x\rangle, \quad (2.33)$$

alors Si le polariseur de SG est suivant x , alors avec 100% de chance on obtient la mesure $|+_x\rangle$ et avec 0% de chance on obtient $|-_x\rangle$. Dans le cas d'un mélange maximal, dans tous les états de polarisation on obtient 50%-50%. La même chose se produit avec un faisceau de lumière non polarisée.

2.4 Évolution temporelle de la matrice densité

2.4.1 L'équation d'évolution

L'équivalent de l'équation de Schrödinger pour la matrice densité peut être déterminé en dérivant (2.13) par rapport au temps et en remplaçant $\partial_t |\Psi\rangle$ (resp. $\partial_t \langle\Psi|$) par $-i/\hbar H |\Psi\rangle$ (resp. $i/\hbar \langle\Psi| H$) ce qui donne

$$\partial_t \rho = -i/\hbar [H, \rho]. \quad (2.34)$$

La première chose à laquelle on s'intéresse sont les états stationnaires pour lesquels $\partial_t \rho = 0$. Les états stationnaires vérifient

$$[H, \rho] = 0, \quad (2.35)$$

qui, si on l'écrit dans une base propre de H (où H est diagonal), mène à la conclusion qu'un ρ stationnaire doit être diagonal dans la même base que H . Dans le cas où ρ n'a qu'un seul élément sur la diagonale on se trouve dans le cas d'un état pur. Dans le cas contraire il s'agit d'un état de mélange qui ne peut pas être décrit par un vecteur dans un espace de Hilbert.

C'est la présence de termes de cohérence (des termes hors diagonale de ρ dans la base de H) qui rend la matrice densité non-stationnaire.

2.4.2 Décohérence : exemple du chat de Schrödinger

La décohérence forme le lien entre notre monde macroscopique, au comportement classique, et les principes quantiques qui régissent la nature à l'échelle atomique et sub-atomique.

Le paradoxe du chat de Schrödinger est justement un élément important de cette discussion. Si l'on considère un chat macroscopique (qui pèse quelques kilogrammes et mesure quelques dizaines de centimètres de long) sur lequel on emploie naïvement les préceptes de la mécanique quantique, il est possible de lui donner une forme aussi inattendue qu'improbable.

Selon la mécanique quantique, les états possibles du chat sont des vecteurs (rayons plus exactement) d'un espace de Hilbert. Expérimentalement, il est évident, pour tout le monde, qu'un chat est soit mort soit vivant. On peut le mesurer avec assez peu d'ambiguïté en auscultant le pauvre matou : l'absence de rythme cardiaque est signe qu'il est mort, le contraire est signe qu'il est vivant. Il s'agit donc d'une observable, que l'on pourrait appeler la *mortitude*, qui ne prend que deux valeurs : +1 si le chat est mort et -1 si le chat est vivant (on notera M le premier état, pour mort, et V le deuxième état, pour vivant).

Dans la suite, pour simplifier la discussion, on ne va considérer que la *mortitude* parmi tous les paramètres qui caractérisent l'état d'un chat, et cela sans perte de généralité. La mécanique quantique nous dit que si $|M\rangle$ et $|V\rangle$ sont deux états possibles du chat, alors une combinaison linéaire quelconque de ces deux états est aussi un état possible du chat. C'est là que les choses se compliquent. Comment se fait-il que l'on n'observe pas un chat

dans l'état $\frac{|M\rangle+|V\rangle}{\sqrt{2}}$ dans la vie courante ? Avant de savoir s'il en existe, il faudrait même d'abord se demander à quoi ressemble un chat qui se promène dans l'état $\frac{|M\rangle+|V\rangle}{\sqrt{2}}$?

Évidemment, cette mise en scène n'a d'autre but que de montrer qu'il n'est pas possible d'appliquer les préceptes de la mécanique quantique sur des objets macroscopiques sans tomber sur des conclusion délirantes. Néanmoins, la question que soulève ce paradoxe est la suivante : si la mécanique quantique ne s'applique pas sur des objets macroscopiques, à quelle échelle doit on fixer les limites de son utilisation ? Dans le cas contraire, si elle s'applique aussi a des objets macroscopiques, pourquoi ne voit-on pas des chats de Schrödinger dans la nature ? La réponse vient de l'environnement !

Un chat est un ensemble de cellules constituées de molécules elles-mêmes constituées d'atomes qui interagissent les uns avec les autres par des interactions électrostatiques (Coulomb, Van der Walls, etc). On peut donc résumer un chat à un ensemble de particules à l'échelle atomique qui interagissent les unes avec les autres. A cette échelle les particules ont un comportement quantique mais il se passe ce que l'on a décrit au début de ce chapitre à la section §2.1. Les particules du chat macroscopique subissent des interactions aux multiples origines : elles sont en perpétuel collision les unes avec les autres, avec des photons du corps noir du chat (qui a une température interne de 37 C=310 K), mais elles sont aussi en collision avec les particules de l'environnement, de l'air qui l'entoure, du canapé sur lequel il est posé et des photons qui viennent de la lampe sous laquelle il reste au chaud (dont le rayonnement est hors d'équilibre par rapport à son corps noir à 37 C), etc.

S'il y a beaucoup d'interactions entre l'environnement et le système (collision, corps noir, etc), l'état instantané du chat macroscopique simplifié est du type

$$|\Psi\rangle = \frac{|M\rangle + e^{i\alpha} |V\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.36)$$

où chaque interaction modifie la phase entre chat mort (M) et chat vivant (V). La matrice densité instantanée correspondante est

$$\rho = \frac{1}{2} |M\rangle\langle M| + \frac{1}{2} |V\rangle\langle V| + \frac{1}{2} e^{-i\alpha} |M\rangle\langle V| + \frac{1}{2} e^{i\alpha} |V\rangle\langle M|. \quad (2.37)$$

Expérimentalement, on ne résout pas les fluctuation de phase car les collisions se font à des échelles de temps de l'ordre de 10^{-15} s. Ce que l'on voit est une moyenne temporelle

$$\bar{\rho} = \frac{1}{2} |M\rangle\langle M| + \frac{1}{2} |V\rangle\langle V| + \frac{1}{2} \overline{e^{-i\alpha}} |M\rangle\langle V| + \frac{1}{2} \overline{e^{i\alpha}} |V\rangle\langle M|, \quad (2.38)$$

$$\bar{\rho} = \frac{1}{2} |M\rangle\langle M| + \frac{1}{2} |V\rangle\langle V|, \quad (2.39)$$

car la moyenne des termes de phase est nulle. On voit qu'au bout d'un certain temps les phases disparaissent (décohérence) et on se retrouve avec un mélange statistique maximum ce qui rend le chat totalement classique : soit mort, soit vivant mais en aucun cas un mélange quantique des deux !

Chapitre 3

Cours #3 : symétries continues et discrètes

3.1 Symétrie en mécanique quantique

Les principes très fondamentaux de symétrie fournissent toutes les observables que l'on a pu découvrir jusque là : énergie, quantité de mouvement, moment cinétique mais aussi les charges (électromagnétique, faible, forte), le spin, etc.

Une symétrie par une certaine transformation (translation, rotation, etc) est l'assurance que par cette transformation les lois de la nature ne changent pas. Ainsi, les lois de la nature ne doivent pas changer suivant que l'on réalise une expérience dans un laboratoire à Paris ou qu'on la réalise dans un laboratoire à New-York (invariance par translation dans l'espace). De même, ces lois ne doivent pas changer à Paris si l'on décide d'orienter la paillasse, qui été initialement dirigée vers le nord, vers l'est (invariance par rotation). Elles ne doivent pas non plus changer si, au lieu de faire les expériences aujourd'hui, on décide de les réaliser demain ou dans un million d'années (invariance par translation dans le temps)

3.1.1 Une symétrie est une transformation unitaire

En mécanique quantique, comme en mécanique classique, on mesure des quantités scalaires réelles, c'est à dire, des nombres réels qui sont indiqués par un appareil de mesure à l'aide d'une aiguille ou d'un affichage numérique. Pour déterminer le vecteur vitesse d'un véhicule, par exemple, on va mesurer deux quantités scalaires : la norme du vecteur vitesse (donnée par l'indicateur de vitesse du tableau de bord) et la direction du véhicule (à l'aide d'une boussole qui donne un angle par rapport à une direction de référence donnée par le nord magnétique). A partir de ces deux scalaires, on peut reconstituer le vecteur vitesse dans le système de coordonnées que l'on souhaite. Dans tous les cas, on ne mesure jamais directement un vecteur mais on mesure un ensemble de scalaires.

En mécanique quantique, les scalaires que l'on peut mesurer sont des probabilités (il faut répéter un grand nombre de fois une expérience pour que la mesure devienne suffisamment précise). La probabilité, avant transformation, partant d'un état $|\Psi\rangle$, pour aboutir à l'état $|\Phi\rangle$ est donnée par $|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2$. Il faut impérativement qu'après la transformation de symétrie, engendrée mathématiquement par une matrice U qui agit sur l'espace

de Hilbert selon

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U |\Psi\rangle, \\ |\Phi'\rangle &= U |\Phi\rangle, \end{aligned}$$

la probabilité de transition reste inchangée. Le résultat expérimental ne doit pas être modifié par le changement de point de vue, par la symétrie. On doit donc, dans tous les cas, avoir

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2 = |\langle\Psi'|\Phi'\rangle|^2. \quad (3.1)$$

Or,

$$|\langle\Psi'|\Phi'\rangle|^2 = |\langle\Psi|U^\dagger U|\Phi\rangle|^2, \quad (3.2)$$

ce qui signifie que la matrice associée à la transformation doit vérifier

$$U^\dagger U = e^{i\alpha} \mathbb{I},$$

où $\alpha = 0$ car les éléments diagonaux de $U^\dagger U$ (quelque soit U) sont identiquement réels et positifs. On a donc au final

$$U^\dagger U = \mathbb{I}, \quad (3.3)$$

ce qui veut aussi dire que $U^\dagger = U^{-1}$.

En langage mathématique, cela signifie qu'une transformation de symétrie en mécanique quantique est opérée par une matrice unitaire (les matrices, ou opérateurs, qui vérifient l'éq.(3.3)). L'évolution de $|\Psi(t=0)\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle$ par l'équation de Schrödinger (avant mesure) est une transformation unitaire. La mesure, en revanche, n'est pas une transformation unitaire ; c'est une projection.

On distingue deux types de transformations. Les transformations continues (rotation, translation, etc) et les transformations discrètes (symétrie par rapport à un plan, un point, etc).

3.1.2 Les générateurs d'une symétrie continue

Une transformation de symétrie continue (U) doit être connectée continument à l'identité¹. Ainsi, pour une transformation infinitésimale par cette symétrie, il existe des matrices G_α telles que

$$U = \mathbb{I} + i\varepsilon_\alpha G_\alpha, \quad (3.4)$$

(développement à l'ordre 1 en ε) où les ε_α sont les nombres paramétrisant la transformation (distance pour une translation, angle pour une rotation, etc) et les G_α sont des matrices appelées les générateurs de la symétrie. Ainsi,

$$U^\dagger U = (\mathbb{I} - i\varepsilon_\alpha G_\alpha^\dagger)(\mathbb{I} + i\varepsilon_\alpha G_\alpha) = \mathbb{I} + \varepsilon_\alpha(G_\alpha - G_\alpha^\dagger) + O(\varepsilon^2).$$

1. L'identité est la transformation correspondant à l'absence de transformation.

Pour que (3.3) soit vérifiée, il faut donc que

$$G_\alpha = G_\alpha^\dagger \quad (3.5)$$

ce qui veut simplement dire que les générateurs d'une symétrie doivent être hermitiens. On voit que les opérateurs hermitiens apparaissent naturellement en mécanique quantique pour des raisons de symétrie. Tous les opérateurs représentant une observable en mécanique quantique sont les générateurs d'une symétrie.

Pour obtenir l'expression de $U(g)$ pour une transformation non-infinitésimale g_α , on découpe g_α en une infinité de morceaux $\varepsilon_\alpha = g_\alpha/N$. La transformation suivant g_α va donc être une succession de N transformations infinitésimales $U(\varepsilon)$, c'est à dire

$$U(g) = U(\varepsilon)^N = U(g/N)^N = \left(\mathbb{I} + i \frac{g_\alpha}{N} G_\alpha \right)^N,$$

qui tend vers

$$U(g) = e^{i g_\alpha G_\alpha} \quad (3.6)$$

si les G_α commutent entre eux et qu'ils ne dépendent pas de g .

3.1.3 Effet d'une symétrie sur la moyenne d'une observable

On sait que la valeur moyenne d'une observable A dans un état $|\Psi\rangle$ est donnée par $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$. Lors d'une transformation de symétrie, g , où l'on passe de $|\Psi\rangle$ à $|\Psi'\rangle = U(g) |\Psi\rangle$, cette valeur moyenne se transforme en

$$\langle \Psi' | A | \Psi' \rangle = \langle \Psi | U(g)^\dagger A U(g) | \Psi \rangle.$$

Ainsi, on verra en pratique que pour déterminer explicitement U pour une symétrie donnée, il faut évaluer l'effet du transport de A par la transformation $A \mapsto U(g)^\dagger A U(g)$, au résultat de la transformation, $\text{Sym}[g, A]$, qui dépend de la symétrie (voir les §3.2, §3.3 et §3.4 pour quelques exemples). Ainsi, on étudiera les conséquences de l'égalité

$$U(g)^\dagger A U(g) = \text{Sym}[g, A]. \quad (3.7)$$

En remplaçant $U(g)$ par son expression (3.4), on trouve

$$\langle A \rangle' = \langle \Psi' | A | \Psi' \rangle = \langle (\mathbb{I} - i \varepsilon_\alpha G_\alpha) A (\mathbb{I} + i \varepsilon_\alpha G_\alpha) \rangle$$

qui, en se restreignant à l'ordre 1 en ε , donne la variation de la moyenne sous l'effet de la symétrie

$$\langle A \rangle' = \langle A \rangle - i \varepsilon_\alpha \langle [G_\alpha, A] \rangle. \quad (3.8)$$

On voit que l'effet d'une symétrie sur la valeur moyenne d'une observable est encodée dans la valeur du commutateur $[G, A]$ du générateur G de la symétrie avec l'observable A .

On va utiliser cette relation (3.8) pour déterminer les générateurs des trois symétries fondamentales et certaines de leurs relations dans ce qui suit.

3.2 Symétrie par translation dans l'espace : quantité de mouvement

L'opérateur unitaire de translation dans l'espace, $U(\mathbf{a})$, dépend du vecteur de translation $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ qui correspond à une translation quelconque dans \mathbb{R}^3 .

Soit \mathbf{X} , l'observable position. Sous l'effet d'une translation de \mathbf{a} dans l'espace, le résultat de la symétrie sur \mathbf{X} est évidemment

$$\text{Sym}[\mathbf{a}, \mathbf{X}] = \mathbf{X} + \mathbf{a}.$$

Ainsi, pour trouver $U(\mathbf{a})$ on utilise la relation (3.7)

$$U(\mathbf{a})^\dagger \mathbf{X} U(\mathbf{a}) = \mathbf{X} + \mathbf{a}. \quad (3.9)$$

On va chercher les générateurs de U en posant (3.4) avec $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{a}$ et $\mathbf{G} = -\mathbf{P}/\hbar$ qui n'est qu'un changement de notation pour se ramener aux conventions habituelles. Ainsi,

$$X_\alpha + \frac{i}{\hbar} a_\beta [P_\beta, X_\alpha] = X_\alpha + a_\alpha,$$

qui doit être valable $\forall \mathbf{a}$ ce qui n'est possible que si

$$[P_\beta, X_\alpha] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.10)$$

qui n'est autre que la relation de commutation entre l'opérateur position et l'opérateur quantité de mouvement (responsable de la relation d'incertitude entre ces deux grandeurs en mécanique quantique).

On vient de montrer que l'observable position ne commute pas avec le générateur des translations. Cette dernière relation permet d'affirmer que les opérateurs de position, \mathbf{X} , et quantité de mouvement, \mathbf{P} , ne peuvent se représenter que dans un espace de dimension infinie. En effet, dans la cas contraire (où la représentation serait dans un espace fini de dimension $n > 0$ par exemple), la trace de l'égalité (3.10) donnerait zéro à gauche (trace nulle d'un commutateur en dimension finie) et $-i\hbar n \neq 0$ à droite, ce qui est absurde.

Puisque la translation par un vecteur \mathbf{a} et ensuite par un vecteur \mathbf{b} est équivalente à la translation par un vecteur \mathbf{b} et ensuite par un vecteur \mathbf{a} (dans un espace non courbe), on a

$$U(\mathbf{a})U(\mathbf{b}) = U(\mathbf{b})U(\mathbf{a}),$$

et donc

$$[P_\beta, P_\alpha] = 0, \quad (3.11)$$

que l'on peut aussi retrouver en disant que la direction et l'amplitude de \mathbf{P} ne sont pas affectées par une translation ce qui se traduit par

$$\text{Sym}[\mathbf{a}, \mathbf{P}] = \mathbf{P},$$

et donc

$$U(\mathbf{a})^\dagger \mathbf{P} U(\mathbf{a}) = \mathbf{P}, \quad (3.12)$$

qui implique (3.11) aussi.

Puisque les P_α commutent entre eux on peut donc affirmer que

$$U(\mathbf{x}) = e^{i\frac{P_\alpha}{\hbar} x_\alpha} \quad (3.13)$$

et que

$$\frac{\partial}{\partial x_i} U(\mathbf{x}) = i\frac{P_i}{\hbar} e^{i\frac{P_\alpha}{\hbar} x_\alpha} = i\frac{P_i}{\hbar} U(\mathbf{x}).$$

De là, on déduit que le générateur des translations est

$$P_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (3.14)$$

où l'on reconnaît l'opérateur quantique de quantité de mouvement.

On peut montrer [à faire en exercice] que la valeur propre d'un état propre de P_x dans une boîte 1D de taille finie L varie comme $1/L$. Cela signifie que la vitesse d'une particule libre dans une telle boîte finie varie comme $1/L$ (si l'on modifie la taille de la boîte de façon adiabatique [vitesse des parois très petite devant la vitesse de la particule dans la boîte]). Ce résultat est parfaitement classique. En effet, une particule qui évolue entre deux parois en $x = L(t)/2$ et $-L(t)/2$, initialement avec une vitesse $v(0)$, perd à chaque rebond une vitesse correspondant à 2 fois la vitesse du mur, c'est à dire, $2 \times \dot{L}(t)/2 = \dot{L}(t)$. Cela se produit tous les $L(t)/v(t)$ (le temps d'un aller ou d'un retour). Ainsi, $\frac{dv}{dt} = -\frac{dL/dt}{L/v}$ ce qui signifie que $v \propto 1/L$.

3.3 Symétrie par translation dans le temps : énergie

L'opérateur unitaire de translation dans le temps, $U(t)$, ne dépend que d'un seul paramètre t .

Soit $\mathbf{O}(\tau)$, une observable dépendante du temps. Sous l'effet d'une translation de \mathbf{t} dans le temps, le résultat de la symétrie sur \mathbf{O} est

$$\text{Sym}[t, \mathbf{O}(\tau)] = \mathbf{O}(\tau + t).$$

Ainsi, pour trouver $U(t)$ on utilise, comme précédemment, la relation (3.7)

$$U(t)^\dagger \mathbf{O}(\tau) U(t) = \mathbf{O}(\tau + t). \quad (3.15)$$

On va chercher le générateur de U en posant (3.4) avec $\varepsilon = t$ et $G = -H/\hbar$ qui n'est qu'un changement de notation pour se ramener aux conventions habituelles. Ainsi,

$$\mathbf{O}(\tau) + \frac{i}{\hbar} t [H, \mathbf{O}(\tau)] = \mathbf{O}(\tau) + t \frac{d}{d\tau} \mathbf{O}(\tau),$$

qui doit être valable $\forall t$ ce qui n'est possible que si

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{O}(\tau) = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{O}(\tau)]. \quad (3.16)$$

On retrouve, comme on le savait déjà, que la variation temporelle d'un opérateur est nulle si cette opérateur commute avec le Hamiltonien H . En calculant la moyenne de (3.16) on trouve l'équation

$$\frac{d}{d\tau}\langle O(\tau)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, O(\tau)]\rangle. \quad (3.17)$$

qui permet de retrouver les équations classiques de la mécanique.

En effet, prenons par exemple $O = \mathbf{X}$ (l'opérateur position). En supposant, sans le démontrer, mais comme on le sait très bien dans le cas d'un système quantique ponctuel soumis à un potentiel classique V , que l'Hamiltonien est de la forme $H = P^2/2m + V$, on a

$$\frac{d}{d\tau}\langle \mathbf{X}(\tau)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [P^2/2m + V, \mathbf{X}(\tau)]\rangle.$$

Puisque V commute avec \mathbf{X} , il reste à calculer $[P^2, \mathbf{X}]$, c'est à dire $-\hbar^2/2m[\Delta, \mathbf{X}]$. On montre simplement (à faire en exercice) que $[\Delta, X_\alpha] = 2\partial_\alpha$, ce qui se traduit par $[\Delta, \mathbf{X}] = 2\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}$ et donc

$$\frac{d}{d\tau}\langle \mathbf{X}(\tau)\rangle = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}, \quad (3.18)$$

qui est la définition de la vitesse classique à partir de la quantité de mouvement.

De la même manière, si l'on pose $O = \mathbf{P}$, en supposant aussi que l'Hamiltonien est de la forme $H = P^2/2m + V$, on obtient

$$\frac{d}{d\tau}\langle \mathbf{P}(\tau)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [P^2/2m + V, \mathbf{P}(\tau)]\rangle.$$

Or, puisque P^2 commute avec \mathbf{P} , il reste à calculer $[V, \mathbf{P}]$. On montre aussi simplement que $[V, P_\alpha] = i\hbar\partial_\alpha V$, c'est à dire $[V, \mathbf{P}] = i\hbar\nabla V$. Ainsi,

$$\frac{d}{d\tau}\langle \mathbf{P}(\tau)\rangle = -\langle \nabla V \rangle, \quad (3.19)$$

qui n'est autre que le principe fondamental de la mécanique classique appliqué à une particule ponctuelle soumise à un système de forces dérivant d'une énergie potentielle (V). Il faut noter que dans (3.19), il s'agit bien de $\langle \nabla V \rangle$ qui ne se réduit à $\nabla\langle V \rangle$ que dans le cas où l'extension du paquet d'onde est faible devant la longueur de gradient du potentiel V .

Il reste maintenant à déterminer l'expression de H comme on l'avait fait précédemment pour \mathbf{P} . Par définition de $U(t)$, on sait que

$$|\Psi(\tau + t)\rangle = U(t) |\Psi(\tau)\rangle. \quad (3.20)$$

Pour une évolution infinitésimale, on peut développer (3.20) à l'ordre 1 en t

$$|\Psi(\tau + t)\rangle = |\Psi(\tau)\rangle + t \frac{d}{d\tau} |\Psi(\tau)\rangle = (\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} t H) |\Psi(\tau)\rangle,$$

et on retrouve, en égalisant les termes à l'ordre 1, l'équation de Schrödinger

$$i \hbar \frac{d}{d\tau} |\Psi(\tau)\rangle = H |\Psi(\tau)\rangle. \quad (3.21)$$

On aboutit donc à la conclusion que

$$H = i \hbar \frac{d}{d\tau}, \quad (3.22)$$

et

$$U(t) = e^{-i \frac{H}{\hbar} t}. \quad (3.23)$$

3.4 Symétrie par rotation

3.4.1 Moment cinétique

Dans ce cas, il est important de prendre en compte la dimensionnalité de l'espace car il y a des différences profondes entre une rotation dans le plan (en 2d) et une rotation dans l'espace (en 3d). En effet, il ne faut qu'un paramètre en 2d pour caractériser une rotation (l'angle θ de rotation) alors qu'il en faut trois, les angles d'Euler (α, β, γ) , pour caractériser une rotation en 3d. D'autre part, l'ordre d'une succession de rotations n'a pas d'importance en 2d (le résultat est le même quelque soit l'ordre), ce qui n'est pas du tout le cas en 3d. Nous allons traiter le cas le plus compliqué, 3d, ensemble et je vous laisse le cas 2d à faire tout seul.

Une rotation est une isométrie, c'est à dire une transformation qui laisse invariante les longueurs. Soit \mathbf{X} un vecteur avant rotation et \mathbf{X}' le vecteur après rotation. Il existe un opérateur linéaire $\mathbf{R}(g)$ tel que

$$\mathbf{X}' = \mathbf{R}(g) \mathbf{X},$$

où $g = \theta$ en 2d et $g = (\alpha, \beta, \gamma)$ en 3d (on ne prend pas en compte la translation, déjà traitée, qui est aussi une isométrie). La longueur d'un vecteur quelconque \mathbf{X} est donnée par le carré scalaire, ce qui, sous forme matricielle, se traduit par $|\mathbf{X}|^2 = \mathbf{X}^T \mathbf{X}$ où T est la transposée. L'isométrie se traduit donc par

$$|\mathbf{X}'|^2 = \mathbf{X}'^T \mathbf{X}' = \mathbf{X}^T (\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g)) \mathbf{X} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} = |\mathbf{X}|^2,$$

qui n'est vérifiée $\forall \mathbf{X}$ que si

$$\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g) = \mathbb{I}. \quad (3.24)$$

Cette relation est vraie pour une rotation 2d comme pour une rotation 3d. Elle définit le groupe des rotations que l'on appelle $O(n)$ où n est la dimensionnalité ($n = 2$ en 2d et $n = 3$ en 3d).

Comme les matrices de rotation sont des matrices réelles, en prenant le déterminant de la relation précédente, on trouve que $\det(\mathbf{R}) = \pm 1$. Les transformations qui nous intéressent pour l'instant sont les rotations pures (pas de réflexion par rapport à un

axe ou de symétrie par rapport à un point qui sont aussi des isométries pour lesquelles $\det(R) = -1$) qui sont continûment reliées à l'unité et qui vérifient donc $\det(U) = +1$. Cette condition supplémentaire définit le sous-groupe de $O(n)$, appelé $SO(n)$.

On peut trouver les générateurs $\hat{\omega} = (\hat{\omega}_\alpha)$, où $\alpha \in \{1, 2, 3\}$, de ces transformations en posant

$$\mathbf{R}(g) = \mathbb{I} + g_\alpha \hat{\omega}_\alpha.$$

La relation (3.24) se traduit par

$$\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g) = (\mathbb{I} + g_\alpha \hat{\omega}_\alpha)^T (\mathbb{I} + g_\beta \hat{\omega}_\beta) = \mathbb{I} + g_\alpha (\hat{\omega}_\alpha^T + \hat{\omega}_\alpha) + O(g^2) = \mathbb{I},$$

qui implique, à l'ordre 1 en g , que $\forall \alpha$

$$\hat{\omega}_\alpha^T = -\hat{\omega}_\alpha, \quad (3.25)$$

c'est à dire que les $\hat{\omega}_\alpha$ sont antisymétriques.

En 2d, les $\hat{\omega}_\alpha$, qui sont des matrices 2×2 , n'ont que 2 termes hors diagonale non nuls qui doivent être opposés (antisymétrie). Il n'y a donc qu'un seul générateur qui est

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

L'opérateur de rotation 2d ne dépend ainsi que d'un seul paramètre (comme on l'a déjà dit avant) puisqu'il n'y a qu'un seul générateur.

En 3d, en revanche, les $\hat{\omega}_\alpha$ sont des matrices 3×3 . L'antisymétrie imposant que les termes diagonaux sont nuls, il ne reste que 3 termes d'un côté de la diagonale qui sont opposés aux 3 autres termes de l'autre côté de la diagonale. Les matrices $\hat{\omega}_\alpha$, au nombre de 3, doivent constituer une base des matrices antisymétriques 3×3 . On peut choisir la base naturelle qui est décrite par le tenseur totalement antisymétrique, $\epsilon_{\alpha ij}$, dont tous les éléments sont nuls sauf ceux pour lesquels α, i et j sont tous différents : $\epsilon_{123} = +1$ (et permutations circulaires) et $\epsilon_{213} = -1$ (et permutations circulaires). Ainsi, en posant $(\hat{\omega}_\alpha)_{ij} = \epsilon_{\alpha ij}$, on a

$$\hat{\omega}_1 = \epsilon_{1ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\omega}_2 = \epsilon_{2ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\omega}_3 = \epsilon_{3ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Comme pour les autres symétrie, une rotation engendre dans l'espace de Hilbert une transformation unitaire telle que $|\Psi'\rangle = U(g) |\Psi\rangle$. Sous l'effet d'une rotation, une observable vectorielle $\hat{\mathbf{A}}$ (ça peut être la position \mathbf{X} ou la quantité de mouvement \mathbf{P} par exemple) se transforme en $\hat{\mathbf{A}}' = \mathbf{R}(g) \hat{\mathbf{A}}$. Donc

$$\text{Sym}[g, \hat{\mathbf{A}}] = \mathbf{R}(g) \hat{\mathbf{A}} = R_{\alpha\beta} \hat{A}_\beta, \quad (3.27)$$

où $R_{\alpha\beta}$ est un nombre et \hat{A}_β est la composante suivant β d'un opérateur vectoriel qui agit sur l'espace de Hilbert. Il faut donc bien voir que \hat{A}_β est un opérateur et pas un nombre. Pour trouver $U(g)$, il faut résoudre

$$U(g)^\dagger \hat{A}_\alpha U(g) = R_{\alpha\beta} \hat{A}_\beta, \quad (3.28)$$

qui doit être vérifiée $\forall \hat{\mathbf{A}}$. On va chercher le générateur $U(g)$ en posant $\varepsilon = g$ et $G = -J/\hbar$ (changement de notations) de sorte que, $\forall g_\eta \in \mathbb{R}$ and $\forall \hat{A}_\alpha$ hermitien,

$$\hat{A}_\alpha - ig_\gamma [\hat{J}_\gamma, \hat{A}_\alpha] = (\delta_{\alpha\beta} + g_\eta \epsilon_{\eta\alpha\beta}) \hat{A}_\beta,$$

ce qui signifie que

$$[J_\eta, A_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} A_\beta, \quad (3.29)$$

formule dans laquelle, on le rappelle, \mathbf{A} est un vecteur d'opérateurs (qui se transforme comme un vecteur sous une rotation). En particulier, si on pose $A = J$, on trouve que les J doivent vérifier

$$[J_\eta, J_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} J_\beta, \quad (3.30)$$

qui est la relation de commutation bien connue pour les opérateurs moments cinétique en mécanique quantique.

Les matrices 3×3 qui vérifient cette algèbre sont $(J_\alpha)_{ij} = i \epsilon_{\alpha ij}$. La relation (3.30) est constitutive de ce que l'on nomme une algèbre de Lie². Les constantes $i \epsilon_{\eta\alpha\beta}$ sont les constantes de structure de l'algèbre et représente la signature du groupe de transformation. Ces constantes de structure particulières représentent le groupe de rotation dans l'espace physique de dimension 3 (l'espace au sens usuel). Il est ici représenté (au sens des *représentations* mathématiques) par des matrices 3×3 qui agissent dans l'espace usuel de dimension 3

$$\hat{J}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

3.4.2 Spin

Émergence à partir de considérations de symétrie

La question que l'on peut se poser maintenant : existe-t'il des représentations de cette algèbre (des rotations dans l'espace de dimension 3 physique) dans des espaces de dimensions différentes, 1, ou 2 (qui ne représenteraient plus l'espace physique) mais qui obéirait à la même algèbre de Lie? On cherche en fait à déterminer tous les objets mathématiques (toutes les représentations) qui peuvent se transformer sous l'effet du groupe de rotation 3d et engendrer les mêmes lois de composition.

En dimension 1, la réponse est claire : non ! Il s'agirait de nombres complexes, dans le cas le plus général, qui commutent entre eux et qui ne peuvent donc vérifier une relation du type (3.30). Il n'y a donc pas de représentation de dimension 1 du groupe de rotation 3d. En revanche, il existe bien une représentation de dimension 2 du groupe des rotations 3d qui est générée par l'ensemble bien connu des matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

2. A écrire

En effet, ces 3 matrices (même nombre de générateurs que pour les représentations de dimension 3, c'est un résultat général) vérifient la même algèbre que précédemment

$$[\sigma_\eta, \sigma_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} \sigma_\beta. \quad (3.33)$$

Le problème est de donner un sens à cette espace de dimension 2 sur lequel agissent les matrices de Pauli.

Cet espace n'a rien à voir avec l'espace usuel et il n'a aucune manifestation classique. On a besoin d'aucune grandeur physique de dimension 2, qui se transforme comme une rotation de l'espace 3d, pour caractériser l'état d'un système classique. C'est l'expérience classique qui nous le dit !

La situation est radicalement différente en mécanique quantique. Une telle grandeur a fait son apparition au milieu des années 1920, les mesures spectroscopiques devenant de plus en plus précises, là où l'on ne voyait avant qu'une seule raie, on arrivait maintenant à voir 2 raies. Elles étaient tellement proches qu'elles ne semblaient n'en former qu'une avant ces progrès. Pour expliquer ces raies supplémentaires il fallait faire l'hypothèse d'une nouvelle variable d'état que l'on a appelé *spin*.

Le spin ne peut pas être écrit sous la forme $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ comme on s'y attendrait pour un moment orbital. C'est une coïncidence incroyable que le spin n'apparaisse dans la nature qu'à l'échelle quantique. Il n'y a pas de raisons conceptuelles pour laquelle il ne pourrait pas se manifester à l'échelle macroscopique mais il semblerait que la nature soit ainsi faite.

La théorie moderne des spineurs a été développée par Elie Cartan en 1910. La notion de spin en théorie quantique a été introduite en 1926 par Samuel Goudsmit et George Uhlenbeck [UG26].

Émergence à partir de l'équation relativiste de Dirac

Schrödinger lui-même, avant de trouver son équation éponyme qui décrit l'évolution de l'état d'un système quantique pur dans le cadre classique (non-relativiste), a essayé de déterminer une équation relativiste en utilisant le principe de correspondance sur l'équation de conservation de l'énergie d'une particule libre massive

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (3.34)$$

Ce faisant, il arriva, en remplaçant $E \mapsto i \hbar \partial_t$ et $\mathbf{p} \mapsto -i \hbar \nabla$, à l'équation de Klein-Gordon

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \Psi = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi. \quad (3.35)$$

Cette équation pose trois problèmes dans le cadre quantique.

Le premier, et pas des moindres, vient du fait qu'une condition initiale sur Ψ n'est pas suffisante pour déterminer Ψ à tous les temps futurs. La dérivée seconde en temps nécessite de donner $\partial_t \Psi$ à l'instant initial.

Le deuxième problème vient du fait que les solutions sous forme de modes de Fourier ($\Psi \propto \exp(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E t))$) font apparaître des solutions d'énergies négatives ce qui pose des problèmes de stabilité (il n'y a pas de niveau fondamental).

Enfin, le troisième problème avec cette équation est d'arriver à donner une interprétation probabiliste à la fonction Ψ qui en est solution. En effet, on a vu à la page 18

que le fait que $\Psi\Psi^* = |\Psi|^2$ est conservée est étroitement lié au fait que l'équation de Schrödinger est d'ordre 1 en temps ce qui permet de multiplier à gauche et à droite par Ψ^* et de faire apparaître $\partial_t(\Psi\Psi^*)$. Ceci n'est pas possible avec une équation du deuxième ordre en temps comme celle de Klein-Gordon.

L'idée de Dirac fut de transformer l'eq.(3.35) en une équation du premier ordre en temps ce qui revient, comme on le dit très abusivement parfois, à en prendre la racine carrée. Il chercha donc un opérateur du premier ordre le plus général possible

$$\hat{D} = \alpha \partial_t + \beta_i \partial_i + m c^2 \gamma \quad (3.36)$$

dont le carré correspond à l'opérateur de Klein-Gordon. Or, puisque

$$\begin{aligned} \hat{D}^2 = & \alpha^2 \partial_t^2 + (\alpha \beta_i + \beta_i \alpha) \partial_t \partial_i + m c^2 (\gamma \alpha + \alpha \gamma) \partial_t \\ & + (\beta_i \beta_j + \beta_j \beta_i) \partial_i \partial_j + m c^2 (\gamma \beta_i + \beta_i \gamma) \partial_i + m^2 c^4 \gamma^2, \end{aligned} \quad (3.37)$$

l'égalité avec l'opérateur de Klein-Gordon

$$\hbar^2 \partial_t^2 - \hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 \quad (3.38)$$

requiert les relations suivantes

$$\alpha^2 = \hbar^2, \quad (3.39)$$

$$\alpha \beta_i + \beta_i \alpha = 0, \quad (3.40)$$

$$\gamma \alpha + \alpha \gamma = 0, \quad (3.41)$$

$$\beta_i \beta_j + \beta_j \beta_i = -\hbar^2 c^2 \delta_{ij}, \quad (3.42)$$

$$\gamma \beta_i + \beta_i \gamma = 0, \quad (3.43)$$

$$\gamma^2 = 1. \quad (3.44)$$

Clairement, ces conditions ne peuvent pas être remplies si les α , β_i et γ sont des nombres (réelles ou complexes) puisqu'il y a des relations d'anti-commutation entre les α , β_i et γ . Ces coefficients doivent donc être des objets qui anti-commutent.

Des matrices peuvent anti-commuter ! Et c'est une deuxième idée de génie de Dirac que de ne pas s'être arrêté là et d'avoir chercher s'il existait des matrices vérifiant les six règles précédentes. Réponse : il en existe ! Quelle est la dimension minimale de ces matrices ? Pour répondre à cette question, remarquons que puisque $\alpha^2 = \hbar^2$ alors α a deux valeurs propres opposées $\pm\hbar$, de même, puisque $\gamma^2 = 1$ alors γ a deux valeurs propres opposées ± 1 et aussi $\beta_i^2 = -\hbar^2 c^2 / 2$ et donc les β_i ont deux valeurs propres opposées $\pm i\hbar c / \sqrt{2}$. Or, puisque ces matrices anticommulent et qu'elles sont de carré proportionnel à l'identité, elles sont de trace nulle. Ces matrices sont donc forcément de dimension paire.

On peut montrer [laissé en exercice] qu'il ne peut pas s'agir de matrices de dimension 2. On montre que la dimension minimale de ces matrices est 4. On voit donc que l'on se trouve dans l'obligation d'élargir l'espace représentant les états de particules décrites de façon quantique relativiste. Il ne s'agit plus de fonctions à valeurs complexes mais de vecteurs de fonctions complexes à 4 composantes (qui n'ont rien à voir avec les 4 dimension d'espace temps). L'équation de Dirac, dont nous venons de montrer la dérivation, s'écrit donc sous la forme

$$\alpha \partial_t \bar{\Psi} + \beta_i \partial_i \bar{\Psi} + m c^2 \gamma \bar{\Psi} = 0, \quad (3.45)$$

où $\bar{\Psi}$ est une fonction vectorielle complexe à 4 composantes.

Nous n'irons pas plus loin ici dans l'interprétation de ces 4 composantes (il s'agit en fait de 2 composantes de spin 1/2, on parle d'un bi-spineur) mais nous mentionnerons simplement que les matrices α , β_i et γ font apparaître naturellement les matrices de Pauli et c'est pour cette raison que l'on peut dire que la notion de spin 1/2 apparaît *assez naturellement* lorsque l'on essaie de faire une équation d'onde quantique relativiste avec une interprétation probabiliste.

Le spin 1/2 de certaines particules élémentaires (électrons, neutrinos, quarks, etc) vient finalement de la forme particulière de l'énergie d'une particule libre en relativité restreinte puisqu'il vient de la racine carré formelle de cette forme.

Pour finir, mentionnons que l'équation de Dirac (3.45) fait apparaître le spin 1/2 et c'est la raison pour laquelle elle est l'équation d'évolution prototype pour toutes les particules fondamentale de spin 1/2 (électron, mu, tau, et les neutrinos associés ainsi que les quarks).

En revanche, sous cette forme (3.45), l'équation de Dirac détermine l'évolution temporelle d'une fonction vectorielle complexe Ψ , comme on vient de la voir, ce qui n'est pas du tout le cadre dans lequel doit se traiter la physique relativiste des particules élémentaires. Le cadre général est celui de la théorie quantique des champs dans lequel $\bar{\Psi}$ n'est plus une fonction vectorielle mais un opérateur vectoriel qui agit sur un espace de Fock (que l'on va définir au chapitre suivant page 54).

3.5 Symétries discrètes

3.5.1 Parité-Renversement temporel

Ces notions apparaissent naturellement lorsque l'on étudie les sous groupes du groupe de Poincaré (transformation de Lorentz). Le groupe de Poincaré en entier n'est pas connexe. Il y a 4 morceaux disjoints (un seul contient l'identité) qui correspondent à $\det(\Lambda) = \pm 1$ et à $\Lambda^{00} \geq +1$ ou $\Lambda^{00} \leq -1$.

Le plus grand sous groupe connexe du groupe de Poincaré et le groupe orthochrone de Lorentz pour lequel $\det(\Lambda) = +1$ et $\Lambda^{00} \geq +1$ (il contient l'identité). Pour passer de l'un à l'autre on le fait à l'aide des transformations discrètes de parité $\hat{P} : \mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ (pour passer de $\det(\Lambda) = +1$ à $\det(\Lambda) = -1$) et de renversement temporel $\hat{T} : t \mapsto -t$ (pour passer de $\Lambda^{00} \geq +1$ à $\Lambda^{00} \leq -1$). Cela est vrai en dimension d'espace 3.

En dimension d'espace 2, la parité n'existe pas car faire la transformation $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ revient en dimension 2 à faire une rotation de 180 degré. En dimension 3 il n'y a aucune composition de rotations équivalente à $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$. Il faut donc la rajouter dans les transformations (discrètes) possibles.

To be continued.

3.6 Symétrie d'indiscernabilité

3.6.1 Bosons, fermions et anyons

Effet de la permutation de deux particules identiques sur la fonction d'onde

Considérons l'état quantique général de deux particules dans la représentation position $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$. Dans le cas où ces deux particules sont identiques (deux électrons, deux photons, etc), elles sont indiscernables et il n'y a pas moyen de distinguer la situation où 1 est remplacée par 2 et 2 est remplacée par 1 puisque les particules n'ont pas de petites vignettes avec leur identité propre (1 ou 2).

Ainsi d'un point de vue expérimental, on a la symétrie suivante (due à l'indiscernabilité)

$$|\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t)|^2. \quad (3.46)$$

On en déduit donc qu'il existe une fonction α continue telle que

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = e^{i\alpha(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t)} \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t), \quad (3.47)$$

et puisque (3.47) peut aussi s'écrire

$$\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t) = e^{i\alpha(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t)} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t), \quad (3.48)$$

on peut remplacer l'expression de $\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t)$ de (3.48) dans l'équation (3.47) et on trouve

$$e^{i2\alpha(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t)} = 1, \quad (3.49)$$

ce qui signifie que $e^{i\alpha(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t)} = +1$ ou -1 . Puisque la fonction α se doit d'être continue, le terme de phase $e^{i\alpha(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t)}$ est soit tout le temps égal à $+1$ soit tout le temps égal à -1 . Il est évidemment impossible de passer continument de l'un à l'autre.

Les particules identiques pour lesquelles

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = +\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t) \quad (3.50)$$

sont appelées des **bosons**. Les particules identiques pour lesquelles

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t) \quad (3.51)$$

sont appelées des **fermions**. Les deux types de particules existent dans la nature. En dimension 2, il peut exister des particules (en fait des quasiparticules qui correspondent à une excitation collective de plusieurs électrons dans un système bidimensionnel) intermédiaires entre bosons et fermions que l'on appelle des **anyons**. Ceux-ci ont été prédits il y a plus de 40 ans [LM77] et ont été mis en évidence expérimentale de façon indiscutable en 2020 [BKB⁺20].

Principe d'exclusion

Dans le cas particulier des fermions, la propriété d'antisymétrie de la fonction d'onde à pour conséquence l'interdiction absolue pour deux fermions de se retrouver dans le même état. En effet, si l'on impose $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ dans (3.51) on trouve

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = 0. \quad (3.52)$$

L'amplitude de probabilité pour trouver deux fermions, 1 et 2, dans le même état est rigoureusement nulle. C'est le principe d'exclusion de Pauli.

Les particules élémentaires

Les fermions sont les particules constitutives de la matière. Les particules élémentaires fermioniques sont divisées en trois familles constituées chacune de deux **leptons** (particules insensibles aux interactions fortes) et deux **quarks** (seules particules sensibles aux interactions fortes) plus les anti-particules associées.

La première famille est celle des électrons. Les deux leptons sont l'électron lui-même (e^-) et le neutrino électronique (ν_e). Les deux quarks sont le up ("u" de charge $+2/3 e$) et le down ("d" de charge $-1/3 e$). La deuxième famille est celle des muons. Les deux leptons sont le muon lui-même (μ^-) et le neutrino mu (ν_μ). Les deux quarks associés sont le charme (c) et le strange (s). La dernière famille est celle des taus. Les deux leptons sont le tau (τ^-) et le neutrino tau (ν_τ). Les deux quarks associés sont le bottom (b) et le top (t) découvert en 1995.

C'est avec la première famille que l'on construit toute la matière ordinaire. Les protons et les neutrons sont des **hadrons** (un assemblage de quarks). Il existe deux grandes classes de hadrons : les **baryons** (assemblage de trois quarks) et les **mésos** (assemblage de deux quarks). Les neutrons et les protons sont donc plus précisément des baryons. Le proton est "uud" (donc de charge $+1 e$) le neutron est "udd" (donc de charge nulle).

Les bosons véhiculent les interactions. Il y a 4 interactions fondamentales : électromagnétique, faible, forte et gravitationnelle. On va laisser la dernière de côté car sa quantification n'est toujours pas établie et elle est toujours l'objet de recherches très actives. Les 3 autres interactions, électromagnétique, faible et forte ont été unifiées dans un seul corpus : le modèle standard de la physique des particules. La quantification de ces interactions est fondée sur la théorie quantique des champs de jauge. L'électromagnétisme est une théorie de champ de jauge dont le groupe de Lie associé est $U(1)$ qui ne possède qu'un seul générateur qui correspond à une seule particule qui véhicule l'interaction : le **photon**. L'interaction faible est une théorie de champ de jauge dont le groupe de Lie associé est $SU(2)$ qui ne possède 3 générateurs qui correspondent à trois particules qui véhiculent l'interaction : les **bosons** Z^0 , W^+ et W^- . L'interaction forte est une théorie de champ de jauge dont le groupe de Lie associé est $SU(3)$ qui ne possède 8 générateurs qui correspondent à 8 particules qui véhiculent l'interaction : les **gluons**.

Le dernier boson découvert au CERN en 2012 est le **boson de Higgs** responsable, ni plus ni moins, de la masse des particules.

3.6.2 Système à deux niveaux peuplé par deux fermions de même projection de spin

Appelons p_1 et p_2 les deux fermions indiscernables (même état de spin). Les états les plus généraux de p_1 et p_2 sont donnés par

$$|\Psi_{p_1}(p_1)\rangle = a_{p_1} |E_1\rangle(p_1) + b_{p_1} |E_2\rangle(p_1), \quad (3.53)$$

$$|\Psi_{p_2}(p_2)\rangle = a_{p_2} |E_1\rangle(p_2) + b_{p_2} |E_2\rangle(p_2). \quad (3.54)$$

Pour expliciter l'état de l'ensemble des deux fermions, on construit l'état antisymétrique

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = |\Psi_{p_1}(p_1)\rangle \otimes |\Psi_{p_2}(p_2)\rangle - |\Psi_{p_1}(p_2)\rangle \otimes |\Psi_{p_2}(p_1)\rangle, \quad (3.55)$$

$$= (a_{p_1} b_{p_2} - a_{p_2} b_{p_1}) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)). \quad (3.56)$$

L'antisymétrisation ne laisse qu'un état possible pour le système (à un facteur de phase près)

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)). \quad (3.57)$$

Le système ne peut donc pas évoluer dans le temps même s'il y a interaction. L'état est intriqué. Si la particule p_1 est dans l'état $|E_1\rangle$, alors p_2 est dans l'état $|E_2\rangle$ et si la particule p_1 est dans l'état $|E_2\rangle$, alors p_2 est dans l'état $|E_1\rangle$. On résume cela par le fait que deux fermions ne peuvent se retrouver dans le même état ce qui impose l'état d'un système à deux niveaux constitué de deux fermions quoiqu'il se passe autour. Il n'en serait pas de même si l'on autorisait un niveau supplémentaire (3 niveaux) pour la même population (2 fermions). On a un degré de liberté qui peut être exploité.

3.6.3 Système à trois niveaux peuplé par deux fermions de même projection de spin

De la même manière, on comprend que l'état pur le plus général à 3 niveaux de deux fermions identiques est

$$\begin{aligned} |\Psi_{p_1 p_2}\rangle &= a(t) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)) \\ &+ b(t) (|E_2\rangle(p_1) \otimes |E_3\rangle(p_2) - |E_2\rangle(p_2) \otimes |E_3\rangle(p_1)) \\ &+ c(t) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_3\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_3\rangle(p_1)). \end{aligned} \quad (3.58)$$

On suppose qu'à $t = 0$, $a = 1$, $b = 0$ et $c = 0$. Les deux fermions sont sur les niveaux les plus bas. On se demande ce qu'il se passe si on excite le système avec une onde EM de fréquence $h\nu = E_2 - E_1$. Le fermion dans le niveau $|E_1\rangle$ peut transiter à $|E_2\rangle$ mais il y a déjà le deuxième fermion. Celui-ci va-t'il se retrouver en $|E_3\rangle$?

L'état initial du système à une énergie totale $E_1 + E_2$. Les deux autres états stationnaires possibles ont une énergie totale $E_2 + E_3$ (pour les fermions dans 2 et 3) ou $E_1 + E_3$ (pour les fermions dans 1 et 3). Seul des photons d'énergie $h\nu = E_3 - E_1$ (qui peut faire passer le fermion de 1 à 3) ou $h\nu = E_3 - E_2$ (qui peut faire passer le fermion de 2 à 3) sont résonants et amènent à un état stationnaire.

C'est là que l'on voit que la chronologie des photons est importante. Supposons que l'on parte de la situation (1,2) pour les fermions. Imaginons que le rayonnement est d'abord fait de photons $h\nu = E_2 - E_1$ et ensuite de photons $h\nu = E_3 - E_2$ (modification du spectre au cours du temps). les premiers photons ne font rien puisque l'état 2 est saturé. Les deuxièmes photons en revanche permettent la transition de l'état 2 vers 3. Pour cette variation du spectre, on se retrouve donc avec un état (1,3).

Dans le cas inverse, où le rayonnement est d'abord fait de photons $h\nu = E_3 - E_2$ et ensuite de photons $h\nu = E_2 - E_1$, on constate que les premiers permettent la transition de l'état 2 vers 3 (libération de l'état 2) et les deuxièmes permettent la transition de l'état 1 vers 2. Pour cette nouvelle variation du spectre, on se retrouve donc avec un état (2,3).

Les mêmes photons amenés dans un ordre différents produisent des effets différents.

To be continued

Chapitre 4

Cours #4 : oscillateur harmonique, perturbations, deuxième quantification (exemple du champ électromagnétique)

4.1 Oscillateur harmonique en mécanique quantique et énergie du vide

4.1.1 Oscillateur harmonique et son spectre

Définition de l'oscillateur harmonique

L'oscillateur harmonique est un des systèmes exactement soluble de la mécanique quantique. Il est bien sûr intéressant de l'étudier à ce titre, mais on va voir qu'il a des applications très concrètes. La première est l'étude d'un système quantique autour d'une position d'équilibre.

En effet, aussi complexe que puisse être le potentiel $V(x)$ global dans lequel évolue un système quantique, localement, autour d'une position d'équilibre, x_e , il est toujours possible d'approximer V au voisinage de x_e par une parabole puisque

$$V(x) = V(x_e) + (x - x_e) V'(x_e) + \frac{1}{2}(x - x_e)^2 V''(x_e) + O(x - x_e)^3. \quad (4.1)$$

Or, comme x_e est une position d'équilibre, cela signifie que $V'(x_e) = 0$ et puisque V n'est défini qu'à une constante près, on peut tout à fait, sans perte de généralité, redéfinir le niveau zéro de l'énergie en posant $V(x_e) = 0$. Ainsi, au voisinage d'un équilibre,

$$V(x) \approx \frac{1}{2}(x - x_e)^2 V''(x_e) = \frac{1}{2} K X^2, \quad (4.2)$$

où l'on a appelé $K = V''(x_e)$, qui correspond à la raideur du ressort équivalent, et $X = x - x_e$ qui correspond à la déviation à la position d'équilibre.

La valeur de K n'est pas simple à déterminer théoriquement mais on peut tout à fait la déterminer expérimentalement comme on le verra au TD4 dans le cas de l'étude des mouvements de vibration de la molécule de monoxyde de carbone (CO).

L'Hamiltonien d'un tel système harmonique est donc $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} K X^2$ que l'on réécrit souvent de la façon suivante

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2, \quad (4.3)$$

en posant $K = m \omega^2$ où ω , ainsi défini, correspond à la pulsation naturelle d'oscillation de l'oscillateur de raideur K et de masse m . Il ne faut pas oublier, bien évidemment, que

$$[X, P] = i\hbar. \quad (4.4)$$

On sait qu'il est tout à fait possible de résoudre le problème aux valeurs propres de ce Hamiltonien en cherchant les fonctions d'ondes solutions de $\frac{1}{2m} \Delta \Psi_n(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x)$. Cette façon analytique permet de déterminer l'expression des $\Psi_n(x)$, qui est rarement d'une grande utilité.

On va, ici, revoir la méthode algébrique, beaucoup plus élégante mais surtout beaucoup plus instructive et utile pour les applications.

Opérateurs de création et d'annihilation

On part de l'expression (4.3) que l'on peut adimensionner en posant $X = \sqrt{\hbar/m\omega} \tilde{X}$ et $P = \sqrt{\hbar m \omega} \tilde{P}$ de sorte que

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (\tilde{P}^2 + \tilde{X}^2), \quad (4.5)$$

$$[\tilde{X}, \tilde{P}] = i. \quad (4.6)$$

Si on définit alors les deux opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger , respectivement opérateur d'*annihilation* et de *création*, dont on verra l'intérêt un peu plus tard, comme

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} + i\tilde{P}), \quad (4.7)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} - i\tilde{P}), \quad (4.8)$$

il est simple de montrer que

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2} (\tilde{X} - i\tilde{P})(\tilde{X} + i\tilde{P}), \quad (4.9)$$

$$= \frac{1}{2} (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2 + i[\tilde{X}, \tilde{P}]), \quad (4.10)$$

$$= \frac{1}{2} (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2 - 1), \quad (4.11)$$

et de la même façon, que

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2} (\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2 + 1). \quad (4.12)$$

On peut donc réécrire l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique (en utilisant (4.11) dans (4.5)) comme

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.13)$$

et on constate (en calculant la différence entre (4.12) et (4.11)) que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (4.14)$$

qui est la manifestation de la relation d'incertitude de Heisenberg. On constate que c'est le "-1" qui est apparu dans l'équation (4.11), et qui vient de la non-commutation de X et P et donc du principe d'incertitude, qui est responsable du $1/2$ dans l'éq.(4.13) dont on verra l'importance fondamentale dans la nature.

Spectre de l'oscillateur harmonique

Notons, comme il est d'usage, l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ qui est apparu dans l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique. Clairement, cet opérateur est hermitien puisque $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ [à faire en exercice]. Cet opérateur est donc diagonalisable avec des valeurs propres réelles. Il y a quelques propriétés spécifiques à \hat{N} , \hat{a} et \hat{a}^\dagger que l'on peut extraire de la section précédente :

(i) Les valeurs propres de \hat{N} sont en fait réelles, positives ou nulles ! En effet, si on note $n_\alpha \in \mathbb{R}$ et $|\Psi_\alpha\rangle$ respectivement une valeur propre de \hat{N} et le ket associé, alors

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\Psi_\alpha\rangle = \hat{N} |\Psi_\alpha\rangle = n_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \quad (4.15)$$

et donc $n_\alpha = \langle \Psi_\alpha | \hat{N} | \Psi_\alpha \rangle = \langle \Psi_\alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \Psi_\alpha \rangle = |\hat{a} | \Psi_\alpha \rangle|^2 \geq 0$.

(ii) De la dernière relation, on voit que si $n_\alpha = 0$ alors forcément $\hat{a} | \Psi_\alpha \rangle = 0$. D'autres parts, en utilisant la relation de commutation (4.14) qui lie \hat{a} et \hat{a}^\dagger et l'équation aux valeurs propres (4.15), on constate que si $n_\alpha > 0$ alors $\hat{a} | \Psi_\alpha \rangle$ est vecteur propre de \hat{N} pour la valeur propre $(n_\alpha - 1)$ et $\hat{a}^\dagger | \Psi_\alpha \rangle$ est vecteur propre de \hat{N} pour la valeur propre $(n_\alpha + 1)$ [à faire en exercice].

A partir de ces deux propriétés, il est possible, de façon très élégante, de déterminer le spectre de \hat{N} et donc celui de l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique.

Notons $n \in \mathbb{R}^{*+}$, une valeur propre particulière strictement positive (d'après (i)) associée au vecteur propre $|\Psi\rangle$. Alors, grâce à (ii) on sait que $\hat{a} | \Psi \rangle$ est aussi vecteur propre de \hat{N} de valeur propre $n - 1$ et donc, par récurrence, que $\hat{a}^p | \Psi \rangle$ (où $p \in \mathbb{N}^*$) est vecteur propre de \hat{N} de valeur propre $n - p$. De là, on constate que si n n'est pas lui même entier, il existe une valeur de $p \in \mathbb{N}^*$ au delà de laquelle $n - p$ devient négatif. Or, on sait d'après (i) que les valeurs propres doivent être positives. En revanche, si n est lui même entier positif, on sait que lorsque $p = n$, $\hat{a}^n | \Psi \rangle$ est un vecteur propre de \hat{N} de valeur propre nulle et toutes les itérations suivantes, $\hat{a}^p | \Psi \rangle$ pour $p > n$, resteront bloquées à la valeur propre nulle. On en déduit donc, par l'absurde, qu'une valeur propre de \hat{N} est forcément entière.

Soit $|0\rangle$ le vecteur propre de \hat{N} de valeur propre 0. L'application successive de n opérateurs \hat{a}^\dagger à $|0\rangle$ (d'après (ii)) génère $|n\rangle$ qui est un vecteur propre de \hat{N} de valeur

propre n , c'est à dire

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle. \quad (4.16)$$

C'est la raison pour laquelle, les énergies propres de l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique, sont associées aux kets propres $|n\rangle$ et valent

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.17)$$

où $n \in \mathbb{N}$. Le terme $1/2 \hbar\omega$ a une importance fondamentale comme on le verra par la suite dans notre vie de tous les jours. Il est du aux fluctuations du vide quantique comme nous allons le faire apparaître dans la section suivante. Le *repos complet* n'existe pas à l'échelle quantique.

Pour finir, on sait que $\hat{a} |n\rangle = c_n |n-1\rangle$. Or, $|\hat{a} |n\rangle|^2 = |c_n|^2 = \langle n | \hat{N} |n\rangle = n$ donc $c_n = \sqrt{n}$ avec le bon choix de phase. De la même façon, on sait que $\hat{a}^\dagger |n\rangle = c'_n |n+1\rangle$. Or, $|\hat{a}^\dagger |n\rangle|^2 = |c'_n|^2 = \langle n | (\hat{N} + 1) |n\rangle = n + 1$ donc $c'_n = \sqrt{n+1}$ avec le bon choix de phase. De là, on déduit

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (4.18)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad (4.19)$$

4.1.2 Origine de l'énergie du vide avec les mains

Revenons à l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique unidimensionnel eq.(4.3). Le fait qu'il s'agisse d'un oscillateur 1D n'a pas d'influence sur le raisonnement qui suit.

Classiquement, il est tout a fait possible d'avoir $P = 0$ et $X = 0$, c'est l'oscillateur au repos à sa position d'équilibre. Maintenant, d'un point de vu quantique, appelons l'état de l'oscillateur *au repos* $|\Psi\rangle$. Cet état est tel que $\langle \Psi | \hat{X} | \Psi \rangle = \langle X \rangle = 0$ et $\langle \Psi | \hat{P} | \Psi \rangle = \langle P \rangle = 0$. On peut alors prendre le Hamiltonien (4.3) en sandwich entre $\langle \Psi |$ et $|\Psi\rangle$ et on obtient

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta P)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta X)^2, \quad (4.20)$$

où $(\Delta X)^2 = \langle \Psi | \hat{X}^2 | \Psi \rangle$, $(\Delta P)^2 = \langle \Psi | \hat{P}^2 | \Psi \rangle$ et $\langle H \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$. Or, le principe d'incertitude sur X et P impose

$$\Delta P \Delta X \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (4.21)$$

De là, on en déduit, que l'énergie moyenne d'un état quantique de l'oscillateur harmonique, quel-que soit cet état, est toujours strictement positive (elle ne peut jamais être nulle, il n'y a pas d'état de *repos* de l'oscillateur quantique) car

$$\langle H \rangle \geq \frac{(\Delta P)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8} \frac{m \omega^2}{(\Delta P)^2}. \quad (4.22)$$

Il est facile de déterminer la valeur minimale du membre de droite de (4.22) [à faire en exercice] qui arrive lorsque $\Delta P = \sqrt{\hbar m \omega / 2}$ ce qui veut dire que

$$\langle H \rangle \geq \frac{\hbar \omega}{2}, \quad (4.23)$$

l'égalité n'ayant lieu que lorsque $|\Psi\rangle = |0\rangle$ comme on peut le voir sur la formule (4.17). L'énergie moyenne minimale d'un oscillateur quantique de fréquence naturelle ω n'est pas 0, comme en mécanique classique, mais elle vaut $\frac{\hbar \omega}{2} > 0$. Cette quantité, $\hbar \omega / 2$ est appelée l'énergie du vide du mode ω .

4.2 Quantification du champ électromagnétique

4.2.1 Le champ électromagnétique classique dans le vide

De prime abord, il y a une différence fondamentale entre un atome et le champ électromagnétique lorsqu'il s'agit de quantification. Le nombre d'atomes dans un système va rester constant quelque soient les conditions thermodynamiques. Cela n'est pas du tout vrai pour le rayonnement (le champ électromagnétique) : la distribution du corps noir en est la preuve. En augmentant la température, on change l'énergie des photons mais on change aussi le nombre de photons [en exercice, calculer ce nombre à l'aide de la distribution de Planck]. Le nombre de photons augmente. Il y a donc création de photons. La première quantification, que l'on a vu jusque là, ne s'applique pas à un système dont le nombre de particules peut varier.

Afin de comprendre comment on quantifie le champ électromagnétique, revenons rapidement sur sa description classique afin de remarquer que les oscillateurs harmoniques apparaissent de façon naturelle.

Le rayonnement électromagnétique (\mathbf{E}, \mathbf{B}) est décrit par les équations de Maxwell dans le vide

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.24)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}, \quad (4.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (4.26)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \partial_t \mathbf{E}. \quad (4.27)$$

De là, on peut écrire qu'il existe un potentiel scalaire Φ et un potentiel vecteur \mathbf{A} qui vérifient

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi - \partial_t \mathbf{A}, \quad (4.28)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (4.29)$$

mais il n'y pas unicité de (Φ, \mathbf{A}) pour un champ électromagnétique donné. Le système (4.28-4.29) reste invariant par la symétrie de jauge, responsable de la conservation de la

charge électrique, qui transforme Φ et \mathbf{A} de la façon suivante

$$\Phi' = \Phi - \partial_t \Lambda, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda, \quad (4.31)$$

et cela quelque soit le champ scalaire Λ . Fixer la jauge, consiste à imposer une équation scalaire supplémentaire sur les champs Φ et \mathbf{A} . Il existe une infinité de façons de fixer la jauge mais un certain nombre sont plus pratiques que d'autres. Celle qui va nous intéresser ici est la jauge de Coulomb qui consiste à imposer que

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (4.32)$$

Dans cette jauge, on montre que $\Phi = 0$ car la divergence de (4.28) donne

$$\Delta \Phi = -\partial_t(\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0. \quad (4.33)$$

En imposant les condition de $\Phi = 0$ à l'infini, l'équation de Laplace sur Φ impose que

$$\Phi = 0 \quad (4.34)$$

partout. Dans la jauge de Coulomb, le champ électromagnétique peut être décrit par le seul potentiel vecteur \mathbf{A} de la façon suivante

$$\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (4.36)$$

Les équations de Maxwell se réduisent donc à

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (4.37)$$

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{A} - \nabla^2 \mathbf{A} = 0. \quad (4.38)$$

La solution la plus générale de cette équation d'onde (avec la condition d'orthogonalité) est donc

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, s} \left(A_{\mathbf{k}, s}(t) e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + A_{\mathbf{k}, s}^*(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \mathbf{u}_{\mathbf{k}, s}, \quad (4.39)$$

où les $\mathbf{u}_{\mathbf{k}, s}$ sont des vecteurs perpendiculaires à \mathbf{k} , afin de satisfaire à la condition $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, et où les $A_{\mathbf{k}, s}(t)$ doivent vérifier

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}, s}(t) + \omega_k^2 A_{\mathbf{k}, s}(t) = 0. \quad (4.40)$$

La solution générale peut donc se réduire à

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, s} \left(A_{\mathbf{k}, s} e^{+i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \omega_k t)} + A_{\mathbf{k}, s}^* e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \omega_k t)} \right) \mathbf{u}_{\mathbf{k}, s}, \quad (4.41)$$

mais on va continuer à utiliser la solution (4.39) dans la suite pour faire apparaître de façon plus claire les oscillateurs harmoniques dans le champ électromagnétique se propageant dans le vide qui, jusqu'à présent, sont encore bien cachés !

Pour chaque \mathbf{k} , les vecteurs $\mathbf{u}_{\mathbf{k},s}$ sont au nombre de 2 (nombre de vecteurs qu'il faut pour former une base d'un espace de dimension 2, le plan perpendiculaire à \mathbf{k}). Cela signifie que s court sur 2 valeurs qui sont les deux polarisations du champ électromagnétique.

La forme générale du champ électromagnétique est donc

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = - \sum_{\mathbf{k},s} \left(\dot{A}_{\mathbf{k},s}(t) e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \dot{A}_{\mathbf{k},s}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right) \mathbf{u}_{\mathbf{k},s}, \quad (4.42)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = i \sum_{\mathbf{k},s} \left(A_{\mathbf{k},s}(t) e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - A_{\mathbf{k},s}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right) \mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k},s}. \quad (4.43)$$

L'énergie contenue dans le champ électromagnétique sur tout l'espace est donnée classiquement par

$$H = \int d^3\mathbf{x} \left(\frac{\varepsilon_0}{2} \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{B}^2 \right). \quad (4.44)$$

C'est cette énergie, que l'on a appelée H à dessein, qui va devenir le hamiltonien du champ électromagnétique. Pour déterminer son expression en fonction des $A_{\mathbf{k},s}$, on injecte les expressions (4.42-4.43) dans le hamiltonien (4.44). Pour mener les calculs à bout, il y a un ingrédient essentiel à garder en tête :

$$\int d^3\mathbf{x} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k}). \quad (4.45)$$

Les intégrations en volume des \mathbf{E}^2 et \mathbf{B}^2 font apparaître des $\delta^3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$ ou des $\delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, et après quelques calculs simples mais un peu longs (faits en classe et à retravailler à la maison), on trouve

$$H = \frac{\varepsilon_0}{2} (2\pi)^3 \times 4 \sum_{\mathbf{k},s} \left(|\dot{A}_{\mathbf{k},s}(t)|^2 + \omega_k^2 |A_{\mathbf{k},s}(t)|^2 \right). \quad (4.46)$$

On peut alors écrire les fonctions complexes du temps $A_{\mathbf{k},s}$ comme la somme de leur partie réelle et imaginaire de sorte que

$$A_{\mathbf{k},s}(t) = A_{\mathbf{k},s}^{(r)}(t) + i A_{\mathbf{k},s}^{(i)}(t) \quad (4.47)$$

où les fonctions $A_{\mathbf{k},s}^{(r)}, A_{\mathbf{k},s}^{(i)} \in \mathbb{R}$. Le hamiltonien précédent se transforme alors comme

$$H_{\text{EM}} = 2\varepsilon_0 (2\pi)^3 \sum_{\mathbf{k},s} \left((\dot{A}_{\mathbf{k},s}^{(r)}(t))^2 + \omega_k^2 (A_{\mathbf{k},s}^{(r)}(t))^2 \right) + \left((\dot{A}_{\mathbf{k},s}^{(i)}(t))^2 + \omega_k^2 (A_{\mathbf{k},s}^{(i)}(t))^2 \right), \quad (4.48)$$

on l'on reconnaît le hamiltonien d'une somme infinie (sur \mathbf{k}) d'oscillateurs harmoniques qui ne portent plus, ici, sur la position et la vitesse mais sur l'amplitude du champ \mathbf{A} (équivalent de la position) et sa dérivée temporelle $\dot{\mathbf{A}}$ (équivalent de la vitesse ou de la quantité de mouvement). Pour voir l'analogie de façon plus évidente, on peut faire apparaître l'équivalent de la position q et de la quantité de mouvement $p = \dot{q}$ qui donnent dans le cas de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique (OH) classique

$$H_{\text{OH}} = \frac{1}{2} \dot{q}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 q^2. \quad (4.49)$$

Ainsi, si l'on pose

$$A_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}(t) = \frac{Q_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}(t)}{2\sqrt{\varepsilon_0} (2\pi)^3}, \quad (4.50)$$

$$\dot{A}_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}(t) = \frac{P_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}(t)}{2\sqrt{\varepsilon_0} (2\pi)^3}, \quad (4.51)$$

on trouve

$$H_{\text{EM}} = \sum_{\mathbf{k},s} \left(\frac{1}{2} (P_{\mathbf{k},s}^{(r)}(t))^2 + \frac{1}{2} \omega_k^2 (Q_{\mathbf{k},s}^{(r)}(t))^2 \right) + \left(\frac{1}{2} (P_{\mathbf{k},s}^{(i)}(t))^2 + \frac{1}{2} \omega_k^2 (Q_{\mathbf{k},s}^{(i)}(t))^2 \right), \quad (4.52)$$

dont la quantification a été faite à la section précédente sur l'oscillateur harmonique classique.

4.2.2 Seconde quantification et espace de Fock : application au champ électromagnétique

Afin de retrouver la même quantification que l'oscillateur harmonique, il faut dans un premier temps élever les $P \propto \dot{A}$ et $Q \propto A$ du champ électromagnétique au rang d'opérateurs comme on l'a fait en première quantification.

On impose ensuite l'hypothèse de non-commutation de P et Q , pour que ces variables soient soumises au principe d'incertitude, c'est à dire

$$[Q_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}, P_{\mathbf{k},s}^{(r/i)}] = i\hbar. \quad (4.53)$$

Sous ces hypothèses, on a donc

$$\hat{H}_{\text{EM}} = \sum_{\mathbf{k},s} \hbar \omega_k \left(\hat{a}_{\mathbf{k},s} \hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger + \frac{1}{2} \right), \quad (4.54)$$

où, bien-sûr, on peut substituer $\sum_{\mathbf{k},s}$ par $\sum_s \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$. De même, on peut déterminer l'impulsion du champ électromagnétique, donnée par le vecteur de Poynting, qui prend la valeur classique

$$\mathbf{P}_{\text{EM}} = \int d^3\mathbf{x} \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{2\mu_0}, \quad (4.55)$$

qui se transforme de façon quantique en

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{EM}} = \sum_{\mathbf{k},s} \hbar \mathbf{k} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},s} \hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger + \frac{1}{2} \right). \quad (4.56)$$

La question maintenant est de savoir sur quoi agissent les opérateurs \hat{H}_{EM} , $\hat{\mathbf{P}}_{\text{EM}}$, $\hat{a}_{\mathbf{k},s}$ et $\hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger$?

Comme on l'a vu, lors de la description du spectre de l'oscillateur harmonique, les \hat{a} et \hat{a}^\dagger agissent sur les kets $|0\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ jusqu'à l'infini, qui correspondent au nombre

de *quantas* associés à l'oscillateur harmonique de fréquence naturelle ω . Il faut rappeler que les $|0\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ peuvent être décrits par des fonction de x très compliquées, dans le cas de l'OH, dont, heureusement, nous n'avons absolument pas besoin de connaître la forme explicite. Seuls leurs actions sur les kets, que l'on a explicité en (4.18-4.19), est importante.

Ici, le champs électromagnétique est une somme infinie d'oscillateurs harmonique. Chacun de ces oscillateurs à une fréquence naturelle $\omega_{\mathbf{k}}$ que l'on a repéré par \mathbf{k} qui peuvent prendre toutes les directions et amplitude que lui autorisent les conditions aux limites (dues au volume dans lequel on considère le champ EM). Dans une boite carrée de taille L , par exemple, $\mathbf{k} = 2\pi/L \mathbf{n}$ où $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{Z}^3$.

Considérons, pour quelques instants, un seul de ces oscillateurs associé au vecteur d'onde \mathbf{k} (on a $\omega_{\mathbf{k}} = c k$ puisque l'on étudie le champ EM dans le vide). Les opérateurs de création et d'annihilation, resp. $\hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger$ et $\hat{a}_{\mathbf{k},s}$, vont agir sur les $|0\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ associés à \mathbf{k} et s . Il est donc utiles de labelliser ces états par \mathbf{k} et s

$$|0_{\mathbf{k},s}\rangle, \dots, |n_{\mathbf{k},s}\rangle, \dots, \quad (4.57)$$

pour se rappeler quels opérateurs agissent sur eux. L'état $|n_{\mathbf{k},s}\rangle$ correspond à $n_{\mathbf{k},s} \in \mathbb{N}$ quantas du mode EM d'impulsion \mathbf{k} et de polarisation s .

Maintenant, ayant en tête que le champ EM est une somme infinies de ces oscillateurs, un état propres de l'hamiltonien et de l'impulsion du champ EM est donné par un produit tensoriel infini de ces états quantiques individuels d'oscillateurs

$$|\Psi\rangle_{\text{EM}} = \otimes_{\mathbf{k},s} |n_{\mathbf{k},s}\rangle, \quad (4.58)$$

et l'état quantique général du champ EM est une combinaison linéaire quelconque d'état de ce type. Cet espace abstrait est appelé espace de Fock du nom de Vladimir Fock qui a décrit cet espace et cette méthode de quantification (appelée deuxième quantification) en 1932.

Les oscillateurs du champ EM génèrent ses excitations que l'on appelle les photons. A titre d'exemple, citons l'état du champ EM, $|n_{\mathbf{k},s}\rangle$, qui décrit un état où $n_{\mathbf{k},s} \in \mathbb{N}$ photons ont tous une même impulsion \mathbf{k} et une même polarisation s . On peut aussi citer l'état $|n_{\mathbf{k},s}\rangle \otimes |n'_{\mathbf{k}',s'}\rangle$ qui décrit un état avec $n_{\mathbf{k},s} \in \mathbb{N}$ photons d'impulsion \mathbf{k} et de polarisation s et $n'_{\mathbf{k}',s'} \in \mathbb{N}$ photons d'impulsion \mathbf{k}' et de polarisation s' . La généralisation est évidente.

4.2.3 Exemple de l'émission spontanée et stimulée et spectre du corps noir retrouvé

Dans un cours introductif à la mécanique quantique, on entend souvent dire, et c'est totalement vrai, qu'un système qui est préparé dans un état propre de l'Hamiltonien va rester dans cet état propre ad-vitam æternam à moins qu'il ne soit perturbé par une cause extérieure.

A peu près au même moment, on apprend à déterminer les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène, qui sont les états propres de son Hamiltonien. On serait tenté de se dire, et beaucoup se le disent après ces introductions, qu'un électron dans un état propre de l'Hamiltonien de l'atome d'hydrogène (supposons pour l'exemple, dans l'état 2s qui

est un état excité) devrait rester dans cet état, qui est un état stationnaire, ad-vitam æternam. Or, on le sait par expérience, un électron dans un état excité (2s ou un autre) ne reste jamais très longtemps dans cet état et fini invariablement par revenir dans l'état fondamental (1s et lui seul) en émettant 1 ou plusieurs photons suivant le niveau initial dans lequel l'électron se trouvait initialement.

Où est donc le problème dans ce raisonnement, où une ou plusieurs erreurs se sont glissées, qui mène à cette conclusion absurde ?

En fait, l'Hamiltonien de l'atome d'hydrogène dont on parle dans les cours introductifs est l'Hamiltonien de la partie matière (le noyau plus les électrons) dans lequel on omet une partie fondamentale (mais plus difficile à prendre en compte dans un cours introductif) : le champ électromagnétique. Le système "atome" ne peut pas être dissocié du champ électromagnétique car les électrons sont sensibles au champ EM et les courants électroniques créent du champ EM.

Le Hamiltonien de l'atome d'hydrogène est en fait composé de trois parties

$$H = H_{\text{mat}} + H_{\text{EM}} + H_{\text{int}}, \quad (4.59)$$

le Hamiltonien de la matière H_{mat} (que l'on apprend dans les cours introductifs, électrons, noyau et leurs interactions Coulombiennes), le Hamiltonien du champ EM, H_{EM} , que l'on a déterminé à l'eq.(4.54), et le Hamiltonien H_{int} de l'interaction entre la matière et le champ EM.

Ce dernier vient du Hamiltonien d'interaction classique $j^\mu A_\mu$ qui est responsable des termes source dans les équations de Maxwell classique où μ correspond aux quatre composantes d'espace temps $j^0 = \rho$ (est la densité de charge) qui se couple à $A_0 = V$ le potentiel électrique et où \mathbf{j} est le vecteur courant de charge qui se couple à \mathbf{A} , le potentiel vecteur. Dans la jauge de Coulomb, $V = 0$, donc le Hamiltonien d'interaction est donné par $\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ que l'on peut réécrire $\frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ où \mathbf{p} est la quantité de mouvement de l'électron. Ainsi

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{cm} \sum_{\mathbf{k},s} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},s} A_{\mathbf{k},s} \mathbf{u}_{\mathbf{k},s} + \hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger A_{\mathbf{k},s}^* \mathbf{u}_{\mathbf{k},s} \right) \cdot \mathbf{p}, \quad (4.60)$$

$$= H_{\text{abs}} + H_{\text{em}} \quad (4.61)$$

qui est la somme d'un Hamiltonien d'absorption H_{abs} (qui dépend de l'opérateur d'annihilation $\hat{a}_{\mathbf{k},s}$) et d'un Hamiltonien d'émission H_{em} (qui dépend de l'opérateur de création $\hat{a}_{\mathbf{k},s}^\dagger$).

En l'absence du Hamiltonien d'interaction, les électrons ne verraient pas le champ EM et le champ EM ne verrait pas les électrons et les deux espèces pourraient vivre librement sans se voir. Ainsi, un état propre du H_{mat} serait réellement stationnaire. Un état propre du H_{EM} (dans l'espace de Fock) serait aussi stationnaire et garderait la même quantité de photons de même nature. Le fait que $H_{\text{int}} \neq 0$ change tout !

Si on appelle $|E_n\rangle$ les états propres de H_{mat} (il s'agit des états propres bien connus de l'atome d'hydrogène avec $E_n = -13.6/n^2$ eV) et $|n_{\mathbf{k},s}\rangle$ les états stationnaires de l'espace de Fock (état à $n_{\mathbf{k},s}$ photons d'impulsion \mathbf{k} et de polarisation s), on peut donc écrire l'état fondamental de l'atome d'hydrogène

$$|E_1\rangle \otimes |0\rangle, \quad (4.62)$$

où l'électron est dans son niveau fondamental ($n=1$) et où le rayonnement est aussi dans son niveau fondamental $|0\rangle$ (avec zéro photon). Cet état est le seul vrai état stationnaire.

Étudions maintenant la transition d'un état initial $|I\rangle = |E_i\rangle \otimes |n_{\mathbf{k},s}\rangle$ vers un état final $|F\rangle = |E_f\rangle \otimes |n'_{\mathbf{k}',s'}\rangle$. On souhaite déterminer la probabilité P_{IF} de transiter de l'état initial $|I\rangle$ vers l'état final $|F\rangle$. On utilise pour cela la règle d'or de Fermi qui stipule que

$$P_{IF} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle I | H_{\text{int}} | F \rangle|^2 \delta(E_F - E_I). \quad (4.63)$$

L'élément essentiel est le calcul de l'amplitude de transition

$$\langle I | H_{\text{int}} | F \rangle = \langle n_{\mathbf{k},s} | \otimes \langle E_i | H_{\text{int}} | E_f \rangle \otimes |n'_{\mathbf{k}',s'}\rangle \quad (4.64)$$

que l'on peut expliciter en utilisant la relation (4.60). Puisque les \hat{a} et \hat{a}^\dagger n'agissent que sur les éléments $|n\rangle$ de l'espace de Fock et par sur les $|E\rangle$ et puisque $\hat{\mathbf{p}}$ n'agit que sur les $|E\rangle$ et pas sur les $|n\rangle$ on tire

$$\langle I | H_{\text{int}} | F \rangle = -\frac{e}{cm} \left[A_{\mathbf{k},s} \langle n_{\mathbf{k},s} | n'_{\mathbf{k}',s'} - 1 \rangle \sqrt{n'_{\mathbf{k}',s'}} \right. \quad (4.65)$$

$$\left. + A_{\mathbf{k},s}^* \langle n_{\mathbf{k},s} | n'_{\mathbf{k}',s'} + 1 \rangle \sqrt{n'_{\mathbf{k}',s'} + 1} \right] \langle E_i | \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k},s} | E_f \rangle. \quad (4.66)$$

De là, on constate que $\langle I | H_{\text{int}} | F \rangle$ est non nul si et seulement si

$$|n_{\mathbf{k},s}\rangle = |n'_{\mathbf{k}',s'} - 1\rangle, \quad (4.67)$$

dans le cas où on a *émission* d'un photon, ou

$$|n_{\mathbf{k},s}\rangle = |n'_{\mathbf{k}',s'} + 1\rangle, \quad (4.68)$$

dans le cas où on a *absorption* d'un photon. Dans tous les autres cas, à l'ordre le plus faible dans les perturbations (transition dipolaire), l'amplitude de transition est nulle. Ce résultat, en soit, est déjà très important. Les transitions atomiques ne se font, à l'ordre le plus bas, qu'à l'aide d'un seul photon (transition dipolaire). Il existe des transitions multi-photoniques mais qui sont à un ordre plus élevé (****).

On voit donc que les amplitudes de transition d'absorption et d'émission sont

$$P_{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{c^2 m^2} |A_{\mathbf{k},s}|^2 n_{\mathbf{k},s} |\langle E_i | \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k},s} | E_f \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega), \quad (4.69)$$

$$P_{\text{em}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{c^2 m^2} |A_{\mathbf{k},s}|^2 (n_{\mathbf{k},s} + 1) |\langle E_i | \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k},s} | E_f \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega). \quad (4.70)$$

Si initialement il n'y a aucun photon, $n_{\mathbf{k},s} = 0$, la probabilité d'absorption est nulle. En effet, sans photon pré-existant, aucun ne peut être absorbé. En revanche, il n'en n'est pas de même pour l'émission.

Même si initialement il n'y avait aucun photon, la probabilité d'émission est non-nulle. C'est typiquement ce qu'il se passe lorsqu'un atome est dans un état excité (un électron sur un niveau $n > 1$), même en l'absence de photon initialement, l'atome va se désexciter spontanément en émettant un photon. On appelle ce processus *émission spontanée*. Lorsqu'initialement le nombre de photons $n_{\mathbf{k},s} \neq 0$ une émission est possible et

un photon supplémentaire apparaît. Il s'agit là du processus d'*émission stimulée*. Ainsi, si $n_{\mathbf{k},s} = 0$ c'est de l'émission spontanée et si $n_{\mathbf{k},s} > 0$ c'est de l'émission stimulée.

Maintenant, supposons qu'un matériau chauffé est à l'équilibre thermodynamique à une température T uniforme (dans tout l'échantillon). On s'attend, à l'équilibre, à avoir autant d'absorption que d'émission. Sur la transition spécifique étudiée précédemment (entre $|I\rangle$ et $|F\rangle$), cela revient à dire que

$$N_{E^-} P_{\text{abs}} = N_{E^+} P_{\text{em}}. \quad (4.71)$$

On en déduit donc que

$$\frac{P_{\text{abs}}}{P_{\text{em}}} = \frac{N_{E^+}}{N_{E^-}} = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}. \quad (4.72)$$

Or, $P_{\text{abs}}/P_{\text{em}} = n/(n+1)$ d'après (4.69-4.70), d'où on retrouve

$$n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (4.73)$$

qui est le nombre de photon de fréquence ω dans un domaine chauffé à la température T qui permet de retrouver le spectre du corps noir du chapitre 1 page 8.

Chapitre 5

Cours #5 : Bizarreries de la mécanique quantique et quelques unes de leurs applications

5.1 Comment fabrique-t-on des photons intriqués ou des photons uniques expérimentalement ?

Le dispositif décrit dans cette section est celui imaginé et utilisé par Alain Aspect et ces collaborateurs pour réaliser les expériences éponymes de années 80.

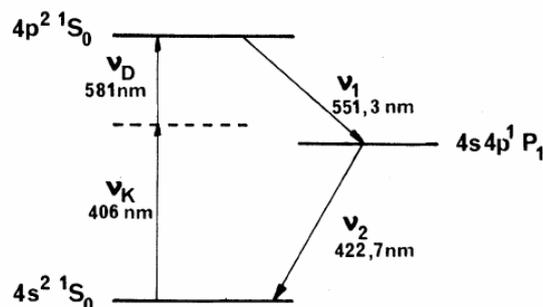


FIGURE 5.1 – Cascade atomique du calcium 40 pour créer une paire de photons, ν_1 et ν_2 , intriqués par la polarisation (Image de A. Aspect PRL 1981).

La source de photons est un faisceau atomique de calcium 40 qui est irradié par deux lasers (l'un, Krypton, avec $\lambda_K = 406.7$ nm, et l'autre à colorant [rhodamine 6G] dont la longueur d'onde peut être ajustée entre 560 nm [jaune-vert] et 635 nm [rouge-orange] et qui est réglé à 581 nm dans l'expérience) de sorte que la somme des énergies des deux types de photons permettent, par absorption à deux photons (c'est un effet non-linéaire), de faire passer les calcium 40 du niveau $4s^2 1S_0$ à $4p^2 1S_0$ pour que la cascade à deux photons corrélés (en passant par le niveau intermédiaire $4s4p^1 P_1$) puisse se produire. La corrélation, qui s'entend, ici, par la polarisation rend possible la réalisation de l'expérience de EPR.

Ce dispositif permet aussi de générer des photons uniques pour faire des expériences d'interférence avec un photon unique. Mais comment s'assurer, expérimentalement, que l'on génère bien des photons uniques? On teste le générateur de photons de la façon suivante. On fait passer le rayonnement par deux fentes d'Young (F_1 et F_2). De l'autre côté des fentes on dispose un détecteur capable d'enregistrer les photons qui passent par F_1 et ceux qui passent par F_2 . Si l'on appelle p_c la probabilité de coïncidence, c'est à dire la probabilité que la partie en regard de F_1 et la partie en regard de F_2 mesurent un coup en "même" temps (en dessous de la précision de mesure temporelle du détecteur), alors, dans le cas d'une onde, la probabilité d'un coup en F_1 , p_1 , est égale à la probabilité d'un coup en F_2 , p_2 , et est proportionnelle à l'intensité I de l'onde et la probabilité de coïncidence est proportionnelle à I^2 . Dans le cas d'un photon unique, qui passe soit par F_1 soit par F_2 , la probabilité de coïncidence est toujours nulle. Ainsi, si on appelle

$$\alpha = \frac{p_c}{p_1 p_2}, \quad (5.1)$$

cette quantité est égale à $\alpha = \overline{I^2}/\overline{I}^2$ dans le cas d'une onde et est égale à $\alpha = 0$ dans le cas de photons uniques. D'après l'inégalité de Schwartz, on a donc $\alpha \geq 1$ dans le cas d'une onde et $\alpha = 0$ dans le cas de photons uniques. Pour générer des photons uniques, il ne faut pas diminuer l'intensité d'une onde. Il faut prendre un atome unique que l'on va exciter, comme dans Fig.5.1, et tôt ou tard il va se désexciter en émettant exactement un photon. Dans le cas de la cascade de Calcium, expérimentalement il y a $\sim 10^6$ cascades/s, c'est à dire une cascade toutes les μs à peu près. La durée de vie de l'état intermédiaire (entre ν_1 et ν_2) étant de ~ 5 ns, il est facile de repérer une émission dans le vert (ν_1) et de se préparer, dans les 5 ns qui suivent en moyenne, pour bénéficier du photon bleu unique (ν_2) qui va être émis.

5.2 Expérience de Wheeler à choix retardé

Ces générateurs de photons uniques sont très utiles et une première application dont je souhaite vous parler concerne une expérience de pensée célèbre dite du "choix retardé" de Wheeler.

C'est en 1978 que J. A. Wheeler (le directeur de thèse de Feynman et l'inventeur du mot *trou noir*) imagine une expérience de pensée utilisant la double fente d'Young. On sait que pour qu'une figure d'interférence se forme sur un écran situé derrière les fentes il faut qu'elles soient ouvertes toutes les deux. Si l'une est fermée, on observe sur l'écran le résultat classique de l'image géométrique de la fente restée ouverte (aux effets de diffraction près).

Que deviennent ces résultats si, de la source, partent des photons uniques? Si les deux fentes sont ouvertes, on observe les photons uniques impacter l'écran selon une distribution correspondant à la figure d'interférence et, si une des fentes est fermée, selon une distribution correspondant à l'image géométrique classique.

Dans le cas des photons uniques où les deux fentes sont ouvertes, il semble donc légitime de se demander par où passent les photons? Par la fente 1, par la fente 2, par les deux à la fois? Pour faire une figure d'interférence il doivent clairement passer par les deux ... vraiment? (*The photon goes through both slits, as evidenced in interference*

fringes, and yet simultaneously through only one, as evidenced in lateral momentum kick, p. 13, J. A. Wheeler in *Mathematical foundations of quantum theory*, A. R. Marlow 1978)

En fait, selon Bohr, il n'est pas légitime de se poser les deux questions en même temps. On ne peut tout simplement pas se demander (i) s'il y a des interférences d'un côté et (ii) d'où viennent les photons de l'autre.

Dans le cadre d'autres interprétations, à variables cachées, on peut imaginer que le photon reçoit l'information de la configuration (deux fentes ouvertes ou pas) en entrant dans le dispositif expérimental et choisit donc de passer, selon le cas, par les deux fentes ou par une seule. Pour invalider cette hypothèse, à laquelle Wheeler ne croyait pas, il a imaginé un dispositif très ingénieux où on déciderait de choisir la configuration après que le photon ait passé le plan des deux fentes.

Le dispositif de l'expérience de pensée consiste à laisser l'écran d'observation (pour voir les interférences) ou à l'enlever très rapidement après que le photon ait passé les fentes et avant qu'il n'arrive au niveau de l'écran. Ce changement peut être opéré de façon aléatoire afin d'éviter tout conflit avec des interprétations de la mécanique quantique où la conscience de l'observateur a de l'importance sur l'acte de mesure.

Expérimentalement, lorsque l'écran reste en place, on observe les photons l'impacter selon une figure d'interférence. Lorsqu'il est retiré, on observe des coups provenant de la fente 1 ou de la fente 2 mais jamais des deux à la fois (pas de coïncidence). Ainsi, on voit que la *décision* du photon de passer par une fente ou deux, si l'on se permet de raisonner en ses termes, se fait au dernier moment, au moment de la détection (car on peut reculer le choix aussi tard que possible avant l'impact sur l'écran qui est une mesure). On peut donc dire que les résultats de cette expérience invalident l'existence de variables cachées.

Cette expérience a été réalisée en 2007 sur un interféromètre de Mach-Zehnder (et pas sur des fentes d'Young), par une équipe de l'école : V. Jacques, E Wu, F. Grosshans, F. Treussart, P. Grangier, A. Aspect et J.-F. Roch. Les détails sont dans l'article *Experimental realization of Wheeler's delayed-choice Gedanken Experiment*, *Science* **315**, 966 (2007).

5.3 Le paradoxe EPR

5.3.1 Le vocabulaire du problème

Le paradoxe EPR [EPR35] (pour Einstein, Podolsky et Rosen) a été soulevé en 1935 pour montrer, dans l'esprit des auteurs, que le caractère fondamentalement probabiliste de la mécanique quantique (même si l'on connaît parfaitement l'état initial du système) était la marque de son incomplétude.

Leur argumentation se base sur la définition de trois notions, a priori simple, mais qui sont bien plus profondes qu'on ne l'imagine de prime abord, que doivent vérifier une théorie physique.

La **complétude** qui stipule que chaque élément de réalité physique doit avoir un représentant dans la théorie physique.

Le **réalisme** qui impose que si la valeur d'une quantité physique peut être prédite avec certitude (probabilité 1) sans perturber le système alors la quantité a une réalité physique.

Enfin, la notion de **localité**, qui impose qu'il ne peut y avoir d'action à distance (spooky action at a distance). La mesure sur un système ne peut avoir de conséquence sur la mesure d'un autre système de genre espace (non causal).

EPR en déduisent que, sous certaines circonstances (lesquelles ?), la mécanique quantique n'est pas une théorie complète. Pour comprendre le problème sur un exemple un peu plus concret, considérons un atome de X radioactif qui se désintègre via une réaction β^+ (un proton du noyau se transforme en neutron et donne un positron et un neutrino : $p \rightarrow n + e^+ + \nu$). Le positron peut alors réagir avec un électron du cortège atomique (en général avec un électron de la couche K, la plus proche du noyau). Les deux s'annihilent pour former une paire de photons qui partent avec des quantités de mouvement opposées (conservation de la quantité de mouvement total) et avec des polarisations opposées (conservation du moment angulaire total).

L'état de polarisation des deux photons après leur création est alors

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2), \quad (5.2)$$

qui est un état de spin 0 (puisque le moment angulaire total avant la création était nul). Il est impossible de savoir avant de les mesurer si le photon 1 est émis dans l'état de polarisation + ou -. Même conclusion pour le photon 2. En revanche, on est sûr que si 1 est émis dans l'état + alors 2 est émis dans l'état - et vice-versa.

Maintenant, n'oublions pas que les deux photons partent dans deux directions opposées. On peut faire voyager ces deux photons dans des fibres optiques idéales qui interagissent très faiblement avec les photons individuels. L'un est envoyé vers Alice qui se trouve à Tokyo pendant que l'autre est envoyé vers Bob¹ à New-York en une fraction de seconde.

Le problème soulevé par EPR vient du fait que si l'on demande à Alice de mesurer la polarisation de son photon elle trouvera + dans 50% des cas et - dans 50 % des cas (pas de réalisme physique pour Alice) alors que dans le même temps, si Alice mesure +, Bob est sûr, avec probabilité 1 qu'il va mesurer - et vice versa (il y a du réalisme physique dans la mesure de Bob au sens de EPR). Puisqu'il n'y a pas d'action à distance (entre Bob et Alice), EPR concluent que la mécanique quantique ne contient pas d'information sur la mesure déjà réalisée par Alice (pas de réalisme physique), elle est donc incomplète.

l'information manquante (sur la mesure d'Alice), selon EPR, doit être cachée dans des paramètres "inaccessibles" à l'expérience mais qui doivent exister (comme le spin existait avant qu'on ne le découvre). On appelle ces paramètres des "variables cachées" et les théories qui font usage des ces variables, sans originalité aucune, les théories à variables cachées ou *hidden variable theory* (HVT) en anglais.

5.3.2 Les inégalités de Bell

C'est en 1964 que John Bell [Bel64] publie un article décisif qui propose un protocole expérimental permettant de voir si la nature peut être décrite par une théorie à variables

1. Alice et Bob, A et B, sont les noms donnés aux personnes auxquelles on fait échanger des messages à l'aide de photons, d'électrons ou de n'importe quels autres particules élémentaires dans les cours de mécanique quantique

cachées (classique) ou si elle se comporte de façon purement quantique – c’est à dire que le résultat d’une mesure n’est pas préexistant à la mesure comme en physique classique.

John Bell montre qu’il existe des circonstances expérimentales où les théories réalistes et locales sont incompatibles avec la mécanique quantique. A ce stade, en 1964, il ne s’agit encore que d’une expérience de pensée qui implique des mesures de polarisation de la part de Alice et Bob.

On reprend ici les mêmes notations que l’article original [Bel64]. Au lieu de faire le raisonnement avec des particules de spin $1/2$, on va le faire avec des photons (qui ont été utilisés pour les expériences qui servent plus tard à reproduire le protocole de Bell). On suppose donc que deux photons, issus de la même interaction, se déplacent dans des directions opposées avec leur état de spin donné par l’état de Bell (5.2).

Alice et Bob observent chacun de leur côté le photon qui se dirige vers eux et l’analyse à travers un polariseur qu’ils ont orienté indépendamment l’un de l’autre (ils ne se sont pas donné le mot).

5.3.3 Interprétation de Bell par une théorie à variables cachées

Dans un premier temps, nous allons faire comme si les deux photons obéissaient à une théorie à variables cachées (classique). Appelons λ la liste de ces paramètres cachés.

L’hypothèse de *réalisme* implique que les mesures de Alice (A_{mes}) et Bob (B_{mes}) dépendent du même λ puisque les deux photons sont issus de la même interaction et doivent donc partager les mêmes variables cachées. Les résultats de mesure d’Alice ou Bob sont au nombre de trois : 0 si elle ne détecte rien, +1 si elle détecte une polarisation $|+\rangle$ et -1 si elle détecte une polarisation $|-\rangle$.

L’hypothèse de *localité* implique que la façon dont Alice oriente son polariseur, suivant la direction \mathbf{a} (qui est un vecteur unitaire normal), ne doit pas influencer la mesure que fait Bob de son photon avec son polariseur orienté suivant \mathbf{b} (orientation inconnue d’Alice et en général différent de \mathbf{a}). Ainsi,

$$A_{\text{mes}} = A(\lambda, \mathbf{a}), \quad (5.3)$$

$$B_{\text{mes}} = B(\lambda, \mathbf{b}). \quad (5.4)$$

Les variables cachées λ sont des variables aléatoires. Il existe donc une distribution des tirages de λ , que l’on appelle $\rho(\lambda)$, telle que

$$\int \rho(\lambda) d\lambda = 1. \quad (5.5)$$

La probabilité conjointe des mesures de A et B est alors donnée par

$$\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle = \int d\lambda \rho(\lambda) A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}) \quad (5.6)$$

On suppose que pour chaque réalisation de l’expérience, où Alice et Bob reçoivent des photons coincident, Alice mesure en premier et elle garde toujours la même orientation, \mathbf{a} , de son polariseur. Bob, quant à lui, va tester deux orientations : \mathbf{b} et \mathbf{b}' . John Bell [Bel64] a remarqué que la combinaison suivante

$$\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle = \int d\lambda \rho(\lambda) [A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}) - A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}')] \quad (5.7)$$

pouvait aussi s'écrire de la façon suivante

$$\int d\lambda \rho(\lambda) A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}) [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b}')] - \int d\lambda \rho(\lambda) A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}') [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b})] \quad (5.8)$$

et comme les produits AB sont forcément plus petits que 1, on en déduit que

$$\begin{aligned} |\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| &= \int d\lambda \rho(\lambda) A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}) [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b}')] \\ &\quad - \int d\lambda \rho(\lambda) A(\lambda, \mathbf{a}) B(\lambda, \mathbf{b}') [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b})] \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} |\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| &\leq \left| \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b}')] \right| \\ &\quad + \left| \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm A(\lambda, \mathbf{a}') B(\lambda, \mathbf{b})] \right| \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$|\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| \leq |1 \pm \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle| + |1 \pm \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle| \quad (5.11)$$

Or, puisque les $\langle AB \rangle$ sont tous compris entre -1 et 1, les valeurs absolues du membre de droite ne sont plus nécessaires et on a

$$|\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| \leq 2 \pm (\langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle + \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle) \quad (5.12)$$

$$|\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| \leq 2 \pm |\langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle + \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle| \quad (5.13)$$

$$|\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| \leq 2 - |\langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle + \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle| \quad (5.14)$$

qui aboutit à la forme CHSH (pour Clauser, Horne, Shimony et Holt) de l'inégalité de Bell

$$S(\mathbf{a}, \mathbf{a}', \mathbf{b}, \mathbf{b}') = |\langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle| + |\langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle + \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle| \leq 2, \quad (5.15)$$

où S est appelé la fonction des paramètres de Bell, et cette inégalité doit être satisfaite par toute théorie réaliste et locale (qui satisfait l'eq.(5.6)).

5.3.4 Interprétation de Bell par la mécanique quantique

Les expériences historiques ont été faites avec des photons de spin 1. En fait il s'agit d'hélicité 1 car seuls les deux états de spin 1 (+1 et -1) sont observables sur une particule de masse nulle comme le photon. La valeur propre 0 n'est pas observable. Supposons que l'on fasse des mesures verticales et horizontales de polarisation. On appellera $|V\rangle$ et $|H\rangle$ la base propre des états de polarisation linéaire d'un photon telles qu'ils donnent respectivement une probabilité de 1 pour une mesure verticale et une probabilité 1 pour une mesure horizontale. Maintenant, supposons, pour les besoins expérimentaux, que l'on mesure les polarisations suivant un axe verticale et horizontale pivotés d'un angle θ . Un état quelconque de polarisation d'un photon va donc s'écrire

$$|V_\theta\rangle = \cos(\theta) |V\rangle + \sin(\theta) |H\rangle, \quad (5.16)$$

$$|H_\theta\rangle = -\sin(\theta) |V\rangle + \cos(\theta) |H\rangle, \quad (5.17)$$

de sorte que $|V_\theta\rangle$ et $|H_\theta\rangle$ restent orthogonaux dans le sens direct et que pour $\theta = 0$ on retrouve les états propres $|V\rangle$ et $|H\rangle$. On a fait une rotation 2D d'angle θ sur l'état Ψ_P de polarisation en utilisant l'unique générateur des rotations 2D. On a fait une transformation unitaire.

L'observable de polarisation suivant l'angle θ est donc de la forme

$$\hat{P}_\theta = (+1) |V_\theta\rangle\langle V_\theta| + (-1) |H_\theta\rangle\langle H_\theta|, \quad (5.18)$$

qui est donc une matrice diagonale $(1, -1)$ dans la base $\{|V_\theta\rangle, |H_\theta\rangle\}$ mais que l'on peut facilement réécrire dans la base commune $\{|V\rangle, |H\rangle\}$ comme

$$\hat{P}_\theta = \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

Dans l'état $|\Psi\rangle$ défini en (5.2), on peut calculer la moyenne de la mesure de la polarisation pour le photon 1 (ou pour un spin 1/2) dans la direction \mathbf{a} et pour le photon 2 dans la direction \mathbf{b} . On a

$$E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle \Psi | \hat{P}_{1\alpha} \otimes \hat{P}_{2\beta} | \Psi \rangle = -\cos(2(\alpha - \beta)), \quad (5.20)$$

$$= \langle \Psi | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})_1 \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})_2 | \Psi \rangle = -\cos(\alpha - \beta) \quad (5.21)$$

et il s'agit de $-\cos(\alpha - \beta)$ pour des spins 1/2 intriqués. En choisissant bien les angles $\alpha, \alpha', \beta, \beta'$, avec des séparations de $\pi/8$, pour les photons, ou $\pi/4$ pour les spin 1/2 (les *awkward Irish angels* comme les a appelé John Bell). Avec $\alpha - \beta = \alpha' - \beta' = \beta - \alpha' = \pi/8$ pour les photons, et $\pi/8$ pour les spins 1/2, et donc $\alpha - \beta' = 3\pi/8$ pour les photons et $3\pi/4$ pour les spins 1/2, la fonction de Bell dans le cas quantique est

$$\begin{aligned} S(\mathbf{a}, \mathbf{a}', \mathbf{b}, \mathbf{b}') &= | \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}) \rangle - \langle A(\mathbf{a}) B(\mathbf{b}') \rangle | + | \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}') \rangle + \langle A(\mathbf{a}') B(\mathbf{b}) \rangle | \\ &= | E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - E(\mathbf{a}, \mathbf{b}') | + | E(\mathbf{a}', \mathbf{b}') - E(\mathbf{a}', \mathbf{b}) | \\ &= | -\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha - \beta') | + | -\cos(\alpha' - \beta') - \cos(\alpha' - \beta) | \\ &= | -\sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/2 | + | -\sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/2 | = 2\sqrt{2} \approx 2.828 > 2. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Il y a une violation claire de l'inégalité de Bell ce qui prouve que la mécanique quantique n'est pas réaliste et/ou pas locale.

5.4 Théorème de non-clonage et cryptographie quantique

Ce théorème, très simple comme on va le voir, est à la base de la sécurité de ce que l'on appelle la cryptographie quantique. Imaginons que l'on dispose d'un état quantique pur $|\Psi\rangle$ quelque part et que l'on souhaite le reproduire à l'identique sur un état $|\Phi\rangle$ existant sans avoir à le mesurer. Une telle photocopieuse quantique, si elle existe, doit agir sur les deux états pour en former deux identiques

$$|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle \rightarrow |\Psi\rangle \otimes |\Psi\rangle. \quad (5.23)$$

C'est vraiment le principe de la photocopieuse, où $|\Psi\rangle$ représente la feuille blanche remplie de lignes et d'images que l'on souhaite reproduire et $|\Phi\rangle$ représente la feuille blanche vierge sur laquelle on souhaite reproduire le contenu $|\Psi\rangle$. Dans la photocopieuse il faut bien rentrer la feuille vierge et la feuille à recopier. Après fonctionnement de la photocopieuse il en ressort deux feuilles remplies identiques.

Cette photocopieuse quantique, appeler aussi machine à cloner, agit forcément de façon unitaire (si aucune mesure n'est réalisée) sur l'état initial pour donner l'état final. On doit donc avoir

$$\hat{U}(|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle) = |\Psi\rangle \otimes |\Psi\rangle \quad (5.24)$$

$$\text{same } \hat{U} \text{ for all } |\Psi\rangle \text{ and } |\Phi\rangle \quad (5.25)$$

où cette relation est valable pour tout $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$, c'est à dire aussi que la matrice unitaire \hat{U} est la même pour tout $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ (cette information est capitale pour la démonstration du théorème de non-clonage). Ainsi, sans perte de généralité, on peut écrire $|\Psi\rangle$ sur une base quelconque $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |E_n\rangle$ et la relation (5.24) implique

$$\hat{U}(|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle) = \sum_n c_n \hat{U}(|E_n\rangle \otimes |\Phi\rangle), \quad (5.26)$$

et puisque en vertu de cette même relation (5.24), et de l'hypothèse d'action (5.25), on a $\hat{U}(|E_n\rangle \otimes |\Phi\rangle) = |E_n\rangle \otimes |E_n\rangle$, alors

$$\hat{U}(|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle) = \sum_n c_n |E_n\rangle \otimes |E_n\rangle \neq |\Psi\rangle \otimes |\Psi\rangle. \quad (5.27)$$

On vient de montrer le théorème de non-clonage par l'absurde, qui stipule qu'il est en fait impossible de cloner un état quantique avec une photocopieuse qui vérifie (5.25).

On pourrait imaginer une photocopieuse qui ne vérifie pas cette hypothèse, ce qui revient à imaginer une photocopieuse dont la matrice unitaire $\hat{U}_{|\Psi\rangle}$ dépend de $|\Psi\rangle$, de l'état à cloner, auquel cas $\hat{U}_{|\Psi\rangle}(|E_n\rangle \otimes |\Phi\rangle) \neq |E_n\rangle \otimes |E_n\rangle$. Pourquoi ne peut on pas imaginer une telle machine ?

En cryptographie quantique, ce qui est quantique n'est en fait pas le cryptage mais la méthode d'échange de clé privé. On a justement pas besoin de crypter le message. Le cryptage est important quand on sait que le message peut être intercepté. Avec le théorème de non-clonage on est assuré que si la moindre partie du message est captée, ça détruit le message que l'on reçoit.

On porte le message sur des photons uniques entre Alice et Bob. Si Eve (pour *Eavesdropper*), prélève un photon unique, cela laisse des traces. Sur une impulsion classique, il est toujours possible de prélever quelques photons sans se faire débusquer.

5.5 Principe de la téléportation quantique

On suppose qu'Alice possède un état quantique à deux niveaux

$$|\Psi_A\rangle = \alpha |+_A\rangle + \beta |-_A\rangle \quad (5.28)$$

qu'elle souhaite transmettre à l'identique à Bob. Quand on parle de téléportation en mécanique quantique, il ne s'agit, en l'état actuel de la recherche, que de la transmission de l'état quantique d'un système à quelques niveaux et en aucun cas de l'état quantique complet d'un animal ou d'un humain comme dans Star-Trek.

Pour cette téléportation quantique, il faut un intermédiaire entre Alice et Bob, un générateur de particules intriquées. Ce générateur produit des couples de particules intriquées dont l'une est dirigée vers Alice et l'autre vers Bob. C'est ainsi que s'établit la connexion entre Alice et Bob. L'état de ce couple intriqué est

$$|\Phi_{A'B'}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_{A'} -_{B'}\rangle + |-_{A'} +_{B'}\rangle). \quad (5.29)$$

L'état des trois particules, avant une quelconque mesure, est donc l'état séparable suivant :

$$|\Psi\rangle_{\text{tot}} = |\Psi_A\rangle \otimes |\Phi_{A'B'}\rangle \quad (5.30)$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |+_A\rangle (|+_{A'} -_{B'}\rangle + |-_{A'} +_{B'}\rangle) + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |-_A\rangle (|+_{A'} -_{B'}\rangle + |-_{A'} +_{B'}\rangle). \quad (5.31)$$

le but maintenant est de faire une succession de transformations unitaires (évolutions sans mesure) sur cet état de tel sorte qu'une mesure ingénieuse de Bob lui donnera l'état d'Alice.

Il existe de nombreuses portes quantiques (des transformation unitaires particulières) qui peuvent être réalisées expérimentalement (avec des photons, des électrons et d'autres objets quantiques). La téléportation la plus simple nécessite l'utilisation d'une porte **cNOT** et d'une porte d'Hadamard **Had**.

Les transformations unitaires ne peuvent se réaliser expérimentalement que sur les parties de l'état $|\Psi\rangle_{\text{tot}}$ se trouvant chez Alice ou chez Bob car les dispositifs expérimentaux nécessaires pour faire une transformation unitaire n'agissent que localement (sur les particules reçues par Alice, A et A' , ou par Bob, B').

On commence par faire agir une porte **cNOT** du côté Alice, c'est à dire sur les particules A et A' . La transformation unitaire **cNOT** est décrite sous forme matricielle par

$$\hat{U}_{\text{cNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

dans la base $|+_A +_{A'}\rangle, |+_A -_{A'}\rangle, |-_A +_{A'}\rangle, |-_A -_{A'}\rangle$ qui est bien une matrice unitaire. C'est une transformation qui n'agit pas sur un état qui contient $|+_A\rangle$ et qui transforme $|-_A +_{A'}\rangle$ en $|-_A -_{A'}\rangle$ et vice-versa sur un état qui contient $|-_A\rangle$. Ainsi l'action de \hat{U}_{cNOT} sur l'état des trois particules est

$$\hat{U}_{\text{cNOT}} |\Psi\rangle_{\text{tot}} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} |+_A\rangle (|+_{A'} -_{B'}\rangle + |-_{A'} +_{B'}\rangle) + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |-_A\rangle (|+_{A'} +_{B'}\rangle + |-_{A'} -_{B'}\rangle), \quad (5.33)$$

qui n'est plus un état séparable. Les trois particules sont maintenant intriquées.

A ce stade, pour fixer les idées, si Alice faisait une mesure sur A et A' , l'état de B' s'en trouverait automatiquement affecté de la façon suivante :

- (i) si Alice trouvait $|+_{A+A'}\rangle$ alors l'état de la particule chez Bob se réduirait en $|-_{B'}\rangle$,
- (ii) si Alice trouvait $|+_{A-A'}\rangle$ alors l'état de la particule chez Bob se réduirait en $|+_{B'}\rangle$,
- (iii) si Alice trouvait $|-_{A+A'}\rangle$ alors l'état de la particule chez Bob se réduirait en $|+_{B'}\rangle$,
- (vi) si Alice trouvait $|-_{A-A'}\rangle$ alors l'état de la particule chez Bob se réduirait en $|-_{B'}\rangle$.

Cela ne correspond, en aucun cas, à l'état $\alpha |+_B\rangle + \beta |-_B\rangle$ que l'on cherche à obtenir chez Bob. Pour arriver à cet état, il faut encore opérer une transformation unitaire chez Alice : une transformation d'Hadamard.

La transformation d'Hadamard est décrite sous forme matricielle de la façon suivante

$$\hat{U}_{\text{Had}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

dans la base $|+_A\rangle, |-_A\rangle$. On peut, encore une fois, noter que cette transformation est unitaire. Si à l'état obtenu en (5.35) on applique la transformation (5.34) on obtient un état beaucoup plus intéressant :

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{Had}} \hat{U}_{\text{cNOT}} |\Psi\rangle_{\text{tot}} &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(\frac{|+_A\rangle + |-_A\rangle}{\sqrt{2}} \right) (|+_{A'} -_{B'}\rangle + |-_{A'} +_{B'}\rangle) \\ &\quad + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left(\frac{|+_A\rangle - |-_A\rangle}{\sqrt{2}} \right) (|+_{A'} +_{B'}\rangle + |-_{A'} -_{B'}\rangle). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Maintenant, si Alice fait une mesure sur A et A' , l'état de B' s'en trouve automatiquement affecté de la façon suivante :

- (i) si Alice trouve $|+_{A+A'}\rangle$ alors Bob récupère $\alpha |-_{B'}\rangle + \beta |+_B\rangle$,
- (ii) si Alice trouvait $|+_{A-A'}\rangle$ alors Bob récupère $\alpha |+_B\rangle + \beta |-_{B'}\rangle$,
- (iii) si Alice trouvait $|-_{A+A'}\rangle$ alors Bob récupère $\alpha |-_{B'}\rangle - \beta |+_B\rangle$,
- (vi) si Alice trouvait $|-_{A-A'}\rangle$ alors Bob récupère $\alpha |+_B\rangle - \beta |-_{B'}\rangle$.

On voit, qu'à une transformation unitaire près du côté de chez Bob, on trouve bien l'état téléporté $\alpha |+_B\rangle + \beta |-_{B'}\rangle$ attendu.

Le dernier problème à régler, que ne peut résoudre Bob sans une information importante d'Alice, c'est justement le choix de la transformation unitaire qu'il doit opérer pour trouver exactement l'état téléporté. Pour cela, Alice doit lui faire parvenir, par un moyen de communication classique (qui ne transmet pas l'information plus vite que la lumière), l'état de sa mesure sur A et A' . Alors, et alors seulement, Bob saura comment transformer l'état qu'il a obtenu de façon supraluminal pour obtenir avec certitude l'état attendu $\alpha |+_B\rangle + \beta |-_{B'}\rangle$.

Chapitre 6

Systèmes instationnaires

6.1 Règle d'or de Fermi

On sait qu'un système quantique dans un état stationnaire d'un hamiltonien \hat{H}_0 (lui-même stationnaire) va rester dans cet état *ad vitam æternam*. Que ce passe-t-il dans le cas où cet état est perturbé par un phénomène instationnaire décrit par un hamiltonien $\hat{h}(t)$ dépendant du temps. On ne suppose pas, à ce stade, que la perturbation est petite.

On note $|n\rangle$ les vecteurs propres de \hat{H}_0 de valeurs propres E_n . Ainsi

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (6.1)$$

où les $|n\rangle$ sont indépendants du temps. On se demande alors ce qu'il se passe pour les états stationnaires de \hat{H}_0 lorsque l'on branche, disons à $t = 0$, la perturbation $\hat{h}(t)$ de sorte que le hamiltonien total devient dépendant du temps : $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{h}(t)$.

Suppose qu'à $t = 0$ l'état du système est donné par $|\Psi(t = 0)\rangle = |I\rangle$ (I pour initial). On peut déterminer l'évolution de $|\Psi(t)\rangle$ aux temps ultérieurs ($t > 0$) et avant mesure en utilisant l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}_0 |\Psi(t)\rangle + \hat{h}(t) |\Psi(t)\rangle. \quad (6.2)$$

Ce système, à cause de la présence de la perturbation $\hat{h}(t)$ va évoluer vers un état que l'on peut écrire sous la forme d'une combinaison linéaire de $|n\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle, \quad (6.3)$$

où, initialement, $c_{n=I}(t = 0) = 1$ et $c_{n \neq I}(t = 0) = 0$. Si on arrive à déterminer l'évolution des c_n au cours du temps il est alors possible de déterminer la probabilité pour que le système passe de l'état $|I\rangle$ initialement à l'état $|F\rangle$ (final) au temps $t > 0$. Cette probabilité est donnée par

$$P_{I \rightarrow F}(t) = |\langle \Psi(t) | F \rangle|^2 = |c_F(t)|^2. \quad (6.4)$$

Pour cela, on peut injecter (6.3) dans (6.2) et on obtient

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt} |n\rangle = \sum_n c_n E_n |n\rangle + \sum_n c_n \hat{h}(t) |n\rangle, \quad (6.5)$$

dont on peut faire le produit par $\langle m|$ pour trouver, $\forall m \in \mathbb{N}$,

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = E_m c_m + \sum_n c_n \langle m | \hat{h}(t) | n \rangle. \quad (6.6)$$

Si \hat{h} est nul, la solution est triviale : $c_m(t) = \eta_m \exp(-i\frac{E_m}{\hbar} t)$. Dans le cas où \hat{h} est quelconque, il suffit de supposer que la constante η_m dépend du temps et remplacer $c_m(t) = \eta_m(t) \exp(-i\frac{E_m}{\hbar} t)$ dans (6.5) pour obtenir

$$\frac{d}{dt} \eta_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \eta_n(t) e^{-i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar} t} \langle m | \hat{h}(t) | n \rangle. \quad (6.7)$$

Compte tenu de la forme des c_n , la probabilité cherchée, $P_{I \rightarrow F}(t) = |c_F(t)|^2$ est aussi égale à $|\eta_F(t)|^2$. Dans le cas général, cette équation n'a pas de solution analytique simple. Sous certaines hypothèses simplificatrices, mais néanmoins utiles en pratique, on peut trouver des solutions intéressantes.

La première de ces hypothèses est que le temps $t > 0$ que l'on considère est "petit" (on verra un peu plus tard "petit" par rapport à quoi). Initialement, on a $\eta_I(t=0) = 1$ et $\eta_{m \neq I}(t=0) = 0$. Ainsi, dans un voisinage de $t = 0$,

$$\frac{d}{dt} \eta_{m \neq I}(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\frac{(E_I - E_m)}{\hbar} t} \langle m | \hat{h}(t) | I \rangle, \quad (6.8)$$

où on a juste remplacé $\eta_{n=I}(t) \approx 1$ et $\eta_{m \neq I}(t) \approx 0$ dans le membre de droite de (6.7). Ainsi, la probabilité pour passer de l'état $|I\rangle$ (à $t = 0$) à l'état $|F\rangle$ (à $t > 0$) sous l'influence de \hat{h} est

$$P_{I \rightarrow F}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t e^{-i\frac{(E_I - E_F)}{\hbar} \tau} \langle F | \hat{h}(\tau) | I \rangle d\tau \right|^2. \quad (6.9)$$

On peut maintenant voir l'effet de ce résultat sur plusieurs cas de figure d'intérêt physique

6.1.1 Apparition soudaine d'un autre effet stationnaire

Dans ce cas de figure, $\hat{h}(t) = \hat{h}_0 \Theta(t)$ où $\forall t < 0, \Theta(t) = 0$ et $\forall t \geq 0, \Theta(t) = 1$. Si on pose $\Omega = \frac{(E_I - E_F)}{\hbar}$ alors l'équation (6.9) donne

$$\begin{aligned} P_{I \rightarrow F}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \times \left| \int_0^t e^{-i\Omega \tau} d\tau \right|^2, \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \times \frac{\sin^2(\frac{\Omega}{2} t)}{(\frac{\Omega}{2})^2}, \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \times \frac{\sin^2(\frac{\Omega}{2} t)}{(\frac{\Omega}{2} t)^2} t^2, \\ &\approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \times 2\delta(\Omega) t. \end{aligned}$$

Ainsi, la taux de transition $\Gamma_{I \rightarrow F}$, défini comme la probabilité de transition par unité de temps, est constant et égal à

$$\begin{aligned}\Gamma_{I \rightarrow F} &= \frac{2}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \delta(\Omega) \\ &= \frac{2}{\hbar^2} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \delta\left(\frac{(E_I - E_F)}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2}{\hbar} |\langle F | \hat{h}_0 | I \rangle|^2 \delta(E_I - E_F)\end{aligned}$$

6.1.2 Perturbation oscillante

Dans ce cas de figure, $\hat{h}(t) = \hat{h}_0 e^{i\omega t}$ (par exemple un champ électrique oscillant autour d'un atome dans l'approximation dipolaire).

6.2 Equation de Lindblad

Comme on l'a vu à la section §2.3, l'état quantique d'un système ouvert n'est pas pur. La matrice densité qui le caractérise correspond à la trace de la matrice densité de l'univers sur l'environnement (l'extérieur du système). Cette matrice densité réduite n'évolue pas comme la matrice densité totale, c'est à dire de façon unitaire. Le but de cette partie est justement de déterminer l'équation d'évolution de la matrice densité réduite.

On rappelle que S_X est notre système expérimental, dont nous souhaitons déterminer l'évolution, et S_E correspond à l'environnement de ce système expérimental.

On va supposer qu'à $t = 0$ l'état de l'univers est séparable entre S_X et S_E . On suppose, de plus, que l'état de l'environnement est pur déterminé par un ket $|0_E\rangle$ de l'espace de Hilbert de l'environnement (état qui n'est pas forcément un état propre associé à une quelconque observable). L'état du système expérimental, au moment où on le prépare, est caractérisé par une matrice densité (en général il s'agit d'un état de mélange). Ainsi, la matrice densité totale de l'univers, à l'instant initial de l'expérience, est

$$\rho^{XE}(t = 0) = \rho^X(t = 0) \otimes |0_E\rangle\langle 0_E|. \quad (6.10)$$

L'évolution de la matrice densité totale est une évolution unitaire¹ telle que

$$\rho^{XE}(t) = \hat{U}^{XE}(t) \cdot \rho^{XE}(t = 0) \cdot (\hat{U}^{XE}(t))^\dagger. \quad (6.11)$$

Afin de prendre la trace sur l'environnement à droite et à gauche de cette équation, pour faire apparaître la matrice densité réduite sur X à l'instant t , $\rho^X(t) = Tr_E(\rho^{XE}(t))$, il faut écrire l'équation précédente en composantes en prenant bien soin de séparer les composantes suivant X et celles suivant E.

Ainsi, pour une matrice générique M qui agit de $H_X \otimes H_E$ vers $H_X \otimes H_E$, ce qui est le cas de ρ^{XE} et de \hat{U}^{XE} , on écrira

$$M^{XE} = (M_{i\mu, j\nu}^{XE}), \quad (6.12)$$

1. $\hat{U}^{XE}(t) = \mathcal{T}e^{-\frac{i}{\hbar}(\int_0^t \hat{H}^{XE}(\tau) d\tau)}$ qui transforme l'état pur initial en l'état pur final en respectant l'équation de Schrödinger

où les indices romains (i et j) correspondent à X et les indices grecs (μ et ν) à E. L'équation matricielle (6.11) se transforme alors, en composantes, de la façon suivante

$$\rho_{i\mu,j\nu}^{XE}(t) = \hat{U}_{i\mu,j\nu_1}^{XE}(t) \rho_{j_1\nu_1,j_2\nu_2}^{XE}(t=0) \left(\hat{U}^{XE}(t)\right)_{j_2\nu_2,j\nu}^\dagger, \quad (6.13)$$

où on a utilisé les notations d'Einstein². Puisque les termes non nul de $\rho_{j_1\nu_1,j_2\nu_2}^{XE}(t=0)$ correspondent à $\nu_1 = 0$ et $\nu_2 = 0$, car l'état initial de l'environnement est $|0_E\rangle\langle 0_E|$, on peut simplifier l'expression en

$$\begin{aligned} \rho_{i\mu,j\nu}^{XE}(t) &= \hat{U}_{i\mu,j_1 0}^{XE}(t) \rho_{j_1 0,j_2 0}^{XE}(t=0) \left(\hat{U}^{XE}(t)\right)_{j_2 0,j\nu}^\dagger, \\ &= \hat{U}_{i\mu,j_1 0}^{XE}(t) \rho_{j_1 j_2}^X(t=0) \left(\hat{U}^{XE}(t)\right)_{j_2 0,j\nu}^\dagger. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Afin de trouver $\rho^X(t)$ à gauche de l'équation précédente, il faut prendre la trace sur les indices d'environnement, qui consiste formellement à poser $\nu = \mu$

$$\rho_{ij}^X(t) = \hat{U}_{i\mu,j_1 0}^{XE}(t) \rho_{j_1 j_2}^X(t=0) \left(\hat{U}^{XE}(t)\right)_{j_2 0,j\mu}^\dagger. \quad (6.15)$$

Si, pour simplifier l'écriture, on appelle $(\hat{V}_\mu)_{ij} = \hat{U}_{i\mu,j_1 0}^{XE} = \langle \mu_E | \hat{U}^{XE} | 0_E \rangle$, alors

$$\rho^X(t) = \sum_\mu V_\mu \cdot \rho^X(t=0) \cdot V_\mu^\dagger \quad (6.16)$$

où les V_μ ne sont pas hermitiens en général mais ils vérifient la relation

$$\sum_\mu V_\mu \cdot V_\mu^\dagger = 1, \quad (6.17)$$

où 1 est ici à prendre au sens de l'identité sur H_X .

Afin de déterminer l'équation d'évolution de ρ^X la plus générale, on écrit

$$\rho^X(t + \Delta t) = \sum_\mu V_\mu(\Delta t) \cdot \rho^X(t) \cdot V_\mu^\dagger(\Delta t), \quad (6.18)$$

où les $V_\mu(\Delta t)$ doivent être tels que, lorsque $\Delta t = 0$, l'un est l'identité et les autres sont nuls de sorte que $\rho^X(t + 0) = \rho^X(t)$. Supposons, sans perte de généralité, que

$$V_0(\Delta t) = 1 - \left(\hat{K} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}\right) \Delta t, \quad (6.19)$$

$$V_{\mu \neq 0}(\Delta t) = \sqrt{\Delta t} L_\mu, \quad (6.20)$$

qui vérifie bien la contrainte qui vient juste d'être énoncée. En injectant (6.19) et (6.20) dans (6.18), on aboutit, à l'ordre 1 en Δt , à l'équation suivante

$$\begin{aligned} \rho^X(t + \Delta t) &= V_0 \rho^X(t) V_0^\dagger + \Delta t \sum_\mu L_\mu \rho^X L_\mu^\dagger \\ &= \rho^X - \{K, \rho^X\} \Delta t - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho^X] \Delta t + \Delta t \sum_\mu L_\mu \rho^X L_\mu^\dagger. \end{aligned} \quad (6.21)$$

2. La notation d'Einstein consiste à faire la somme sur les indices répétés dans un produit, exemple : $a_i b_i$ signifie en détail $\sum_i a_i b_i$.

Ainsi, l'équation d'évolution la plus générale de la matrice densité réduite (que l'on l'appelle ρ maintenant pour simplifier l'écriture), qui est aussi connue sous le nom d'équation de Lindblad (du nom du ****)

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \rho] - \{K, \rho\} + \sum_{\mu} L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger}, \quad (6.22)$$

où

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\mu} L_{\mu} L_{\mu}^{\dagger}, \quad (6.23)$$

afin que l'équation (6.22) reste valable même dans le cas d'un mélange maximal ($\rho \propto 1$, où 1 est l'identité sur H_X) qui ne peut plus évoluer ($d\rho/dt = 0$) en vertu du second principe de la thermodynamique. On peut aussi retrouver (6.23) en injectant (6.19) et (6.20) dans (6.17) et en développant jusqu'à l'ordre 1 en Δt .

On constate que si tous les L_{μ} sont nuls, ce qui veut dire qu'il n'y a aucune interaction entre le milieu expérimental et l'environnement, l'équation (6.22) se transforme en

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \rho], \quad (6.24)$$

qui correspond à l'équation d'évolution de la matrice densité d'un système fermé. L'équation (6.24) correspond à une évolution unitaire alors que l'équation (6.22) correspond à une évolution dissipative (et donc non unitaire). Une partie de l'information est perdue au cours du temps dans l'environnement.

Bibliographie

- [Bel64] J. S. Bell. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics*, 1 :195, 1964.
- [BKB⁺20] H. Bartolomei, M. Kumar, R. Bisognin, A. Marguerite, J.-M. Berroir, E. Bocquillon, B. Pla  sais, A. Cavanna, Q. Dong, U. Gennser, Y. Jin, and G. F  ve. Fractional statistics in anyon collisions. *Science*, 368 :173, 2020.
- [Boh13] Niels Bohr. On the constitution of atoms and molecules. *Philos. Mag.*, 26 :1, 1913.
- [Bor27] Max Born. Quantum mechanics of collision processes. *Zeit. Phys.*, 38 :803, 1927.
- [dB25] L. de Broglie. *Recherches sur la th  orie des quantas*. PhD thesis, Universit   de Paris, 1925.
- [EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47 :777, 1935.
- [LM77] J. M. Leinaas and J. Myrheim. On the theory of identical particles. *Nuovo Cimento*, 37 :1, 1977.
- [Omn00] R. Omn  s. *Comprendre la m  canique quantique*. EDP Sciences, 2000.
- [Rut11] E. Rutherford. The scattering of alpha and beta particles by matter and the structure of the atom. *Philos. Mag.*, 6 :21, 1911.
- [Sch26] E. Schrodinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28 :1049, 1926.
- [Sch35] E. Schrodinger. The present status of quantum mechanics. *Die Naturwissenschaften*, 23, 1935.
- [UG26] G. E. Uhlenbeck and S. Goudsmidt. Spinning electrons and the structure of spectra. *Nature*, 117 :2938, 1926.